

# Wstęp do kwantowej teorii transportu elektronowego

Sylwia Gołąb, Paweł Rzońca

22 stycznia 2016

## Spis treści

<b>1</b>	<b>Elektronowa teoria materii</b>	<b>2</b>
1.1	Początki teorii elektronowej (subiektywnie)	2
1.2	Teoria elektronowa Lorenza	3
1.3	Makroskopowa elektrodynamika ośrodków materialnych	4
1.3.1	Wyprowadzenie makroskopowych praw Maxwella z mikroskopowych odpowiedników	5
<b>2</b>	<b>Makroskopowy opis własności elektronowych ośrodków materialnych</b>	<b>6</b>
2.1	Makroskopowa elektrodynamika ośrodków materialnych	6
2.1.1	Podsumowanie	6
2.1.2	Zasada zachowania ładunku	7
2.2	Zlinearyzowane relacje konstytutywne ośrodków materialnych	10
2.2.1	Ogólna postać równań materiałowych	10
2.2.2	Równania materiałowe a teoria liniowej odpowiedzi	10
2.2.3	Uogólnienie na wiele pól zaburzających - zjawiska krzyżowe	11
2.2.4	Klasyfikacja materiałów ze względu na jądro całkowite równania materiałowego	11
2.2.5	Równanie materiałowe dla ośrodka homogenicznego- konsekwencje	12
2.2.6	Punkt widzenia	13
<b>3</b>	<b>Metody opisu klasycznej dynamiki cząstek</b>	<b>13</b>
3.1	Mechanika newtonowska	13
3.2	Mechanika hamiltonowska	14
3.2.1	Przestrzeń fazowa $\mu$	14
3.2.2	Funkcja Hamiltona w przybliżeniu minimalnego sprzężenia elektromagnetycznego	15
3.2.3	Kanoniczne równania Hamiltona	15
3.2.4	Zależność funkcji Hamiltona od czasu	15
3.3	Nawiasy Poissona	16
<b>4</b>	<b>Metody Statystyczne w układach wielocząstkowych</b>	<b>16</b>
4.1	Model klasycznego gazu doskonałego	16
4.1.1	Wstęp	16
4.1.2	Definicja	17
4.1.3	Stała Schmidta	17
4.1.4	Rozwiązanie równań ruchu metodą Hamiltona	17
4.1.5	Cząsteczkowa przestrzeń fazowa $\mu$	17
4.1.6	Opis gruboziarnisty	18
4.2	Funkcja rozkładu gęstości prawdopodobieństwa	19
4.2.1	Definicja	19
4.2.2	Równanie kinetyczne dla tej funkcji	19

4.2.3	Momenty funkcji rozkładu gęstości prawdopodobieństwa . . . . .	20
4.2.4	Interpretacja . . . . .	21
<b>5</b>	<b>Kinetyka fizyczna</b>	<b>23</b>
5.1	Równania transportowe Własowa [Vlasova] i Boltzmana . . . . .	23
5.1.1	Funkcja rozkładu $f(\vec{r}, \vec{p}, t)$ na przestrzeni $\mu$ , $\dim[\mu] = 6$ . . . . .	23
5.1.2	Równanie Własowa . . . . .	24
5.1.3	Równanie Boltzmana . . . . .	25
5.2	Zespoły statystyczne i przestrzeń fazowa $\Gamma$ . . . . .	27
5.2.1	Twierdzenie Liouville'a . . . . .	27
<b>6</b>	<b>Klasyczna teoria przewodnictwa elektronowego metali</b>	<b>27</b>
6.1	Teoria Drudego-Lorenza . . . . .	27
6.1.1	Założenia Drudego . . . . .	27
6.1.2	Prawo Wiedemana-Franza . . . . .	28
6.1.3	Założenia Lorenza (1905) . . . . .	28
6.1.4	Aksjomatyczne sformułowanie teorii Drudego-Lorenza . . . . .	28
6.1.5	Wyprowadzenie Prawa Ohma z teorii D-L . . . . .	29
<b>7</b>	<b>Półklasyczna teoria przewodnictwa elektronowego metali</b>	<b>30</b>
7.1	Zdegenerowany gaz elektronowy . . . . .	30
7.1.1	Wstęp . . . . .	30
7.1.2	Zakaz Pauliego . . . . .	31
7.1.3	Stan układu- liczby kwantowe . . . . .	31
7.1.4	Poziomy energetyczne . . . . .	32
7.1.5	Rozkład Fermiego-Diraca . . . . .	33
7.2	Całki zdarzeń $I[f(\vec{r}, \vec{p}, t)]$ - przybliżenie czasu relaksacji (PCR) . . . . .	35
7.2.1	Całka zdarzeń- definicja . . . . .	35
7.2.2	Równanie Boltzmana- rozwiązanie . . . . .	35
<b>8</b>	<b>Kwantowe modyfikacje w równaniu Boltzmanna</b>	<b>38</b>
8.1	Zakres stosowalności równania Boltzmanna . . . . .	38
8.1.1	Równanie Boltzmanna . . . . .	38
8.1.2	Funkcja falowa . . . . .	39
8.1.3	Kryterium stosowalności równania Boltzmanna . . . . .	40
8.1.4	Zakresy stosowalności transportu elektronowego . . . . .	41
8.2	Elementy teorii przejść kwantowych- obliczenie elementu $Q_{pp'}$ . . . . .	41
8.2.1	Ustalenie hamiltonianu i równania Schroedingera . . . . .	41
8.2.2	Rozwiązanie równania Schroedingera- etap I . . . . .	42
8.2.3	Rozwiązanie równania Schroedingera- etap II . . . . .	43
8.2.4	Znaczenie współczynników $C_m$ . . . . .	44
8.2.5	Obliczenie współczynników $Q_{pp'}$ . . . . .	45

# 1 Elektronowa teoria materii

## 1.1 Początki teorii elektronowej (subiektywnie)

Elektrodynamika		Teoria kinetyczna		Teoria kwantowa
1822 r. H. Davy:	$\sigma \sim S/L$	1803 r. J. Dalton:	atomy	
1826 r. G. Ohm:	$I \sim V$	1827 r. R. Brown:	ruchy	
1845 r. G. Kirchhoff:	$j \sim E_f$	1860 r. J. Maxwell:	rozkład $v$	
1861 r. J. Maxwell:	równania	1865 r. J. Loschmidt:	rozmiar at.	
		1867 r. J. Maxwell:	równanie	
			ciągłości o strukturze r. kinet.	
		1872 r. L. Boltzmann:	równanie	
1881 r. Helmholtz:	elektron	1900 r. D. Hilbert		1900 r. M. Planck
Johnstone Stoney:		1905 r. Einstein i	teoria r.	
1897 r. J. J. Thompson		Smoluchowski:	Browna	
1908 r. R. Millikan:	wart. $e$			
1910 r. E. Rutherford:	budowa at.	1913 r. Bohr:	model at.	
1916 r. Tolman-Steward:	bezwł. el.			
				1924 r. L. de Broglie
				1926 r. E. Schrödinger
				1927 r. Fermi i Dirac: stat. kw.

### Elektronowa teoria materii

1845 r. G. Fechner - Model prądu elektronowego

1846 r. W. Weber - Elektrodynamika cząstek

$$F = \frac{q_1 q_2}{r^2} \left\{ 1 + \frac{r}{c^2} \ddot{r}(t) - \frac{1}{2c^2} [\dot{r}(t)]^2 \right\}$$

1881 r. Helmholtz

1897 r. H. A. Lorentz - teoria elektronowa

1898 r. E. Riecke -

1900 r. Drude - model przewodnictwa

1927 r. Sommerfeld A. - statystyki kwantowe do opisu elektronów

1928 r. Block

Teorie na przestrzeni czasu:

1900 ÷ 1927 Klasyczna teoria transportu elektronowego

1927 ÷ 1928 Półklasyczna teoria transportu elektronowego

1928 ÷ 1933 Współczesna teoria transportu elektronowego

## 1.2 Teoria elektronowa Lorentza

### Założenia:

1. Ośrodki materiały mają strukturę dyskretną, tzn. zbudowane są z cząstek naładowanych, które w sumie dają układ neutralny.
2. Wszystkie zjawiska w ośrodku materialnym są spowodowane ruchem cząstek naładowanych pod wpływem pól zewnętrznych, przy czym:
  - (a) w dielektrykach cząstki naładowane są związane i mogą wykonywać drgania wokół położenia równowagi lub ulegać nieznacznym wychyleniom pod wpływem przyłożonego  $\vec{E}$ ,
  - (b) w przewodnikach prócz cząstek związanych występują także cząstki naładowane swobodne, których ruch powoduje powstanie prądu elektrycznego,
  - (c) w ośrodkach magnetycznych istnieją cząstki naładowane posiadające wewnętrzny moment magnetyczny lub niezerowy moment pędu.
3. Mikroskopowe pola elektromagnetyczne wytwarzane przez cząstki naładowane tworzące rozpatrywany ośrodek są rozwiązaniami równań Maxwella w próżni:

$$\begin{cases} \nabla \circ \vec{e}(\vec{r}, t) = \rho(\vec{r}, t) \\ \nabla \times \vec{b}(\vec{r}, t) - \partial_t \vec{e}(\vec{r}, t) = \vec{j}(\vec{r}, t) \\ \nabla \times \vec{e}(\vec{r}, t) + \partial_t \vec{b}(\vec{r}, t) = \vec{0} \\ \nabla \circ \vec{b}(\vec{r}, t) = 0. \end{cases} \quad (1)$$

$\vec{e}(\vec{r}, t)$ ,  $\vec{b}(\vec{r}, t)$  - mikroskopowe pola elektryczne i magnetyczne

$$\rho(\vec{r}, t) = \sum_i q_i \delta(\vec{r} - \vec{r}_i(t))$$

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = \sum_i \vec{v}_i(t) \delta(\vec{r} - \vec{r}_i(t))$$

4. Gęstość siły działającej na  $\vec{\rho}(\vec{r}, t)$  ma postać

$$\vec{f}(\vec{r}, t) = \vec{\rho}(\vec{r}, t) [\vec{e}(\vec{r}, t) + \vec{v}(t) \times \vec{b}(\vec{r}, t)]$$

$$\vec{F}(t) = \int d^3r' f(\vec{r}', t) =$$

przy założeniu jednorodności  $\vec{b}$  i  $\vec{e}$

$$= \int d^3r' \{ \rho(\vec{r}, t) [\vec{e} + \vec{v}(t) \times \vec{b}] \} = \int d^3r' \{ q \delta(\vec{r} - \vec{r}') [\vec{e} + \vec{v}(t) \times \vec{b}] \} = q [\vec{e} + \vec{v}(t) \times \vec{b}] \int d^3r' \delta(\vec{r} - \vec{r}').$$

Ostatecznie

$$\vec{F} = q(\vec{e} + \vec{v} \times \vec{b}) \quad (2)$$

$$m\ddot{\vec{r}}(t) = q[\vec{e} + \vec{v}(t) \times \vec{b}]. \quad (3)$$

Zmiany przestrzenne  $\vec{e}(\vec{r}, t)$  i  $\vec{b}(\vec{r}, t)$  są znaczące na odcinkach rzędu  $10^{-10} \text{ m} = 1 \text{ Å} = 0,1 \text{ nm}$ .

Zmiany czasowe są rzędu  $10^{-13} \div 10^{-17} \text{ s}$ .

Klasyczny promień elektronu  $r_e = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{mc^2} \approx 2,82 \cdot 10^{-6} \text{ nm}$ , rozmiar protonu  $r_p \approx 0,88 \cdot 10^{-6} \text{ nm}$  natomiast promień atomu  $r_p \approx 0,1 \text{ nm}$ .

### 1.3 Makroskopowa elektrodynamika ośrodków materialnych

**Hipotezia:** Makroskopowe pola  $\vec{E}$  i  $\vec{B}$  są wartościami średnimi pól mikroskopowych  $\vec{e}$  i  $\vec{b}$ .

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \langle \vec{e}(\vec{r}, t) \rangle \quad (4)$$

$$\vec{B}(\vec{r}, t) = \langle \vec{b}(\vec{r}, t) \rangle, \quad (5)$$

gdzie średnia jest przestrzenna, czyli

$$\langle \vec{f}(\vec{r}, t) \rangle \equiv \int d^3r' w(\vec{r}') \vec{f}(\vec{r} - \vec{r}', t).$$

$w(\vec{r}')$  - funkcja wagowa spełniająca warunki:

1. jest funkcją rzeczywistą dodatnio określoną,
2. jest znormalizowana

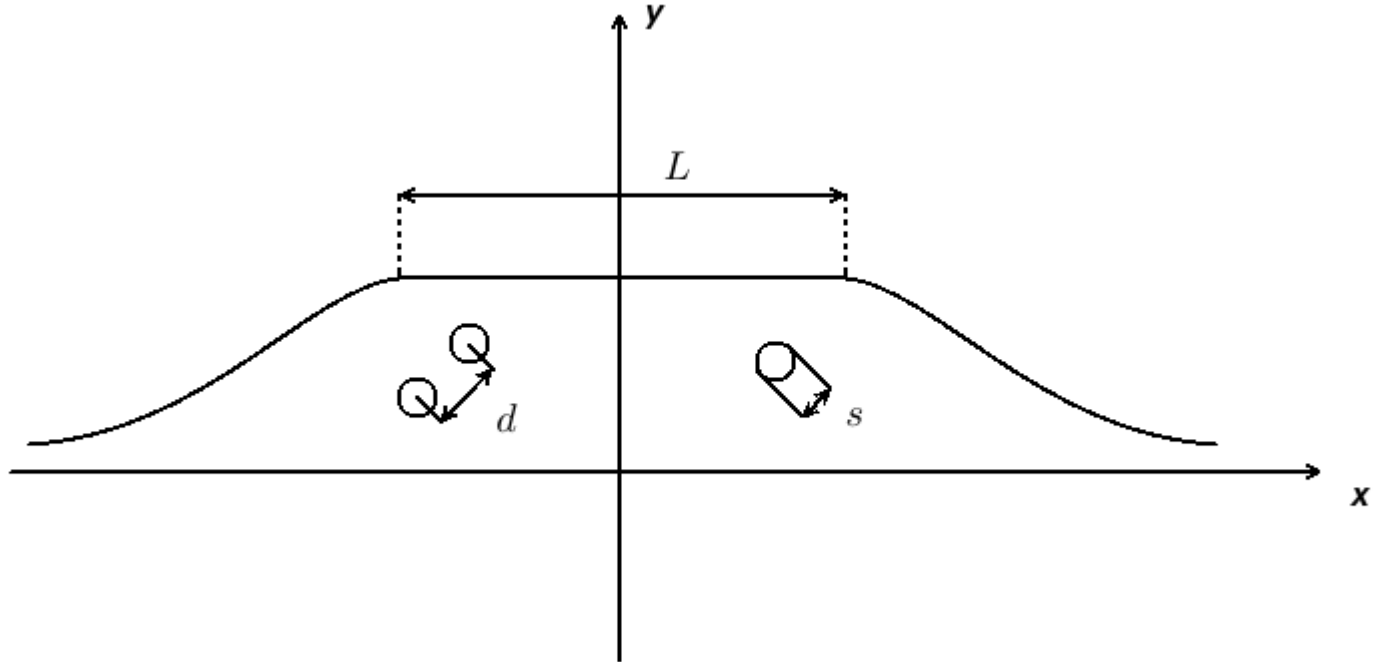
$$\int_{\Omega} d^3r' w(\vec{r}') = 1,$$

3. jest wolnozmienna, tj.

$$w(\vec{r}' + \vec{a}) = \sum_n \frac{1}{n!} [\vec{a} \nabla]^n w(\vec{r}')|_{\vec{r}=\vec{r}'}$$

$$w(\vec{r}' + \vec{a}) = w(\vec{r}') \pm [\vec{a} \nabla] w(\vec{r}') + \frac{1}{2} [\vec{a} \nabla]^2 w(\vec{r}'),$$

4. rozciągłość duża w porównaniu z wielkością cząstek.



$$L \sim 10 \div 100 \text{ nm}$$

$$s \sim 10^{-5} \text{ nm}$$

$$d \sim 0,1 \text{ nm}$$

### 1.3.1 Wyprowadzenie makroskopowych praw Maxwella z mikroskopowych odpowiedników

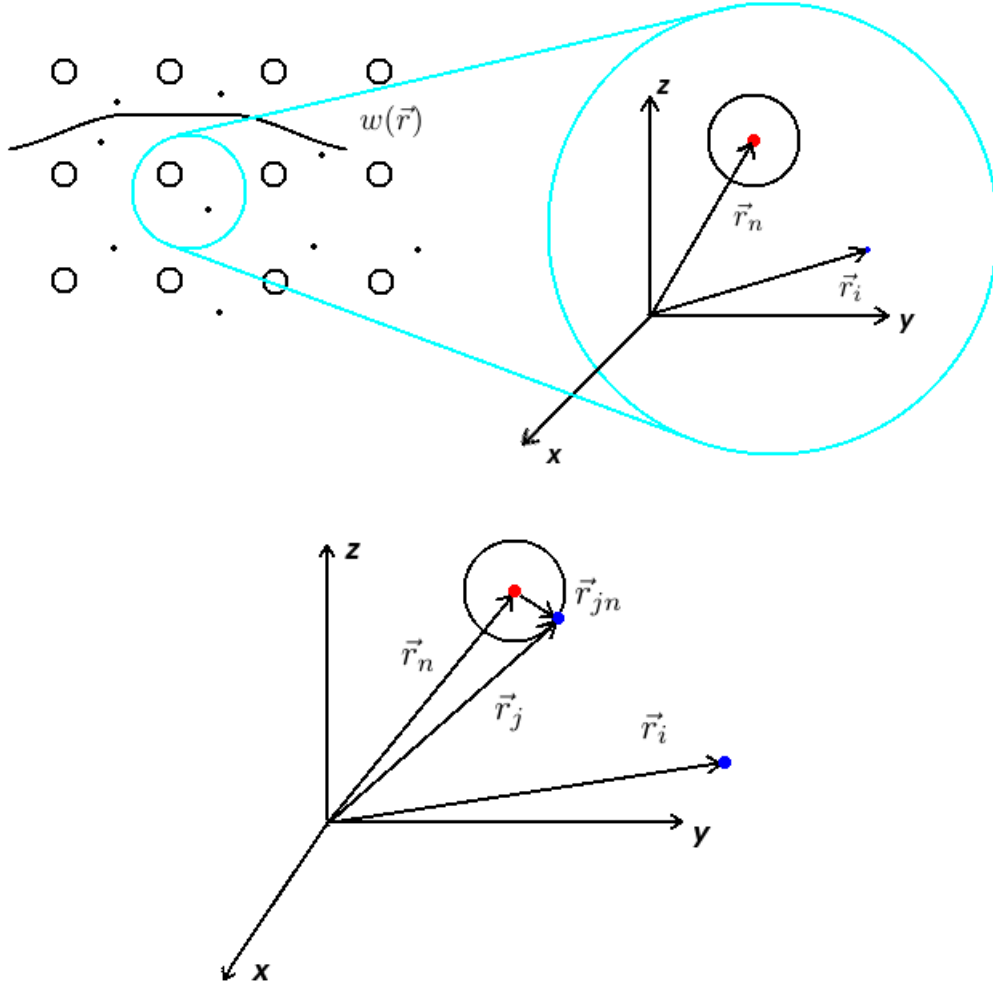
Zgodnie z równaniami mikroskopowymi 1:

$$\nabla \cdot \vec{E}(\vec{r}, t) = \langle \rho(\vec{r}, t) \rangle \quad (6)$$

$$\nabla \times \vec{B}(\vec{r}, t) - \partial_t \vec{E}(\vec{r}, t) = \langle \vec{j}(\vec{r}, t) \rangle \quad (7)$$

$$\nabla \times \vec{E}(\vec{r}, t) + \partial_t \vec{B}(\vec{r}, t) = \vec{0} \quad (8)$$

$$\nabla \cdot \vec{B}(\vec{r}, t) = 0 \quad (9)$$



Najpierw obliczymy średnią z gęstości ładunków. Gęstość ładunku można rozbić na gęstość ładunków swobodnych oraz gęstość ładunków związanych

$$\rho(\vec{r}, t) = \rho_{free}(\vec{r}, t) + \rho_{bound}(\vec{r}, t)$$

gdzie:

$$\rho_{free}(\vec{r}, t) = q_e \sum_i \delta(\vec{r} - \vec{r}_i(t))$$

$$\rho_{bound}(\vec{r}, t) = \sum_n \underbrace{\rho_n(\vec{r}, t)}_{n\text{-tego jonu}} = \sum_n \sum_j q_{jn} \delta(\vec{r} - \vec{r}_j(t)) = \sum_n \sum_j g_{jn} \delta(\vec{r} - \vec{r}_n(t) - \vec{r}_{jn}(t)).$$

$$\langle \rho(\vec{r}, t) \rangle = \langle \rho_{free}(\vec{r}, t) \rangle + \langle \rho_{bound}(\vec{r}, t) \rangle =$$

$$\begin{aligned}
&= \int d^3r' w(\vec{r}') \rho_{free}(\vec{r} - \vec{r}_j'(t)) + \int d^3r' w(\vec{r}') \rho_{bound}(\vec{r} - \vec{r}_j'(t)) = \\
&= \int d^3r' w(\vec{r}') q_e \sum_i \delta(\vec{r} - \vec{r}_i(t) - \vec{r}') + \int d^3r' w(\vec{r}') \sum_n \sum_j q_{jn} \delta(\vec{r} - \vec{r}_j'(t) - \vec{r}') = \\
&= q_e \sum_i w(\vec{r} - \vec{r}_i(t)) + \sum_n \sum_j q_{jn} w(\vec{r} - \vec{r}_n(t) - \vec{r}_{jn}(t)) = (*). \text{ Z własności } w \text{ wiemy, że:}
\end{aligned}$$

$$w(\vec{r} - \vec{r}_n(t) - \vec{r}_{jn}(t)) \simeq w(\vec{r} - \vec{r}_n(t)) - [\vec{r}_{jn} \cdot \nabla] w(\vec{r} - \vec{r}_n(t)).$$

$$(*) = q_e \sum_i w(\vec{r} - \vec{r}_i(t)) + \sum_n \sum_j q_{jn} [w(\vec{r} - \vec{r}_n(t)) - [\vec{r}_{jn} \cdot \nabla] w(\vec{r} - \vec{r}_n(t))]$$

Całkowity ładunek jonu:  $q_n = \sum_j q_{jn}$ .

Moment dipolowy  $\vec{d}_n(t) = \sum_j d_{jn}(t) = \sum_j q_{jn} \vec{r}_{jn}(t)$ .

$$\begin{aligned}
\langle \rho(\vec{r}, t) \rangle &= q_e \sum_i w(\vec{r} - \vec{r}_i(t)) + \sum_n q_n w(\vec{r} - \vec{r}_n(t)) - \nabla \cdot \sum_n w(\vec{r} - \vec{r}_n(t)) \vec{d}_n \\
\langle \rho(\vec{r}, t) \rangle &= \underbrace{\left\langle q_e \sum_i \delta(\vec{r} - \vec{r}_i(t)) \right\rangle}_{\text{makroskopowa gęstość ładunku}} + \underbrace{\left\langle \sum_n q_n \delta(\vec{r} - \vec{r}_n(t)) \right\rangle}_{\text{makroskopowa polaryzacja}} - \nabla \cdot \underbrace{\left\langle \sum_n \delta(\vec{r} - \vec{r}_n(t)) \vec{d}_n(t) \right\rangle}_{\text{makroskopowa polaryzacja}} \\
\langle \rho(\vec{r}, t) \rangle &= \rho(\vec{r}, t) - \nabla \cdot \vec{P}(\vec{r}, t).
\end{aligned}$$

Wracając do równania 6

$$\begin{aligned}
\nabla \cdot \vec{E}(\vec{r}, t) &= \langle \rho(\vec{r}, t) \rangle = \rho(\vec{r}, t) - \nabla \cdot \vec{P}(\vec{r}, t) \\
\nabla \cdot (\vec{E}(\vec{r}, t) + \nabla \vec{P}(\vec{r}, t)) &= \rho(\vec{r}, t) \\
\vec{E}(\vec{r}, t) + \nabla \vec{P}(\vec{r}, t) &\equiv \vec{D}(\vec{r}, t)
\end{aligned}$$

gdzie  $\vec{D}(\vec{r}, t)$  - wektor indukcji elektrycznej

$$D_i(\vec{r}, t) = \sum_{k/1}^3 \int d^3r \int_{-\infty}^t dt' \epsilon_{kj}(\vec{r}, \vec{r}', t, t') E_j(\vec{r}', t')$$

$$D_i = \sum_{k/1}^3 \epsilon_{kj} E_j.$$

## 2 Makroskopowy opis własności elektronowych ośrodków materialnych

### 2.1 Makroskopowa elektrodynamika ośrodków materialnych

#### 2.1.1 Podsumowanie

Równania Maxwella w postaci makroskopowej (w ośrodkach materialnych) mają postać:

$$\nabla \cdot \vec{D}(\vec{r}, t) = \wp(\vec{r}, t) \quad (10)$$

$$\nabla \times \vec{H}(\vec{r}, t) - \partial_t \vec{D}(\vec{r}, t) = \vec{J}(\vec{r}, t) \quad (11)$$

$$\nabla \times \vec{E}(\vec{r}, t) + \partial_t \vec{B}(\vec{r}, t) = \vec{0} \quad (12)$$

$$\nabla \cdot \vec{B}(\vec{r}, t) = 0 \quad (13)$$

gdzie  $\rho$  oznacza makroskopową gęstość ładunku, zdefiniowaną poprzednio jako:

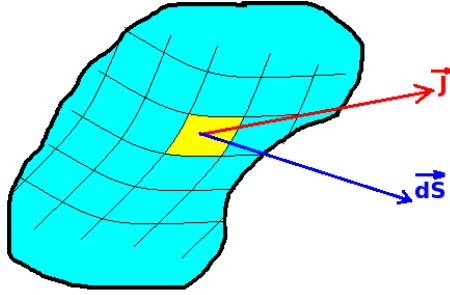
$$\rho = \left\langle q_e \sum_i \delta(\vec{r} - \vec{r}_i(t)) + \sum_n q_n \delta(\vec{r} - \vec{r}_n(t)) \right\rangle$$

wn.1. Makroskopowe pola  $\vec{E}(\vec{r}, t)$ ,  $\vec{B}(\vec{r}, t)$  są wartościami średnimi pól mikroskopowych  $\vec{e}$ ,  $\vec{b}$ . Są to pola pierwotne, natomiast pola  $\vec{D}$ ,  $\vec{H}$  są polami wtórnymi wynikającymi z ustalonej procedury średniowania.

### 2.1.2 Zasada zachowania ładunku

#### 1. Ogólne wyprowadzenie

Lokalnie (czyli w ośrodku) jest spełniona zasada zachowania ładunku, tzn. zmiana gęstości ładunku w ograniczonym obszarze  $\Omega$  jest spowodowana przepływem prądu przez powierzchnię zamkniętą  $\partial\Omega$  otaczającą ten obszar.



Rys. 1. Rysunek pomocniczy. Spełnione jest:

$$\frac{dQ}{dt} = - \int d\vec{S} \cdot \vec{J}(\vec{r}, t) \quad (14)$$

gdzie:

- $d\vec{S}$  - element powierzchni;  $|d\vec{S}|$  - pole powierzchni
- $Q$ - całkowity ładunek, wyrażający się wzorem:

$$Q(t) = \int d^3r \rho(\vec{r}, t) \quad (15)$$

- $d\vec{S}$  - wektor powierzchni, którego długość jest równa polu powierzchni,
- natomiast wyrażenie po prawej stronie to natężenie prądu będące równe strumieniowi przepływającemu przez daną powierzchnię:

$$I(t) = \int d\vec{S} \cdot \vec{J}(\vec{r}, t) \quad (16)$$

uw. Minus w równaniu (14) oznacza, że ładunek może tylko wypływać spod powierzchni.

uw2. Wyrażenie pod całką to strumień prądu płynący przez rozważany obszar.

Wstawmy równanie (15) do równania (14):

$$\partial_t \int_{\partial\Omega} d^3r \rho(\vec{r}, t) = - \int_{\partial\Omega} d\vec{S} \cdot \vec{J}(\vec{r}, t) \stackrel{\text{tw. Gaussa}}{=} - \int_{\Omega} d^3r \nabla \cdot \vec{J}(\vec{r}, t) \quad (17)$$



$$\int d^3r \{ \partial_t \rho(\vec{r}, t) + \nabla \cdot \vec{J}(\vec{r}, t) \} = 0 \quad (18)$$

Stąd:

$$\partial_t \rho(\vec{r}, t) + \nabla \cdot \vec{J}(\vec{r}, t) = 0 \quad (19)$$

Wzór (19) to prawo zachowania ładunku - ładunek nie może zniknąć, może tylko przepłynąć przez powierzchnię.

## 2. Wyprowadzenie praw zachowania ładunku z praw Maxwella

Zadziałajmy obustronnie  $\partial_t$  na 1. równanie Maxwella (10) oraz  $\nabla \cdot$  na 2. równanie Maxwella (11):

$$(1) \Rightarrow \partial_t \nabla \cdot \vec{D}(\vec{r}, t) = \partial_t \rho(\vec{r}, t) \Rightarrow \nabla \cdot \partial_t \vec{D}(\vec{r}, t) = \partial_t \rho(\vec{r}, t) \quad (20)$$

$$(2) \Rightarrow \underbrace{\nabla \cdot [\nabla \times \vec{H}(\vec{r}, t)]}_{=0 \text{ (bo jest to div z rot)}} - \nabla \cdot \partial_t \vec{D}(\vec{r}, t) = \nabla \cdot \vec{J}(\vec{r}, t) \quad (21)$$

Łącząc oba te równania dostajemy:

$$- \partial_t \rho(\vec{r}, t) = \nabla \cdot \vec{J}(\vec{r}, t) \quad (22)$$

Równanie (22) to zasada zachowania ładunku.

## 3. Równania materiałowe

Z jednej strony równania Maxwella są niezmiennicze względem zmiany ośrodka, z drugiej strony ich rozwiązania- pola  $\vec{E}(\vec{r}, t)$ ,  $\vec{B}(\vec{r}, t)$ - są różne w różnych ośrodkach. Dlatego potrzebujemy dodatkowych równań, które będą określać ośrodek- dlatego postulujemy równania materiałowe:

$$D_i(\vec{r}, t) = \sum_{j/1}^3 \int d^3r' \int_{-\infty}^t dt' \epsilon_{ij}(\vec{r}, \vec{r}', t, t') E_j \quad (23)$$

$$H_i(\vec{r}, t) = \sum_{j/1}^3 \int d^3r' \int_{-\infty}^t dt' \mu_{ij}^{-1}(\vec{r}, \vec{r}', t, t') B_j \quad (24)$$

$$J_i(\vec{r}, t) = \sum_{j/1}^3 \int d^3r' \int_{-\infty}^t dt' \sigma_{ij}(\vec{r}, \vec{r}', t, t') E_j - \text{mikroskopowe prawo Ohma} \quad (25)$$

**wn.1.** Mamy zatem zestaw równań: Równania Maxwella+równania materiałowe

**wn.2.** W równaniach materiałowych jądrem całkowym są:

(23):  $\epsilon_{ij}(\vec{r}, \vec{r}', t, t')$  - to element tensora przenikalności elektrycznej ośrodka

(24):  $\mu_{ij}^{-1}(\vec{r}, \vec{r}', t, t')$  - to element tensora odwrotności przenikalności magnetycznej

(25):  $\sigma_{ij}(\vec{r}, \vec{r}', t, t')$  - to element tensora przewodnictwa elektrycznego.

**uw.1.** Równania materiałowe mają swoje uzasadnienie w termodynamice stanów nierównowagowych, natomiast do elektrodynamiki zostały dodane *ad hoc*. uw.2.

**uw.2.** Ostatnie (25) równanie to mikroskopowe (lokalne) prawo Ohma, które można również zapisać w popularniejszej wersji:

$$\vec{J}(\vec{r}, t) = \sigma(\vec{r}, t) \vec{E}(\vec{r}, t) \quad (26)$$

## 4. Równania Maxwella a prąd stały

**Zał.** Załóżmy, że **prąd jest stały**, tzn. płynie w sposób ciągły i nie gromadzi się (jest stały w czasie).

Wówczas:

- Równanie Maxwella (11)  $\Rightarrow$  powstaje stałe pole  $\vec{H}$
- Równanie Maxwella (12)  $\Rightarrow \nabla \times \vec{E}(\vec{r}) + \underbrace{\partial_t \vec{B}(\vec{r})}_{=0} = 0$

Stąd:

$$\nabla \times \vec{E}(\vec{r}) = 0 \quad (27)$$

Ponieważ wiemy, że dywergencja z rotacji daje 0, to  $\vec{E}$  musi dać się przedstawić jako:

$$\vec{E} = -\nabla V(\vec{r}) \quad (28)$$

gdzie  $V(\vec{r})$  to potencjał.

**wn.** Jeśli prąd jest stały, to pole elektryczne ma potencjał.

- Prawo zachowania ładunku (19)  $\Rightarrow \underbrace{\partial_t \rho(\vec{r}, t)}_{=0} + \nabla \cdot \vec{J}(\vec{r}, t) = 0$

$$\nabla \cdot \vec{J}(\vec{r}) = 0 \quad (29)$$

- Mikroskopowe prawo Ohma  $\Rightarrow \nabla[\sigma(\vec{r})\vec{E}(\vec{r})] = 0$

Łącząc to równanie z równaniem (28), dostajemy:

$$\begin{aligned} -\nabla \cdot [\sigma(\vec{r})\nabla V(\vec{r})] &= 0 \\ \nabla \cdot [\sigma(\vec{r})\nabla V(\vec{r})] &= 0 \end{aligned} \quad (30)$$

- Załóżmy teraz, że przewodnictwo jest wszędzie takie samo:  $\sigma(\vec{r}) = \text{const} = \sigma$ .  
Wówczas z równania (30) wynika:

$$\sigma \nabla^2 V(\vec{r}) = 0 \quad (31)$$

O ile  $\sigma \neq 0$  (czyli nie jest to izolator):

$$\nabla^2 V(\vec{r}) = 0 \quad (32)$$

Jest to równania Laplace'a.

**wn.** Jeśli prąd jest stały, to potencjał układu spełnia równanie Laplace'a.

**uw.** Bez założenia o prądzie stałym dostalibyśmy równanie Poissona

**Dygresja** - potencjał a energia potencjalna Energia potencjalna wyraża się wzorem:

$$U(\vec{r}) \equiv \int d^3r' \rho(\vec{r}') V(\vec{r}) \quad (33)$$

Łącząc powyższe równanie z definicją gęstości ładunkowej:

$$U(\vec{r}) = \int d^3r' q \delta(\vec{r} - \vec{r}') V(\vec{r}) \quad (34)$$

Stąd:

$$U(\vec{r}) = qV(\vec{r}) \quad (35)$$

Równanie (35) to związek pomiędzy energią potencjalną a potencjałem.

## 2.2 Zlinearyzowane relacje konstytutywne ośrodków materialnych

### 2.2.1 Ogólna postać równań materiałowych

Można zauważyć, że wszystkie równania materiałowe (23),(24),(25) mają postać:

$$\vec{Y}(\vec{r}, t) = \int d^3r \int_{-\infty}^t dt' \hat{\chi}(\vec{r}, \vec{r}', t, t') \vec{X}(\vec{r}', t') \quad (36)$$

lub równoważnie:

$$Y_i(\vec{r}, t) = \sum_{j/1}^3 \int d^3r \int_{-\infty}^t dt' \chi_{ij}(\vec{r}, \vec{r}', t, t') X_j(\vec{r}', t') \quad (37)$$

gdzie:

- $\vec{Y}$  - wektor reprezentujący pole wtórne
- $\vec{X}$  - wektor reprezentujący pole pierwotne
- $\hat{\chi}$  - to tzw. uogólniona podatność (inaczej: funkcja odpowiedzi układu). Jest to tensorowe jądro całkowe, służące do przekształcenia pola pierwotnego we wtórne - zatem wnosi ona informację o ośrodku.

**uw.** Dlaczego całka po czasie biegnie do  $t$  a nie do  $\infty$ ?

Ponieważ wówczas  $\chi$  zbiera informacje do chwili obecnej. Gdyby całka była do  $\infty$ , to złamałibyśmy **zasadę przyczynowości** (wyraża ona, że skutek obserwowany w chwili obecnej zależy tylko do przyczyn z przeszłości).

Można zatem postawić:

$$\chi_{ij}(\vec{r}, \vec{r}', t, t') = 0 \quad \text{dla } t' > t \quad (38)$$

### 2.2.2 Równania materiałowe a teoria liniowej odpowiedzi

**Fakty:**

1. Pola wtórne są liniowymi funkcjonalami pól pierwotnych:

$$\vec{Y}[\alpha_1 \vec{X}_1 + \alpha_2 \vec{X}_2] = \alpha_1 \vec{Y}[\vec{X}_1] + \alpha_2 \vec{Y}[\vec{X}_2] \quad (39)$$

**uw.** Jeśli uciagliśmy tę sumę, dostaniemy całkę.

2. Równania materiałowe pozostają słuszne, jeśli pola pierwotne można traktować jako słabe zaburzenia. Wówczas można rozwinąć w szereg McLaurina:

$$\vec{Y}[\vec{X}] = \vec{Y}[\vec{0}] + \left. \frac{\delta \vec{Y}}{\delta \vec{X}} \right|_{\vec{0}} \vec{X} + \frac{1}{2} \left. \frac{\delta^2 \vec{Y}}{\delta \vec{X}^2} \right|_{\vec{0}} \vec{X}^2 + \dots \quad (40)$$

gdzie:  $\vec{Y}[\vec{0}] = 0$  (bo nie może istnieć pole wtórne bez pierwotnego), zatem:

$$[\vec{X}] = \vec{Y}[\vec{0}] + \left. \frac{\delta \vec{Y}}{\delta \vec{X}} \right|_{\vec{0}} \vec{X} + \mathcal{O}(\vec{X}^2) \quad (41)$$

**Założenie:**

Założmy, że pola wtórne są proporcjonalne do pól pierwotnych (tzw. linearyzacja równania).

Wówczas:

$$\vec{Y}[\vec{X}] \simeq \left. \frac{\delta \vec{Y}}{\delta \vec{X}} \right|_0 \vec{X} = \hat{\mathcal{L}} \vec{X} \quad (42)$$

Ostatecznie więc:

$$\vec{Y}[\vec{X}] = \hat{\mathcal{L}} \vec{X} \quad (43)$$

To przybliżenie nazywamy **teorią liniowej odpowiedzi**, zaś samo równanie (43) - równaniem fenomenologicznym, a współczynniki  $\hat{\mathcal{L}}$  - współczynnikami fenomenologicznymi. Współczynniki te dostajemy z doświadczeń i następnie staramy się je wyjaśnić za pomocą teorii.

### 2.2.3 Uogólnienie na wiele pól zaburzających - zjawiska krzyżowe

Z racji liniowości wektora  $\vec{Y}$ , równanie (43) można uogólnić na wiele pól zaburzających (np. możemy jednocześnie rozważać pola  $\vec{B}(\vec{r}, t)$  i  $\vec{E}(\vec{r}, t)$ ) :

$$\vec{Y} = \hat{\mathcal{L}} \vec{X}(\vec{r}, t) \xrightarrow{\text{uogólnienie}} Y_i = \sum_{j=1}^n \mathcal{L}_{ij} X_j \quad (44)$$

**Np.** Niech  $n=2$ . Wówczas:

$$\begin{cases} \vec{Y}_1 = \mathcal{L}_{11} \vec{X}_1 + \mathcal{L}_{12} \vec{X}_2 & / \mathcal{L}_{12}^{-1} \\ \vec{Y}_2 = \mathcal{L}_{21} \vec{X}_1 + \mathcal{L}_{22} \vec{X}_2 & / \mathcal{L}_{22}^{-1} \end{cases}$$

**wn.** Pole wtórne wynika z obu pól pierwotnych.

Wyznaczamy  $\vec{X}_1$ :

$$\begin{cases} \mathcal{L}_{12}^{-1} \vec{Y}_1 = \mathcal{L}_{12}^{-1} \mathcal{L}_{11} \vec{X}_1 + \vec{X}_2 \\ \mathcal{L}_{22}^{-1} \vec{Y}_2 = \mathcal{L}_{22}^{-1} \mathcal{L}_{21} \vec{X}_1 + \vec{X}_2 \end{cases}$$

Odejmując stronami, dostajemy:

$$\mathcal{L}_{12}^{-1} \vec{Y}_1 - \mathcal{L}_{22}^{-1} \vec{Y}_2 = [\mathcal{L}_{12}^{-1} \mathcal{L}_{11} - \mathcal{L}_{22}^{-1} \mathcal{L}_{21}] \vec{X}_1$$

$$[\mathcal{L}_{12}^{-1} \mathcal{L}_{11} - \mathcal{L}_{22}^{-1} \mathcal{L}_{21}]^{-1} \mathcal{L}_{12}^{-1} \vec{Y}_1 - [\mathcal{L}_{12}^{-1} \mathcal{L}_{11} - \mathcal{L}_{22}^{-1} \mathcal{L}_{21}]^{-1} \mathcal{L}_{22}^{-1} \vec{Y}_2 = \vec{X}_1$$

**wn.** Pole pierwotne  $\vec{X}_1$  można przedstawić w postaci kombinacji liniowej pól wtórnych, przy czym  $\vec{X}_1$  produkuje  $\vec{Y}_1$  oraz  $-\vec{Y}_2$ . Zauważmy, że  $\vec{Y}_2$  jest z minusem, bo przeciwdziała ono polu  $\vec{Y}_1$ .

Takie procesy z polami  $\vec{Y}_1$  i  $\vec{Y}_2$  naz. zjawiskami krzyżowymi.

**np.** W zjawiskach termoelektrycznych polami tymi są  $\vec{E}$  i gradient temperatury  $\nabla T$ : Pole elektryczne przemieszcza elektrony, ale przez opór materiał się grzeje, więc powstaje gradient temperatury.

### 2.2.4 Klasyfikacja materiałów ze względu na jądro całkowe równania materiałowego

1. Ośrodek materialny jest **lokalnie liniowy** wtedy i tylko wtedy, gdy  $\hat{\chi}$  ma postać:

$$\hat{\chi}(\vec{r}, \vec{r}', t, t') = \hat{\chi}(\vec{r}', t, t') \delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (45)$$

2. Ośrodek materialny jest **przestrzennie jednorodny** wtedy i tylko wtedy, gdy  $\hat{\chi}$  ma postać:

$$\hat{X}(\vec{r}, \vec{r}', t, t') = \hat{\chi}(\vec{r} - \vec{r}', t, t') \quad (46)$$

Jeśli równość ta nie zachodzi, to ośrodek jest **niejednorodny przestrzennie**.

3. Ośrodek materialny jest **czasowo jednorodny** wtedy i tylko wtedy, gdy  $\hat{\chi}$  ma postać:

$$\hat{\chi}(\vec{r}, \vec{r}', t, t') = \hat{\chi}(\vec{r}, \vec{r}', t - t') \quad (47)$$

Np. gdy materiał się grzeje, to w różnych chwilach różne jest pole  $\nabla T$ . Jeśli równość ta nie zachodzi, to ośrodek jest **niejednorodny czasowo**.

4. Ośrodek materialny jest **czasowo i przestrzennie jednorodny** wtedy i tylko wtedy, gdy  $\hat{\chi}$  ma postać:

$$\hat{\chi}(\vec{r}, \vec{r}', t, t') = \hat{\chi}(\vec{r} - \vec{r}', t - t') \quad (48)$$

Tę własność spełnia gaz elektronowy oraz nukleony w jądrze.

5. Ośrodek materialny jest **izotropowy** wtedy i tylko wtedy, gdy elementy macierzowe  $\hat{\chi}$  mają postać:

$$\chi_{ij}(\vec{r}, \vec{r}', t, t') = \hat{\chi}(\vec{r} - \vec{r}', t - t') \delta_{ij} \quad (49)$$

Jeśli równość ta nie zachodzi, to ośrodek jest **anizotropowy**.

6. Ośrodek materialny jest **homogeniczny** wtedy i tylko wtedy, gdy elementy macierzowe  $\hat{\chi}$  mają postać:

$$\chi_{ij}(\vec{r}, \vec{r}', t, t') = \chi \delta(\vec{r} - \vec{r}') \delta(t - t') \delta_{ij} \quad (50)$$

### 2.2.5 Równanie materiałowe dla ośrodka homogenicznego- konsekwencje

Wróćmy do równania materiałowego:

$$Y_i(\vec{r}, t) = \sum_{j/1}^3 \int d^3r \int_{-\infty}^t dt' \chi_{ij}(\vec{r}, \vec{r}', t, t') X_j(\vec{r}', t') \quad (51)$$

W ośrodku homogenicznym:

$$Y_i(\vec{r}, t) = \sum_{j/1}^3 \int d^3r \int_{-\infty}^0 dt' \chi \delta(\vec{r} - \vec{r}') \delta(t - t') \delta_{ij} X_j(\vec{r}', t') (\vec{r}, t) \stackrel{\text{tw. filtracyjne}}{=} \chi X_i(\vec{r}, t) \quad (52)$$

Zatem:

$\vec{Y}^X$	$\vec{E}$	$\vec{B}$
$\vec{D}$	$\hat{\epsilon}$	brak
$\vec{H}$	brak	$\hat{\mu}^{-1}$
$\vec{J}$	$\hat{\sigma}$	brak

**wn. 1.** Z powyższego wynika mikroskopowe prawo Ohma dla ośrodków homogenicznych:

$$\vec{J}(\vec{r}, t) = \sigma \vec{E}(\vec{r}, t) \quad (53)$$

Zatem Ohm miał szczęście, że przykładał małe pola (bo w powyższych rachunkach zastosowaliśmy rachunek zaburzeń prawdziwy dla małych pól).

**wn. 2.** Dla układów homogenicznych skalarna stała  $\chi$  reprezentuje stałą materiałową, która opisuje w sposób ilościowy rozpatrywaną własność ośrodka.

### 2.2.6 Punkt widzenia

Ustalmy jeden z dwóch możliwych punktów widzenia: prąd elektryczny jest konsekwencją przyłożonego pola elektrycznego  $\vec{E}(\vec{r}, t)$ . Pole elektryczne to przyczyna, a prąd to skutek.

## 3 Metody opisu klasycznej dynamiki cząstek

W rozważaniach opuszczamy mechanikę Lagrangowską.

### 3.1 Mechanika newtonowska

#### Siła Lorentza

$$\vec{F}_l(\vec{r}, t) = q[\vec{E}(\vec{r}, t) + \vec{v}(t) \times \vec{B}(\vec{r}, t)]. \quad (54)$$

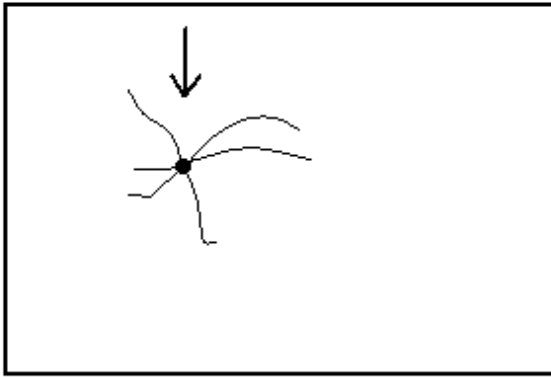
Jeżeli postać siły jest określona, to równanie ruchu możemy zapisać w postaci

$$m \frac{d^2 \vec{r}(t)}{dt^2} = \vec{F}_L(\vec{r}, t). \quad (55)$$

Zauważmy, że w mechanice Newtonowskiej nie ma ograniczenia na postać siły  $\vec{F}_L$ . **Przykład - równanie Langevine'a**

$$m \frac{d^2 \vec{r}(t)}{dt^2} = \vec{F}_R - \gamma \vec{v}(t) + \vec{\Gamma}(t),$$

gdzie  $\vec{F}_R$  to siła regularna (np. od zewnętrznego pola elektrycznego,  $\gamma$  to współczynnik tarcia, a  $\vec{\Gamma}(t)$  to siła stochastyczna. Rozwiązując równania Newtona otrzymujemy różne  $\vec{r}(t)$ . Oznaczmy przez  $\{\vec{r}(t)\}$  - zbiór rozwiązań równania Newtona  $\equiv$  PRZESTRZEŃ KONFIGURACYJNA.



Wiele rozwiązań przechodzi przez położenie początkowe co powoduje NIEJEDNOZNACZNOŚĆ

$|\vec{r}(t)\rangle$  - klasyczny stan cząstki w mechanice Newtona niewystarczający ze względu na brak determinizmu.

Stan cząstki opisany w sposób (trik dodający determinizm)

$|\vec{r}(t), \vec{v}(t)\rangle$  - klasyczny stan cząstki

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} \vec{r}(t) = \vec{v}(t) \\ m \frac{d}{dt} \vec{v}(t) = \vec{F}(\vec{r}, t) \end{cases} + \text{war. początkowe (jednopunktowe)} \left\{ \vec{r}(t_0) = \vec{r}_0, \vec{v}(t_0) = \vec{v}_0 \right.$$

#### Uwaga

Możemy określić  $\vec{r}$  w chwili  $t$ , ale  $\vec{v}$  okreśamy w otoczeniu  $t$ , bo

$$\vec{v}_0 = \vec{v}(t_0) = \left. \frac{d}{dt} \vec{r} \right|_{t=t_0} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\vec{r}(t_0 + \Delta t) - \vec{r}(t_0)}{\Delta t},$$

ewentualnie

$$\vec{v}_0 = \vec{v}(t_0) = \left. \frac{d}{dt} \vec{r} \right|_{t=t_0} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\vec{r}(t_0) - \vec{r}(t_0 - \Delta t)}{\Delta t}.$$

## Wniosek

Trikiem Tym uzyskujemy determinizm, z wyjątkiem infinitezimalnych zmian.

## 3.2 Mechanika hamiltonowska

W mechanice hamiltonowskiej nie używamy pojęcia siły, ale pojęcia potencjału, co oznacza, że jest ona mniej ogólna.

### formalizm kanoniczny

Funkcja Hamiltona:  $H(\vec{q}, \vec{p}, t)$ . Kosztem straty na ogólności, zyskujemy niezależność zmiennych uogólnionych  $\vec{q}$  i  $\vec{p}$ .

$|\vec{q}(t), \vec{p}(t)\rangle$  - klasyczny stan układu.

Funkcja Hamiltona przybiera wartość całkowitej energii mechanicznej układu, jeżeli siły sziałające na układ są potencjalne, a potencjał nie zależy od czasu.

$$H(\vec{q}, \vec{p}) = \underbrace{J(\vec{q}, \dot{\vec{q}}(\vec{q}, \vec{p}))}_{\text{część kinetyczna}} + \underbrace{U(\vec{q})}_{\text{część potencjalna}}.$$

$q, p$  - współrzędne i pędy uogólnione, zgodne z więzami skleronomicznymi, czyli takimi, że nie zależą jawnie od czasu.

### 3.2.1 Przestrzeń fazowa $\mu$

#### Definicja

Przestrzeń fazowa  $\mu$  układu mechanicznego nazywamy parzysto-wymiarową przestrzeń symplektyczną, której elementami są punkty fazowe o współrzędnych  $(\vec{q}, \vec{p})$ , które reprezentują stany klasyczne układu.

$$H(\vec{q}, \vec{p}, t) = J(\vec{q}, \dot{\vec{q}}(\vec{q}, \vec{p})) + U(\vec{q}, \vec{p}, t)$$

$$H : \mu \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}, \quad \text{kl. } C^1[\mu].$$

#### Przykład

$$\begin{aligned} \vec{F}_L(\vec{r}, t) &= q[\vec{E}(\vec{r}, t) + \vec{v}(t) \times \vec{B}(\vec{r}, t)] \\ \phi(\vec{r}, \vec{v}, t) &= q \left[ \underbrace{V(\vec{r}, t)}_{\text{pot. skalarny}} - \vec{v}(t) \cdot \underbrace{\vec{A}(\vec{r}, t)}_{\text{pot. wektorowy}} \right]. \end{aligned}$$

Poprzez transformatę Legendre'a

$$H(\vec{r}, \vec{p}) = \underbrace{\frac{1}{2m} [\vec{p} + q\vec{A}(\vec{r}, t)]^2}_{\text{część kinetyczna}} + \underbrace{U(\vec{r}, t)}_{\text{część potencjalna}}.$$

### 3.2.2 Funkcja Hamiltona w przybliżeniu minimalnego sprzężenia elektromagnetycznego

$$H(\vec{r}, \vec{p}) = \frac{1}{2m} [\vec{p} + q\vec{A}(\vec{r}, t)] \cdot [\vec{p} + q\vec{A}(\vec{r}, t)] + U(\vec{r}, t) = \frac{p^2}{2m} + U(\vec{r}, t) + \frac{q}{m} \vec{p} \cdot \vec{A}(\vec{r}, t) + \frac{q^2}{2m} A^2(\vec{r}, t) \approx$$

$$\approx \left| \text{linearyzacja, zakładając, że } A \text{ jest małe} \right| \approx \underbrace{\frac{p^2}{2m} + U(\vec{r}, t)}_{H_0(\vec{r}, \vec{p}, t)} + \frac{q}{m} \vec{p} \cdot \vec{A}(\vec{r}, t),$$

gdzie  $H_0(\vec{r}, \vec{p}, t)$  to niezaburzona funkcja Hamiltona, a pozostały składnik jest zaburzeniem liniowym spowodowanym potencjałem wektorowym  $\vec{A}$ .

### 3.2.3 Kanoniczne równania Hamiltona

$$\begin{cases} \dot{\vec{q}}(t) = \nabla_{\vec{p}} H(\vec{q}, \vec{p}, t) \\ \dot{\vec{p}}(t) = -\nabla_{\vec{q}} H(\vec{q}, \vec{p}, t) \end{cases} + \begin{cases} \vec{q}(t_0) = \vec{q}_0 \\ \vec{p}(t_0) = \vec{p}_0 \end{cases} \quad (56)$$

$$\begin{cases} \vec{q}(t) = \vec{q}(t_0) + \int_{t_0}^t dt' \nabla_{\vec{p}} H(\vec{q}, \vec{p}, t') \\ \vec{p}(t) = \vec{p}(t_0) + \int_{t_0}^t dt' \nabla_{\vec{q}} H(\vec{q}, \vec{p}, t'). \end{cases}$$

Rozwiązanie powyższe wyznacza trajektorię fazową w przestrzeni fazowej, która to jest zbiorem klasycznych stanów realizowanych przez układ w kolejnych chwilach czasu  $t$ .

#### Inna forma równań Hamiltona

Wprowadzamy wektor fazowy  $\vec{w}(\vec{q}, \vec{p})$  oraz hamiltonowskie pole wektorowe  $\vec{X}_H(\vec{q}, \vec{p}, t)$ . Wtedy

$$\frac{d}{dt} \vec{w}(\vec{q}, \vec{p}) = \vec{X}_H(\vec{q}, \vec{p}, t) \quad (57)$$

$$\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} \vec{q}(t) \\ \vec{p}(t) \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix}}_g \begin{bmatrix} \nabla_{\vec{q}} H(\vec{q}, \vec{p}, t) \\ \nabla_{\vec{p}} H(\vec{q}, \vec{p}, t) \end{bmatrix}, \quad (58)$$

gdzie  $g$  to anisymetryczny tensor metryczny, który określa geometrię symplektyczną przestrzeni fazowej.

### 3.2.4 Zależność funkcji Hamiltona od czasu

$H(\vec{q}, \vec{p}, t)$  może się zmieniać w czasie na dwa sposoby

1.  $\vec{q} = \vec{q}(t)$ ,  $\vec{p} = \vec{p}(t)$ ,
2.  $t$  (jawnie)

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} H(\vec{q}, \vec{p}, t) &= \left[ \frac{d}{dt} \vec{q}(t) \right] \cdot \nabla_{\vec{q}} H(\vec{q}, \vec{p}, t) + \left[ \frac{d}{dt} \vec{p}(t) \right] \cdot \nabla_{\vec{p}} H(\vec{q}, \vec{p}, t) + \partial_t H(\vec{q}, \vec{p}, t) = \\ &= \nabla_{\vec{p}} H(\vec{q}, \vec{p}, t) \cdot \nabla_{\vec{q}} H(\vec{q}, \vec{p}, t) - \nabla_{\vec{q}} H(\vec{q}, \vec{p}, t) \cdot \nabla_{\vec{p}} H(\vec{q}, \vec{p}, t) + \partial_t H(\vec{q}, \vec{p}, t). \end{aligned}$$

Zatem

$$\frac{d}{dt} H(\vec{q}, \vec{p}, t) = \partial_t H(\vec{q}, \vec{p}, t).$$

Stąd wynika, iż funkcja Hamiltona zmienia się tak w czasie jak zależy od czasu.

Jeżeli  $H = H(\vec{q}, \vec{p})$  to  $\frac{d}{dt} H(\vec{q}, \vec{p}) = 0$ . Stąd wynika, że energia jest zachowana wzdłuż trajektorii fazowej.



### 3.3 Nawiasy Poissona

#### definicja

$f(\vec{q}, \vec{p}, t)$ ,  $g(\vec{q}, \vec{p}, t)$  - funkcje klasy  $C^1[\mu]$ . Wtedy definiujemy

$$\{f, g\} = \nabla_{\vec{q}} f(\vec{q}, \vec{p}, t) \cdot \nabla_{\vec{p}} g(\vec{q}, \vec{p}, t) - \nabla_{\vec{p}} f(\vec{q}, \vec{p}, t) \cdot \nabla_{\vec{q}} g(\vec{q}, \vec{p}, t) = \begin{bmatrix} \nabla_{\vec{q}} f(\vec{q}, \vec{p}, t) & \nabla_{\vec{p}} f(\vec{q}, \vec{p}, t) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \nabla_{\vec{q}} g(\vec{q}, \vec{p}, t) \\ \nabla_{\vec{p}} g(\vec{q}, \vec{p}, t) \end{bmatrix}.$$

#### Pożytki:

1. łatwiej znaleźć niektóre całki ruchu  $C(\vec{q}, \vec{p}) : \{C(\vec{q}, \vec{p}), H(\vec{q}, \vec{p})\} = 0$ .
2. równania Hamiltona można zapisać następująco

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} \vec{q} = \{\vec{q}, H(\vec{q}, \vec{p}, t)\} \\ \frac{d}{dt} \vec{p} = \{\vec{p}, H(\vec{q}, \vec{p}, t)\} \end{cases} \quad (59)$$

#### Przykłady

1. Niech  $H(\vec{q}, \vec{p}) = \frac{p^2}{2m} + U(\vec{q})$

$$\begin{aligned} \vec{v}(t) = \{\vec{q}, \frac{p^2}{2m} + U(\vec{q})\} &= \{\vec{q}, \frac{p^2}{2m}\} + \overbrace{\{\vec{q}, U(\vec{q})\}}^{=0} = \nabla_{\vec{q}} \vec{q} \cdot \nabla_{\vec{p}} \frac{p^2}{2m} - \nabla_{\vec{p}} \vec{q} \cdot \nabla_{\vec{q}} \frac{p^2}{2m} = \frac{\vec{p}}{m} \\ \implies \vec{p}(t) &= m\vec{v}(t). \end{aligned}$$

2. Niech  $H(\vec{q}, \vec{p}) = \frac{p^2}{2m} + U(\vec{q}, \vec{p})$

$$\vec{v}(t) = \{\vec{q}, H(\vec{q}, \vec{p})\} = \dots = \frac{1}{m} \vec{p}(t) + \nabla_{\vec{p}} U(\vec{q}, \vec{p}) \implies \vec{p}(t) = m\vec{v}(t) - m\nabla_{\vec{p}} U(\vec{q}, \vec{p})$$

3. Rozważmy zaburzenie  $H'(\vec{r}, t) = \frac{q}{m} \vec{p} \cdot \vec{A}(\vec{r}, t) =$

$$\begin{aligned} &= q\vec{v} \cdot \vec{A}(\vec{r}, t) = q \int d^3 r' \delta(\vec{r}' - \vec{r}(t)) \vec{v}(t) \cdot \vec{A}(\vec{r}', t) = \int d^3 r' \underbrace{q\delta(\vec{r}' - \vec{r}(t))}_{\rho(\vec{r}', t)} \vec{v}(t) \cdot \vec{A}(\vec{r}', t) = \\ &= \int d^3 r' \underbrace{\rho(\vec{r}', t) \vec{v}(t)}_{\vec{j}(\vec{r}', t)} \cdot \vec{A}(\vec{r}', t) = \int d^3 r \vec{j}(\vec{r}, t) \cdot \vec{A}(\vec{r}, t). \end{aligned}$$

Przedstawiliśmy zaburzenia za pomocą pola elektrycznego.

## 4 Metody Statystyczne w układach wielocząstkowych

### 4.1 Model klasycznego gazu doskonałego

#### 4.1.1 Wstęp

Pamiętamy, że dynamiczę cząstek naładowanych w polu EM można obliczyć poprzez:

- rozwiązanie równania Newtona
- hamiltonowską metodę, gdzie zaletą jest fakt, że położenie i pęd są niezależnymi zmiennymi

Dla  $N$  cząstek powinniśmy rozwiązać  $N$  równań ruchu. Gdy  $N \rightarrow \infty$ , to problem staje się nieobliczeniowy (nie da się go obliczyć w skończonym czasie).

Rozwiązanie tego problemu: użycie statystyki do obliczeń (fizyka statystyczna). Okazało się, że metody statystyczne poprawnie działają dla dużych układów. Cena za to: utrata jednoznaczności niektórych pojęć. Zysk: problem staje się obliczeniowy; przy okazji ujawniły się niektóre zależności statystyczne.

### 4.1.2 Definicja

**Df.** Klasycznym gazem doskonałym naz. układ cząstek punktowych, między którymi nie ma żadnego oddziaływania

**uw.** W df. na Wikipedii mamy jeszcze zawarte, że układ ten osiąga równowagę termodynamiczną natychmiast w wyniku zderzeń- to nie jest prawda. W definicji klasycznego gazu doskonałego zakładamy brak zderzeń, czyli układ jest niestabilny termodynamicznie

### 4.1.3 Stała Schmidta

Stała Schmidta odpowiada na pytanie ile jest cząstek w  $1\text{cm}^3$  gazu w warunkach normalnych:

$$\text{STAŁA SCHMIDTA} = \frac{\text{L. AVOGADRO}}{\text{OBJĘTOŚĆ 1 MOLA GAZU}} \quad (60)$$

czyli:

$$n_0 = \frac{N_A}{V} = \frac{6.02214 \cdot 10^{23} \text{ 1/mol}}{22413.19 \text{ cm}^3/\text{mol}} = 2.68678 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3} \simeq 3 \cdot 10^{19} \frac{\text{cząstek}}{\text{cm}^3} \quad (61)$$

### 4.1.4 Rozwiązanie równań ruchu metodą Hamiltona

- Funkcja Hamiltona:

$$H(\{\vec{r}_i\}, \{\vec{p}_i\}) = \sum_{i/1}^N \frac{p_i^2}{2m} \quad (62)$$

- Równania ruchu dla tej funkcji:

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} \vec{r}_j(t) = \nabla_{\vec{p}_j} H(\{\vec{r}_i\}, \{\vec{p}_i\}) = \sum_{i/1}^N \frac{\vec{p}_i(t)}{m} \delta_{ij} = \frac{1}{m} \vec{p}_j(t) \\ \frac{d}{dt} \vec{p}_j(t) = -\nabla_{\vec{r}_j} H(\{\vec{r}_i\}, \{\vec{p}_i\}) = 0 \end{cases} \quad (63)$$

- Warunki brzegowe:

$$\begin{cases} \vec{r}_j(t=0) = \vec{r}_{j0} \\ \vec{p}_j(t=0) = \vec{p}_{j0} \end{cases} \quad (64)$$

- Po scałkowaniu równań ruchu dostajemy:

$$\begin{cases} \vec{r}_j(t) = \vec{r}_{j0} + \frac{1}{m} p_{j0} t \\ \vec{p}_j(t) = p_{j0} \end{cases} \quad (65)$$

**Wn.** Każda z N cząstek gazu doskonałego ewoluuje niezależnie od pozostałych

**Wn.** Pęd cząstki w tym gazie jest stały

### 4.1.5 Cząsteczkowa przestrzeń fazowa $\mu$

**Df.** Cząsteczkowa przestrzeń fazowa  $\mu$  to przestrzeń 6-wymiarowa:

$$\dim[\mu]=6$$

w której ruch wyznaczają 2 niezależne zmienne:

$$|\vec{r}_j(t), \vec{p}_j(t) >$$

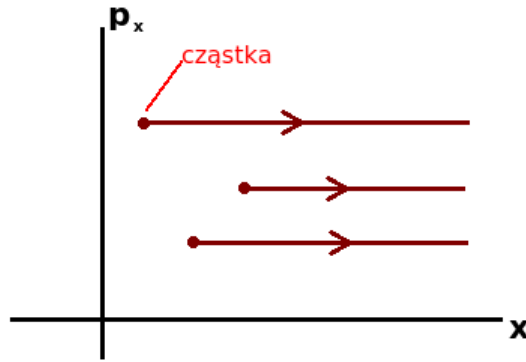
Zatem dowolny punkt należący do tej przestrzeni to:

$$\vec{a} \in \mu : \vec{a} = (x, y, z, p_x, p_y, p_z) \quad (66)$$

Czyli 1 punkt to jedna cząsteczka.

**Np.** Aby to narysować, upraszczamy problem do układu 1D+1D:

$$\dim[\mu] = 2$$



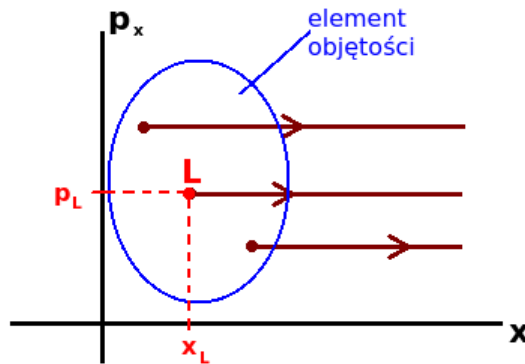
**Uw.** Cząstki nie mogą być ułożone na 1 linii równoległej do osi pędowej, bo wtedy byłyby w 1 punkcie przestrzennym.

#### 4.1.6 Opis gruboziarnisty

Problem: potrzeba  $2N$  warunków brzegowych. Rozwiązanie: opis grupozbiarnisty:

Wybierzmy element objętości przestrzeni  $\mu$  wokół punktu  $L$  o objętości  $[\Delta \vec{r}_L]^3$ :

$$\dim[\mu] = 2$$



Jeśli punkt:

$$(\vec{r}_L, \vec{p}_L) \in \mu$$

wtedy element objętości:

$$\Delta \omega_L = \Delta \vec{r}_L \Delta \vec{p}_L \quad (67)$$

przy czym wymiar elementu objętości jest rzędu długości, po której średniowaliśmy na poprzednich wykładach:

$$|\Delta \vec{r}_L \sim L \sim 100nm \quad (68)$$

W kostce o takich rozmiarach liczba cząstek wynosi:

$$[|\Delta \vec{r}_L|]^3 [n_0 cm^{-3}] = [10^{-5} cm]^3 [3 \cdot 10^{19} cm^{-3}] = 3 \cdot 10^4 \text{cząstek}$$

Opis ten nazywamy opisem gruboziarnistym, ponieważ każdy element objętości dobieramy sobie dowolnie.

## 4.2 Funkcja rozkładu gęstości prawdopodobieństwa

### 4.2.1 Definicja

Wprowadźmy funkcję pomocniczą:

$$f(\vec{r}, \vec{p}, t)$$

Żądamy, by była ona klasy  $C^0[\mu]$ , czyli by była ciągła w przestrzeni  $\mu$ . Wyrażenie:

$$f(\vec{r}, \vec{p}, t) \Delta \omega_L \quad (69)$$

opisuje liczbę cząstek w objętości  $\Delta \omega_L$ , w której położenia i prędkości zmieniają się zgodnie z rozkładem f.

Umówmy się, że:

$$\begin{cases} \sum_L f(\vec{r}_L, \vec{p}_L, t) \Delta \omega_L = \int d^3r d^3p f(\vec{r}, \vec{p}, t) \\ \int d^3r d^3p f(\vec{r}, \vec{p}, t) = N \Rightarrow f \text{ jest unormowana do liczby cząstek} \end{cases} \quad (70)$$

Wówczas  $f(\vec{r}, \vec{p}, t)$  jest **funkcją rozkładu gęstości prawdopodobieństwa**.

### 4.2.2 Równanie kinetyczne dla tej funkcji

- Wyprowadzenie równania kinetycznego

Zauważmy, że:

$$f(\vec{r}, \vec{p}, t + dt) - f(\vec{r}, \vec{p}, t) \stackrel{\text{ciągłość f, } dt \rightarrow 0}{\simeq} \partial_t f(\vec{r}, \vec{p}, t) dt \quad (71)$$

gdzie

$$\partial_t \equiv \frac{\partial}{\partial t} \quad (72)$$

W czasie dt położenie i pęd zmieniają się jak:

$$d\vec{r}(t) = \dot{\vec{r}}(t) dt \quad (73)$$

$$d\vec{p}(t) = \dot{\vec{p}}(t) dt \stackrel{\text{r. (65)}}{=} 0 \quad (74)$$

Wtedy:

$$f(\vec{r}, \vec{p}, t) - f(\vec{r} + d\vec{r}, \vec{p}, t) \simeq -\dot{\vec{r}}(t) \cdot \nabla_{\vec{r}} f(\vec{r}, \vec{p}, t) dt = -\frac{1}{m} \vec{p}(t) \cdot \nabla_{\vec{r}} f(\vec{r}, \vec{p}, t) dt \quad (75)$$

i oczywiście:

$$f(\vec{r}, \vec{p}, t) - f(\vec{r}, \vec{p} + d\vec{p}, t) \simeq -\dot{\vec{p}}(t) \cdot \nabla_{\vec{p}} f(\vec{r}, \vec{p}, t) = 0 \quad (76)$$

Zatem:

$$\frac{df(\vec{r}, \vec{p}, t)}{dt} = \partial_t f(\vec{r}, \vec{p}, t) + \frac{1}{m} \vec{p}(t) \cdot \nabla_{\vec{r}} f(\vec{r}, \vec{p}, t) = 0 \quad (77)$$

**Moja uwaga:** To zwykła "reguła łańcuchowa":

$$\frac{df(\vec{r}, \vec{p}, t)}{dt} = \frac{\partial f(\vec{r}, \vec{p}, t)}{\partial \vec{r}} \frac{\partial \vec{r}}{\partial t} + \frac{\partial f(\vec{r}, \vec{p}, t)}{\partial \vec{p}} \frac{\partial \vec{p}}{\partial t} + \frac{\partial f(\vec{r}, \vec{p}, t)}{\partial t} = \dot{r}(t) \nabla_{\vec{r}} f(\vec{r}, \vec{p}, t) + 0 + \partial_t f(\vec{r}, \vec{p}, t) \quad (78)$$

Wiemy, że:

$$mv(\vec{p}(t)) = \vec{p}(t) \Rightarrow \vec{v}(\vec{p}(t)) \equiv \vec{v}(\vec{p}) = \frac{1}{m} \vec{p}(t) \quad (79)$$

Wówczas równanie (77) ma postać:

$$\partial_t f(\vec{r}, \vec{p}, t) + \vec{v}(\vec{p}) \cdot \nabla_{\vec{r}} f(\vec{r}, \vec{p}, t) = 0 \quad (80)$$

Powyższe równanie to **równanie kinetyczne**.

- Rozwiązanie równania kinetycznego  
Postulujemy rozwiązanie tego równania:

$$f(\vec{r}, \vec{p}, t) = \Phi(\vec{r} - \vec{v}t, \vec{p}) \quad (81)$$

gdzie  $\Phi$  to dowolna funkcja klasy  $C^0[\mu]$ .

Dowód, że jest to rozwiązanie:

**Ozn.**

$$\vec{s}(t) = \vec{r}(t) - \vec{v}t \quad (82)$$

Wówczas kolejne części równania kinetycznego zyskują postać:

$$\begin{cases} \Phi(\vec{r} - \vec{v}t, \vec{p}) \rightarrow \tilde{\Phi}(\vec{s}(t), \vec{p}) \\ \partial_t \Phi(\vec{r}(t) - \vec{v}t, \vec{p}) = \frac{\partial \vec{s}(t)}{\partial t} \cdot \nabla_{\vec{s}} \tilde{\Phi}(\vec{s}(t), \vec{p}) \\ \nabla_{\vec{r}} \Phi(\vec{r}(t) - \vec{v}t, \vec{p}) = \nabla_{\vec{r}} \vec{s}t \cdot \nabla_{\vec{s}} \tilde{\Phi}(\vec{s}(t), \vec{p}) = \nabla_{\vec{s}} \tilde{\Phi}(\vec{s}(t), \vec{p}) \end{cases} \quad (83)$$

Zatem równanie kinetyczne przyjmuje postać:

$$\{-\vec{v} \cdot \nabla_{\vec{s}} + \vec{v} \cdot \nabla_{\vec{s}}\} \tilde{\Phi}(\vec{s}(t), \vec{p}) = 0 \quad (84)$$

Obie strony są równe, więc zaproponowana postać rozwiązania jest słuszna.

#### 4.2.3 Momenty funkcji rozkładu gęstości prawdopodobieństwa

- Zerowy moment

$$\int d^3p f(\vec{r}, \vec{p}, t) = n(\vec{r}, t) \quad (85)$$

to zerowy moment funkcji rozkładu gęstości prawdopodobieństwa. Jest to jednocześnie rozkład brzegowy w przestrzeni położeniowej.

- Pierwszy moment

Scałkujemy równanie kinetyczne (80) po pędzie:

$$\partial_t f(\vec{r}, \vec{p}, t) + \vec{v}(\vec{p}) \cdot \nabla_{\vec{r}} f(\vec{r}, \vec{p}, t) = 0 \quad / \int d^3\vec{p}$$

$$\partial_t n(\vec{r}, t) + \int d^3\vec{p} \vec{v}(\vec{p}) \cdot \nabla_{\vec{r}} f(\vec{r}, \vec{p}, t) = 0$$

Pamiętamy, że wyszliśmy z hamiltonianu, w którym zmienne  $\vec{r}, \vec{p}$  są niezależne (jesteśmy w przestrzeni  $\mu$ , zatem:

$$\partial_t n(\vec{r}, t) + \nabla_{\vec{r}} \int d^3 \vec{p} \vec{v}(\vec{p}) f(\vec{r}, \vec{p}, t) = 0$$

gdzie:

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = \int d^3 \vec{p} \vec{v}(\vec{p}) f(\vec{r}, \vec{p}, t) \quad (86)$$

to pierwszy moment funkcji rozkładu gęstości prawdopodobieństwa. Jest on interpretowany jako prąd.

#### 4.2.4 Interpretacja

- Równanie kinetyczne jako równanie ciągłości  
Równanie kinetyczne wyrażone przez momenty ma postać:

$$\partial_t n(\vec{r}, t) + \nabla_{\vec{r}} \vec{j}(\vec{r}, t) = 0 \quad (87)$$

W ten sposób nadaliśmy równaniu kinetycznemu strukturę **równania ciągłości** ("nic nie może zginąć").

- Funkcja rozkładu gęstości prawdopodobieństwa wyrażona przez deltę Diraca  
Z definicji:

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = \int d^3 p \vec{v}(\vec{p}) f(\vec{r}, \vec{p}, t) \quad (88)$$

Z drugiej strony, w teorii Lorentza założyliśmy, że prąd cząsteczkowy ma postać:

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = \sum_{i/1}^N \vec{v}_i(t) \delta(\vec{r} - \vec{r}_i(t)) \quad (89)$$

Łącząc oba fakty, dostajemy:

$$f(\vec{r}, \vec{p}, t) = const \cdot \sum_{i/1}^N \delta(\vec{r} - \vec{r}_i(t)) \delta(\vec{p}) \quad (90)$$

!! Ale wtedy:

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = const \int d^3 p \vec{v}(\vec{p}) \sum_{i/1}^N \delta(\vec{r} - \vec{r}_i(t)) \delta(\vec{p}) \quad (91)$$

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = const \int d^3 p \vec{v}(\vec{p}) \delta(\vec{p}) \sum_{i/1}^N \delta(\vec{r} - \vec{r}_i(t)) \quad (92)$$

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = const \vec{v}(\vec{p} = \vec{0}) \sum_{i/1}^N \delta(\vec{r} - \vec{r}_i(t)) \quad (93)$$

Ile wynosi const.?

$$f(\vec{r}, \vec{p}, t) = const \cdot \sum_{i/1}^N \delta(\vec{r} - \vec{r}_i(t)) \delta(\vec{p}) \quad / \int d^3 r d^3 p$$

$$N = const \cdot N$$

$$const = 1$$

Zatem:

$$f(\vec{r}, \vec{p}, t) = \sum_{i/1}^N \delta(\vec{r} - \vec{r}_i(t)) \delta(\vec{p}) \quad (94)$$

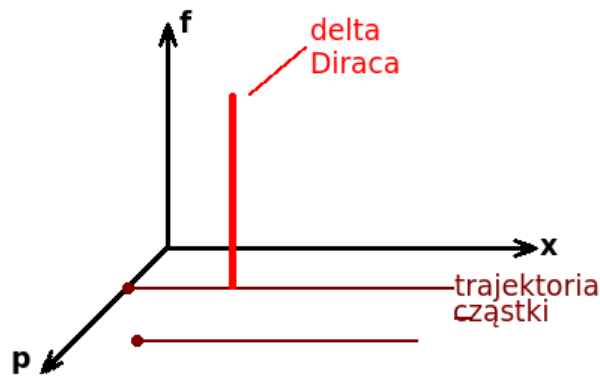
Ale:

$$\vec{r}_i(t) = \vec{r}_{i0} + \frac{1}{m} \vec{p}_{i0} t = \vec{r}_{i0} + \vec{v}_{i0} t \quad (95)$$

zatem ostatecznie:

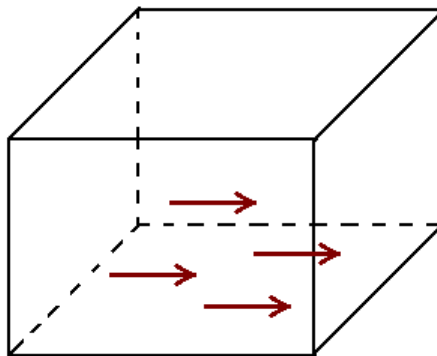
$$f(\vec{r}, \vec{p}, t) = \sum_{i/1}^N \delta(\vec{r} - [\vec{r}_{i0} + \vec{v}_{i0} t]) \delta(\vec{p}) \quad (96)$$

- Interpretacja



Funkcja rozkładu gęstości prawdopodobieństwa przemieszcza się jako delta Diraca wzdłuż trajektorii fazowej w przestrzeni  $\mu$  będącej rozwiązaniem kanonicznych równań Hamiltona.

**Wn.** Założyliśmy brak zderzeń i dostaliśmy to:



czyli prąd.

## 5 Kinetyka fizyczna

### 5.1 Równania transportowe Własowa [Vlasova] i Boltzmana

#### 5.1.1 Funkcja rozkładu $f(\vec{r}, \vec{p}, t)$ na przestrzeni $\mu$ , $\dim[\mu] = 6$ .

$$f(\vec{r}, \vec{p}, t) d^3 r d^3 p = f(\vec{r}, \vec{p}, t) d^6 \omega \implies d^6 \omega = d^3 r d^3 p \quad (97)$$

$$\int d^3 r d^3 p f(\vec{r}, \vec{p}, t) = N(t) \quad (98)$$

Dalej dla uproszczenia piszemy samo  $N$  pamiętając o zależności czasowej.

**Dla gazu jednorodnego:**

$$\int d^3 r d^3 p f(\vec{r}, \vec{p}, t) = \int d^3 r d^3 p f(\vec{p}, t) = V \int d^3 p f(\vec{p}, t) = N.$$

$$\int d^3 p f(\vec{p}, t) = \frac{N}{V} = n - \text{koncentracja cząstek.} \quad (99)$$

Oraz

$$N = \frac{\text{objętość układu}}{\text{objętość na jedną cząstkę}} \equiv \frac{V}{v}. \quad (100)$$

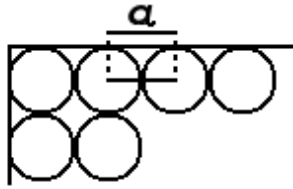
Dla małego układu

$$v = \frac{4}{3} \pi r_s^3, \quad (101)$$

gdzie  $r_s$  to promień kulki w jakiej możemy zamknąć jedną cząstkę. Stąd

$$n = \frac{V}{v} \implies v = \frac{V}{N} = \frac{1}{n}$$

$$\frac{4}{3} \pi r_s^3 = \frac{1}{n} \implies r_s = \left[ \frac{3}{4\pi n} \right]^{1/3} \propto n^{-1/3}.$$



średnia odległość  $a = 2r_s$   
między cząsteczkami w gazie  
o koncentracji  $n$

$$a \propto n^{-1/3}$$

**Dla gazu niejednorodnego:**

$$\int d^3 r d^3 p f(\vec{r}, \vec{p}, t) = \int d^3 r n(\vec{r}) = N \implies n(\vec{r}) - \text{gęstość cząstek w } \vec{r}. \quad (102)$$

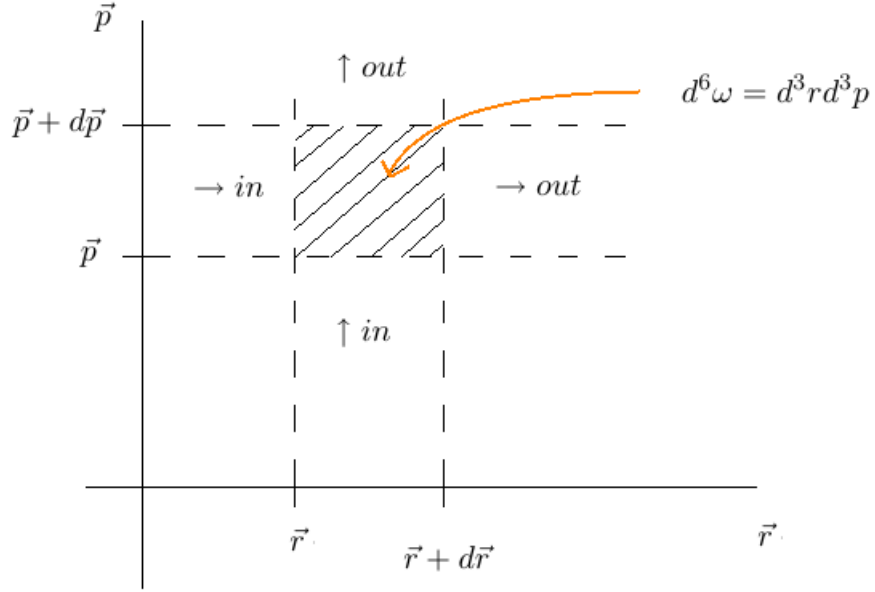
**Funkcja rozkładu  $f(\vec{r}, \vec{p}, t)$ .**

- Zmiana położenia: efekty dryfowe (wynika z faktu, iż cząstka ma prędkość)
- Zmiana pędu: efekty polowe (wynika z przyspieszenia wywołanego polem)(pomijamy zderzenia)

$$\Delta t : \begin{cases} r \rightarrow r + \Delta r \\ p \rightarrow p + \Delta p \end{cases}$$

$$f(\vec{r} + \Delta \vec{r}, \vec{p} + \Delta \vec{p}, t + \Delta t) \simeq f(\vec{r}, \vec{p}, t) + \nabla_{\vec{r}} f(\vec{r}, \vec{p}, t) \Delta r + \nabla_{\vec{p}} f(\vec{r}, \vec{p}, t) + \partial_t f(\vec{r}, \vec{p}, t)$$





$$\frac{f(\vec{r} + \Delta\vec{r}, \vec{p} + \Delta\vec{p}, t + \Delta t) - f(\vec{r}, \vec{p}, t)}{\Delta t} \simeq \nabla_{\vec{r}} f(\vec{r}, \vec{p}, t) \frac{\Delta r}{\Delta t} + \dots$$

Przy  $\Delta t \rightarrow 0$ :

$$\frac{d}{dt} f(\vec{r}, \vec{p}, t) = \nabla_{\vec{r}} f(\vec{r}, \vec{p}, t) \frac{d}{dt} \vec{r}(t) + \nabla_{\vec{p}} f(\vec{r}, \vec{p}, t) \frac{d}{dt} \vec{p}(t) + \partial_t f(\vec{r}, \vec{p}, t).$$

- ujęcie newtonowskie

$$\frac{d}{dt} f(\vec{r}, \vec{p}, t) = \nabla_{\vec{r}} f(\vec{r}, \vec{p}, t) \cdot \underbrace{\vec{v}(t)}_{\text{prędkość cz.}} + \nabla_{\vec{p}} f(\vec{r}, \vec{p}, t) \cdot \underbrace{\vec{F}(\vec{r})}_{\text{siła}} + \partial_t f(\vec{r}, \vec{p}, t)$$

- ujęcie hamiltonowskie

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} f(\vec{r}, \vec{p}, t) &= \nabla_{\vec{r}} f(\vec{r}, \vec{p}, t) \nabla_{\vec{p}} H(\vec{r}, \vec{p}, t) - \nabla_{\vec{p}} f(\vec{r}, \vec{p}, t) \nabla_{\vec{r}} H(\vec{r}, \vec{p}, t) + \partial_t f(\vec{r}, \vec{p}, t) = \\ &= \{f(\vec{r}, \vec{p}, t), H(\vec{r}, \vec{p}, t)\} + \partial_t f(\vec{r}, \vec{p}, t). \end{aligned}$$

Wzdłuż trajektorii fazowej  $\frac{d}{dt} f(\vec{r}, \vec{p}, t) = 0$  [tw. Liouville'a].

### 5.1.2 Równanie Własowa

$$\vec{v}(t) \nabla_{\vec{r}} f(\vec{r}, \vec{p}, t) + \vec{F}(\vec{r}) \nabla_{\vec{p}} f(\vec{r}, \vec{p}, t) + \partial_t f(\vec{r}, \vec{p}, t) = 0 \quad (103)$$

lub w innej postaci

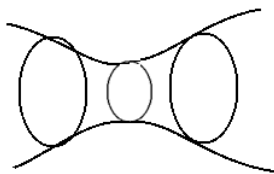
$$\partial_t f(\vec{r}, \vec{p}, t) = \{H(\vec{r}, \vec{p}, t), f(\vec{r}, \vec{p}, t)\}. \quad (104)$$

Równanie Własowa  $\equiv$  bezzderzeniowe równanie Boltzmana

### Zagadnienie Własowa-Pissona

$$\begin{cases} \vec{v}(t) \nabla_{\vec{r}} f(\vec{r}, \vec{p}, t) + \vec{F}(\vec{r}) \nabla_{\vec{p}} f(\vec{r}, \vec{p}, t) + \partial_t f(\vec{r}, \vec{p}, t) = 0 \\ \nabla \vec{E}(\vec{r}, t) = \langle \rho(\vec{r}, t) \rangle \end{cases} \leftarrow \text{z uśrednienia teorii Lorentza.}$$

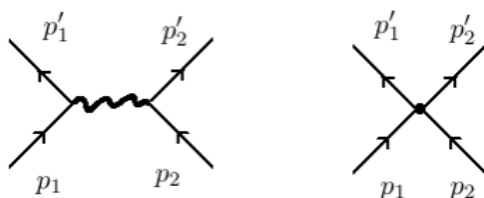
Rysunek 1: Opór Shavina - Maxwella



### 5.1.3 Równanie Boltzmana

Zakładamy teraz, że oddziaływania są zderzeniami. Zakładamy, że zderzenia są:

1. elastyczne i mają charakter podwójny (binarny)
2. kontaktowe, a w ich wyniku występuje jedynie zmiana pędu



### Klasyczny gaz rozrzedzony

Klasycznym gazem rozrzedzonym nazywamy gaz cząstek klasycznych w którym zachodzą jedynie zderzenia binarne.

$r_0$  - rozmiar liniowy cząstek

$l$  - średnia droga swobodna

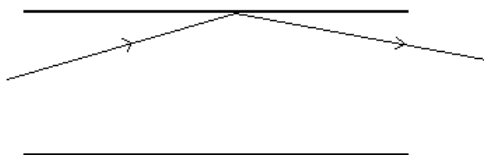
$L$  - rozmiary liniowe układu

Charakterystyczna skalarna długość:

1. transport dyfuzyjny:  $r_0 \ll l \ll L$



2. transport balistyczny:  $r_0 \ll L \ll l$



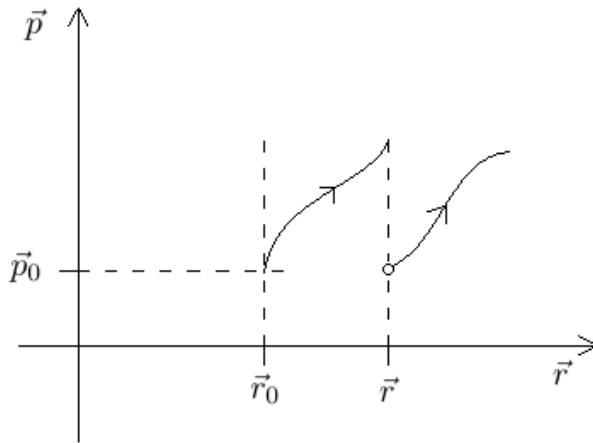
3. lokalizacja:  $r_0 \approx l < L$



Średnia droga swobodna to średnia odległość przebyta przez cząstkę pomiędzy kolejnymi zderzeniami.

$$l = \frac{1}{n\sigma}, \quad (105)$$

gdzie  $\sigma$  - przekrój czynny.



$$\frac{d}{dt}f(\vec{r}, \vec{p}, t) \neq 0 \quad \leftarrow \text{dla zderzeń}$$

$$\frac{d}{dt}f(\vec{r}, \vec{p}, t) = I[f(\vec{r}, \vec{p}, t)] \quad \leftarrow \text{całka zderzeń}$$

Podczas zderzeń muszą być spełnione zasady zachowania:

- z zasady zachowania cząstek:  $\int d^3p I[f(\vec{r}, \vec{p}, t)] = 0$
- z zasady zachowania pędu:  $\int d^3p \vec{p} I[f(\vec{r}, \vec{p}, t)] = 0$
- z zasady zachowania energii:  $\int d^3p E(p) I[f(\vec{r}, \vec{p}, t)] = 0$ .

**Równanie bolzmana ma postać:**

$$\vec{v}(t) \nabla_{\vec{r}} f(\vec{r}, \vec{p}, t) + \vec{F}(\vec{r}) \nabla_{\vec{p}} f(\vec{r}, \vec{p}, t) + \partial_t f(\vec{r}, \vec{p}, t) = I[f(\vec{r}, \vec{p}, t)]$$

**Problem Boltzmana-Poissona**

$$\vec{v}(t) \nabla_{\vec{r}} f(\vec{r}, \vec{p}, t) + [q(\vec{E}(\vec{r}, t) + \vec{v}(t) \times \vec{B}(\vec{r}, t))] (\vec{r}) \nabla_{\vec{p}} f(\vec{r}, \vec{p}, t) + \partial_t f(\vec{r}, \vec{p}, t) = I[f(\vec{r}, \vec{p}, t)]$$

Założmy, że nie ma pól zewnętrznych ( $\vec{F} = \vec{0}$ ). Wtedy

$$\partial_t f(\vec{r}, \vec{p}, t) + \vec{v} \nabla_{\vec{r}} f(\vec{r}, \vec{p}, t) = I[f(\vec{r}, \vec{p}, t)] \quad / \int d^3p$$

Korzystamy z równości:

$$n(\vec{r}, t) = \int d^3p f(\vec{r}, \vec{p}, t)$$

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = \int d^3p \vec{v}(\vec{p}) f(\vec{r}, \vec{p}, t)$$

$$\partial_t n(\vec{r}, t) + \nabla_{\vec{r}} \vec{j}(\vec{r}, t) = \int d^3p I[f(\vec{r}, \vec{p}, t)] = 0$$

$$\partial_t n(\vec{r}, t) + \nabla_{\vec{r}} \vec{j}(\vec{r}, t) = 0.$$

Z prawa Ficka  $\vec{j}(\vec{r}, t) = -D(\vec{r}, t) \nabla_{\vec{r}} n(\vec{r}, t)$ , zatem

$$\partial_t n(\vec{r}, t) = \nabla_{\vec{r}} [D(\vec{r}, t) \nabla_{\vec{r}} n(\vec{r}, t)] \quad \leftarrow \text{przybliżenie ośrodka homogenicznego}$$

$$\partial_t n(\vec{r}, t) = D \nabla_{\vec{r}}^2 n(\vec{r}, t) \quad \leftarrow \text{przybliżenie dyfuzyjne.}$$

## 5.2 Zespoły statystyczne i przestrzeń fazowa $\Gamma$

$\Gamma$  - przestrzeń fazowa,  $\dim[\Gamma] = 6N$ . Układ jest w niej reprezentowany przez jeden punkt

$$(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, \vec{p}_1, \vec{p}_2, \dots, \vec{p}_N) \in \Gamma.$$

Zespołem statystycznym nazywamy zbiór identycznych nieoddziałujących układów podlegających tym samym warunkom zewnętrznym, lecz istniejących w różnych mikrostanach

$$\rho(\{\vec{r}_i\}, \{\vec{p}_i\}) d^{3N} r d^{3N} p, \quad d^{3N} r d^{3N} p = d^{3N} \gamma$$

$$\text{gestość prawdopodobieństwa} = \frac{\rho(\{\vec{r}_i\}, \{\vec{p}_i\})}{\int d^{3N} \gamma \rho(\{\vec{r}_i\}, \{\vec{p}_i\})}.$$

Można wyliczać średnią po zespołach

$$\langle A \rangle = \frac{\int d^{3N} \gamma A(\{\vec{r}_i\}, \{\vec{p}_i\}) \rho(\{\vec{r}_i\}, \{\vec{p}_i\})}{\int d^{3N} \gamma \rho(\{\vec{r}_i\}, \{\vec{p}_i\})}.$$

### 5.2.1 Twierdzenie Liouville'a

Przepływ fazowy układu hamiltonowskiego zachowuje objętość. Inaczej zbiór punktów fazowych zamkniętych w pewnej objętości fazowej porusza się jak nieściśliwa ciecz.

## 6 Klasyczna teoria przewodnictwa elektronowego metali

### 6.1 Teoria Drudego-Lorenza

Idea Drudego polegała na zastosowaniu kinetycznej teorii gazów do opisu ciał stałych

#### 6.1.1 Założenia Drudego

1. Przewodnictwo elektryczne w metalach ma charakter dualny (założenie oparte na obserwacjach zjawiska elektrolizy).
2. Wprowadził twierdzenie o ekwipartycji energii. Średnia energia kinetyczna na każdy stopień swobody jest taka sama dla wszystkich cząstek tworzących gaz rozrzedzony

$$\langle E_k \rangle = \frac{3}{2} k_B T$$

$$E_k = \frac{1}{2}mv^2 \implies \frac{1}{2}m\langle v^2 \rangle = \frac{3}{2}k_B T \implies \langle v^2 \rangle = \frac{3k_B T}{m}.$$

$M_j$  - masa jonów       $m_e$  - masa elektronów

$$\left. \begin{aligned} \frac{\langle v_j^2 \rangle}{\langle v_e^2 \rangle} &= \frac{\frac{3k_B T}{M_j}}{\frac{3k_B T}{m_e}} = \frac{m_e}{M_j} \\ M_j &\gg m_e \end{aligned} \right\} \implies \langle v_e^2 \rangle \gg \langle v_j^2 \rangle.$$

Drude przyjął, że bardziej "ruchliwe" są elektrony.

### 6.1.2 Prawo Wiedemana-Franza

$$\frac{\kappa}{\sigma} = \text{const} \left( \frac{k_B}{e} \right)^2,$$

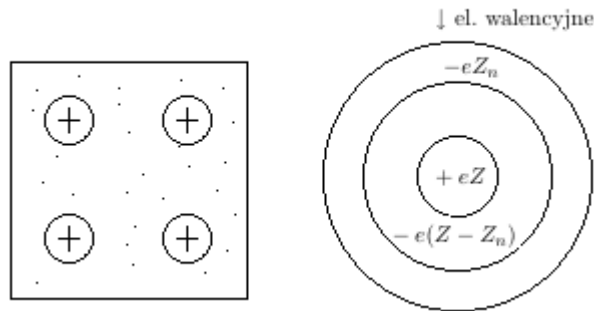
gdzie  $\kappa$  - przewodnictwo cieplne,  $\sigma$  - przewodnictwo elektryczne (prawo dobrze spełnione dla małych i dużych temperatur, zawodzi dla temperatur pośrednich oraz dla  $\dim \neq 3$ ).

$$\text{const} \Big|_{\text{Drude}} = 3 \qquad \text{const} \Big|_{\text{modern}} = \frac{\pi^2}{3}.$$

### 6.1.3 Założenia Lorentza (1905)

1. We wszystkich metalach nośnikami ładunku ujemnego są elektrony.
2. Jony (ład. +) pozostają nieruchome

jon =  $\underbrace{\text{jądro} + \text{wewnętrzne powłoki}}_{\text{rdzeń}}$



**Gazem Lorentza** nazywamy rozrzedzony gaz, którego cząstki zderzają się jedynie ze zlokalizowanymi centrami rozpraszającymi.

### 6.1.4 Aksjomatyczne sformułowanie teorii Drudego-Lorentza

1. Atomy metalu ulegają samorzutnej jonizacji, a elektrony walencyjne tworzą gaz elektronów przewodnictwa.
2. Elektrony przewodnictwa nie oddziałują wzajemnie, natomiast oddziałują z jonami poprzez zderzenia. Poza zderzeniami ruch elektronu jest opisany klasycznie.

3. Zderzenia elektronów z jonami zachodzą z prawdopodobieństwem  $\frac{1}{\tau}$  w jednostce czasu. W wyniku zderzenia zmienia się jedynie pęd elektronu i elektron rozpraszany jest w losowym kierunku.
4. Prędkość rozpraszanego elektronu wynika wyłącznie z lokalnej temperatury układu.

### 6.1.5 Wyprowadzenie Prawa Ohma z teorii D-L

W ciele stałym występują siły lepkości, które można modelować poniższym wzorem

$$m\ddot{\vec{r}}(t) = -e\vec{E}(t) - m\Gamma\vec{v}(t) - m\Omega^2\vec{r}(t) \quad (106)$$

Zał:  $\Omega = 0$ :

$$m\ddot{\vec{r}}(t) = -e\vec{E}(t) - m\Gamma\dot{\vec{r}}(t) \quad (107)$$

$$\dim[m\Gamma v] = N = \dim[m] \dim[\Gamma] \dim[v] \implies \dim[\Gamma] = \frac{N}{\frac{kgm}{s}} = \frac{1}{s}.$$

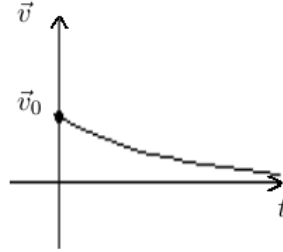
Dla zewnętrznego pola  $\vec{E} = \vec{0}$ :

$$m\ddot{\vec{r}}(t) + m\Gamma\dot{\vec{r}}(t) = 0 \quad (108)$$

$$\begin{cases} \ddot{\vec{r}}(t) = \dot{\vec{v}}(t) \\ \ddot{\vec{r}}(t) = -\Gamma\dot{\vec{v}}(t) \end{cases}$$

$$\frac{d}{dt}[\ln \dot{\vec{v}}(t)] = -\Gamma \implies \dot{\vec{v}} = \dot{\vec{v}}_0 e^{-\Gamma(t-t_0)}$$

$$\tau = \frac{1}{\Gamma} \quad \leftarrow \text{śr. czas relaksacji}$$



### Transformata Fouriera

$$\vec{X}(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \vec{X}(\omega) e^{i\omega t}$$

$$\vec{X}(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt \vec{X}(t) e^{-i\omega t}.$$

Rozważmy  $\vec{E} = \vec{E}(t)$ . Na poniższe równanie nakładamy obustronnie transformatę Fouriera.

$$\ddot{\vec{r}}(t) = \Gamma\dot{\vec{r}}(t) = -\frac{e}{m}\vec{E}(t) \quad (109)$$

$$\frac{d^2}{dt^2} \left[ \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \vec{r}(\omega) e^{i\omega t} \right] + \Gamma \frac{d}{dt} \left[ \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \vec{r}(\omega) e^{i\omega t} \right] = -\frac{e}{m} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \vec{E}(\omega) e^{i\omega t}$$

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \left\{ \left[ (i\omega)^2 \vec{r}(\omega) + \Gamma i\omega \vec{r}(\omega) \right] + \frac{e}{m} \vec{E}(\omega) \right\} e^{i\omega t} = 0$$

$$\left[ (i\omega)^2 + \Gamma i\omega \right] \vec{r}(\omega) = -\frac{e}{m} \vec{E}(\omega)$$

$$\vec{r}(\omega) = -\frac{e}{m} \frac{1}{(i\omega)^2 + i\omega\Gamma} \vec{E}(\omega). \quad (110)$$

Następnie gęstość prądu średniujemy po przestrzeni

$$\begin{aligned} \vec{j}(\vec{r}, t) &= -e \sum_{j/1}^N \vec{v}_j(t) \delta(\vec{r} - \vec{r}_j(t)) \quad / \frac{1}{V} \int d^3r \\ \vec{j}(t) &= -e \sum_{j/1}^N \vec{v}_j(t) \frac{1}{V} \int d^3r \delta(\vec{r} - \vec{r}_j(t)) = -e \frac{N}{V} \underbrace{\frac{1}{N} \sum_{j/1}^N \vec{v}_j(t)}_{\vec{v}_{\text{sr}}} = -en\vec{v}(t) \\ \vec{j}(t) &= -en\dot{\vec{r}}(t). \end{aligned}$$

Przechodzimy do reprezentacji fourierowskiej

$$\vec{j}(\omega) = -en i\omega \vec{r}(\omega)$$

$$\vec{j}(\omega) = \frac{e^2}{m} n \frac{i\omega}{(i\omega)^2 + i\omega\Gamma} \vec{E}(\omega). \quad (111)$$

$$\vec{j}(\omega) = \sigma(\omega) \vec{E}(\omega) \quad \leftarrow \text{Prawo Ohma (po transformacji F.)} \quad (112)$$

$$\begin{aligned} \sigma(\omega) &= \frac{e^2 n}{m} \frac{i\omega}{(i\omega)^2 + i\omega\Gamma} = \frac{e^2 n}{m} \frac{(-\omega^2 - i\omega\Gamma)i\omega}{\omega^4 + \omega^2\Gamma^2} = \frac{e^2 n}{m} \frac{\Gamma - i\omega}{\omega^2 + \Gamma^2} \\ \sigma(\omega) &= \frac{e^2 n}{m} \frac{\Gamma}{\omega^2 + \Gamma^2} - i \frac{e^2 n}{m} \frac{\omega}{\omega^2 + \Gamma^2}. \end{aligned} \quad (113)$$

Niech  $\omega = 0$ :

$$\begin{aligned} \sigma(0) &= \frac{e^2 n}{m} \frac{1}{\Gamma} = \frac{e^2 n}{m} \tau = \sigma_D \\ \sigma_D &= \frac{e^2 n}{m} \tau. \end{aligned} \quad (114)$$

- jeżeli  $\sigma(0) > 0$ , to "przewodnik"
- jeżeli  $\sigma(0) = 0$ , to izolator.  $\frac{e^2 n}{m} \tau = 0$ 
  - $n\tau \rightarrow 0$  - lokalizacja Andersona
  - $m \rightarrow \infty$  - lokalizacja Motta

## 7 Półklasyczna teoria przewodnictwa elektronowego metali

### 7.1 Zdegenerowany gaz elektronowy

#### 7.1.1 Wstęp

W 1926 roku Pauli opublikował zakaz Pauliego, a Fermi i Dirac- statystyki dla elektronów. Statystyki są zupełnie inne od tych, które założył Drude (w statystykach Fermiego-Diraca elektrony mają prędkość zgodnie z rozkładem Maxwella).

W 1927 roku Sommerfeld zmodyfikował teorię Drudego, zakładając w nim statystykę Fermiego- Diraca. Jest to tzw. półklasyczna (a nie kwantowa) teoria, ponieważ Sommerfeld założył kwantową statystykę Fermiego-Diraca, w sposób kwantowy opisał również prawdopodobieństwo przejść, natomiast cały aparat matematyczny pozostał klasyczny.

### 7.1.2 Zakaz Pauliego

#### 1. Tw. Zakaz Pauliego

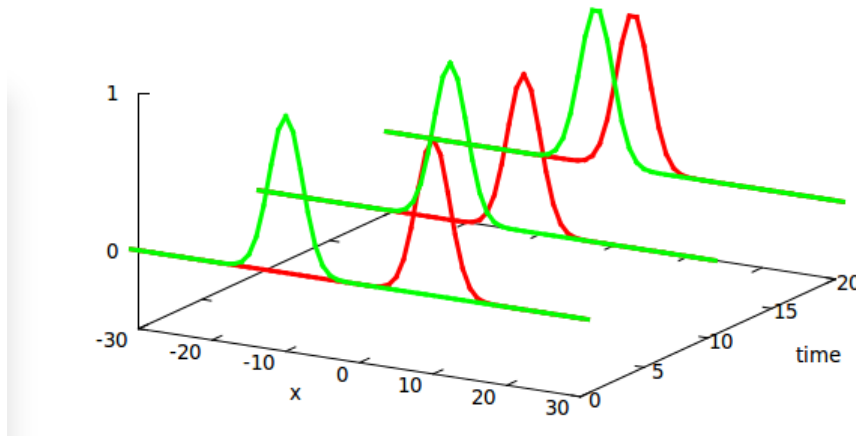
Prawdopodobieństwo znalezienia w układzie *jednorodnych i nieoddziałujących* fermionów pary cząstek o jednakowych liczbach kwantowych jest równe 0.

#### 2. Komentarz:

- *nieoddziałujących*- bo jest to gaz elektronowy. Zakładamy, że jest tak rzadki, że nie ma w nim zderzeń elektron-elektron. Są za to zderzenia elektron-jon (jest to zatem gaz Lorentza).
- *jednakowych*- nie możemy rozróżnić elektronów- bo zgodnie z mechaniką kwantową nie możemy określić dokładnie ich trajektorii.

Przykład: Rozważmy 2 cząstki. O ile w pierwszej chwili możemy określić ich położenie (są to dwa gaussiany; patrz- rysunek poniżej), to w następnych chwilach ich rozkłady się przekrywają i nie jesteśmy w stanie ustalić położenia danej cząstki - stąd nie możemy określić trajektorii żadnej z tych cząstek.

Ewolucję czasową tych 2 cząstek przedstawia poniższy rysunek.



To powoduje, że gaz ten nie jest już klasyczny. Jest to tzw. gaz zdegenerowany.

### 7.1.3 Stan układu- liczby kwantowe

- Stan układu Klasyczny stan układu jest określony przez:

$$|\vec{r}, \vec{p}\rangle \quad (115)$$

Kwantowy stan układu jest określony przez:

$$|\Psi\rangle \quad (116)$$

- $\vec{p}$  jako liczba kwantowa gdzie  $\Psi$  to abstrakcyjny wektor stanu. Funkcja falowa przedstawia się wzorem:

$$\Psi_{\vec{p}}(\vec{r}, t) = \frac{1}{V} e^{-\frac{i}{\hbar}(E(\vec{p})t - \vec{p} \cdot \vec{r})} \quad (117)$$

gdzie  $\vec{p}$  jest liczbą kwantową, bo jednoznacznie określa funkcję falową. Można zatem oznaczać:

$$\Psi_{\vec{p}}(\vec{r}, t) = \langle \vec{r} | \Psi_{\vec{p}(t)} \rangle = \langle \vec{r} | \vec{p} \rangle \quad (118)$$



gdzie  $|\Psi_{\vec{p}(t)}\rangle$  to wektor stanu zapisany w obrazie Schroedingera.

- Spin jako liczba kwantowa Kolejną liczbą kwantową jest rzut spinu  $\sigma$ . Można zatem zapisać:

$$|\Psi\rangle = |\vec{p}, \sigma\rangle \quad (119)$$

#### 7.1.4 Poziomy energetyczne

Relacja de Broglie'a przedstawia:

$$\vec{p} = \hbar \vec{k} \quad (120)$$

gdzie  $k$  jest dyskretne:

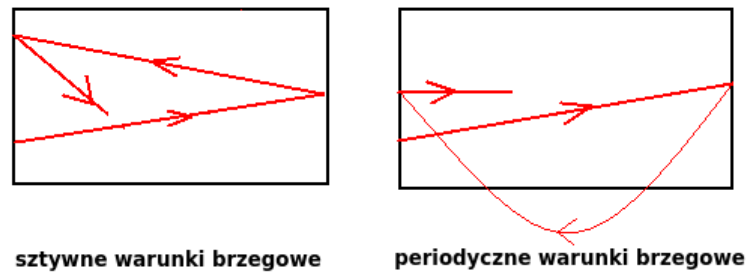
- sztywne warunki brzegowe:

$$k_i = \frac{n_i \pi}{L_i} \quad ; n_i \in \mathbb{N} \quad (121)$$

- periodyczne warunki brzegowe

$$k_i = \frac{2n_i \pi}{L_i} \quad ; n_i \in \mathbb{Z} \quad (122)$$

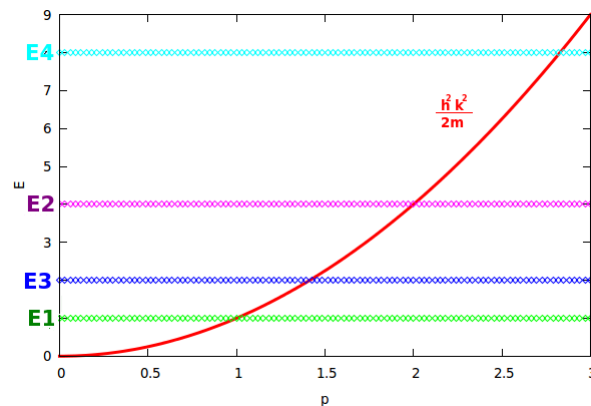
Warunki te przedstawia schematycznie poniższy rysunek:



Z kolei relacja dyspersji dla elektronów swobodnych określa się wzorem:

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (123)$$

Skoro  $k$  jest dyskretne, to również  $E$  jest dyskretne. Oznacza to, że energia jest skwantowana, czyli istnieją poziomy matematyczne, pokazane na poniższym rysunku.



### 7.1.5 Rozkład Fermiego-Diraca

1. Tw. Dla niezerowej temperatury średnia liczba fermionów przypadających na 1 stan jest określony rozkładem Fermiego-Diraca:

$$f_{FD}(E(\vec{p})) = f_{FD}(\vec{p}) = \frac{1}{1 + e^{\frac{E(\vec{p}) - \mu}{k_B T}}} \quad (124)$$

2. Asymptotyczne zachowanie:
  - 1) W niskich temperaturach:

$$\lim_{T \rightarrow 0} f_{FD}(E(\vec{p})) = \theta(E(\vec{p}) - \mu) = \begin{cases} 1 & \text{dla } E(\vec{p}) < \mu \\ 0 & \text{dla } E(\vec{p}) > \mu \end{cases} \quad (125)$$

gdzie  $\theta$  to funkcja schodkowa Heavi-Side'a.

- 2) W wysokich temperaturach rzędu  $|E - \mu| \gg k_B T$ :

$$\lim_{\frac{|E - \mu|}{k_B T} \rightarrow \infty} f_{FD}(E(\vec{p})) = e^{-\frac{E(\vec{p}) - \mu}{k_B T}} = f_B(E(\vec{p})) \quad (126)$$

gdzie  $f_B$  to rozkład Boltzmanna.

- 3) W punkcie  $E(\vec{p}) = \mu$ :

$$f_{FD}(E(\vec{p}) = \mu) = \frac{1}{1 + 1} = \frac{1}{2} \quad (127)$$

3. Jak wyznaczyć potencjał chemiczny  $\mu$ ?

- a) Z równania:

$$N = (2\sigma + 1) \sum_{\vec{p}} f_{FD}(E(\vec{p})) \quad (128)$$

W ośrodku nieskończonym:

$$V \rightarrow \infty : N = (2\sigma + 1) \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3p f_{FD}(E(\vec{p})) \quad (129)$$

- b) z równania na koncentrację

Pamiętamy, że koncentracja elektronów to:

$$n = \frac{N}{V} \quad (130)$$

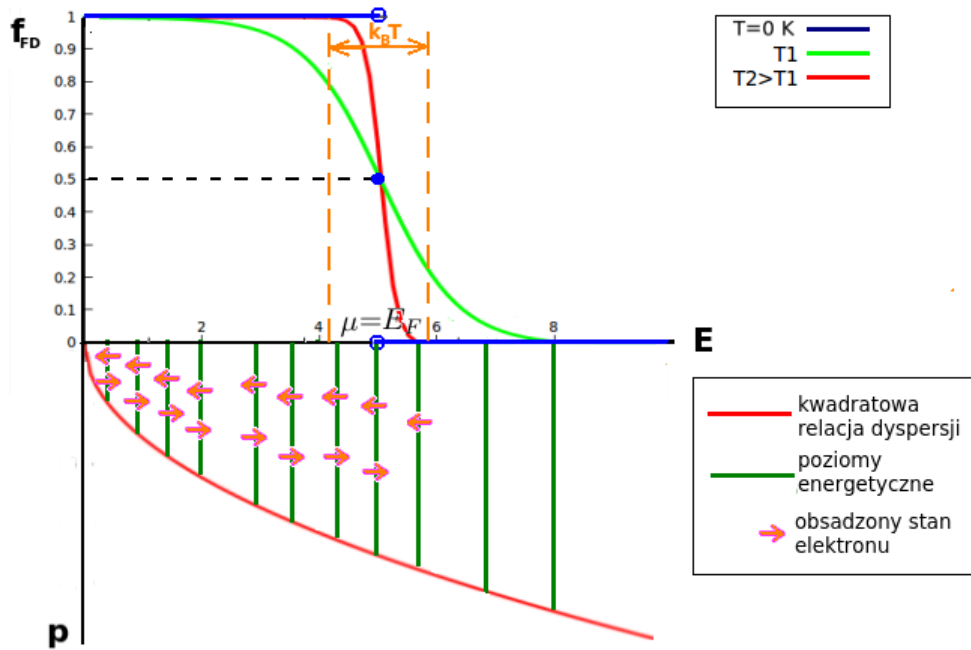
gdzie  $V$  to objętość naczynia, w którym są elektrony.

Zatem:

$$n = N = \frac{2\sigma + 1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3p f_{FD}(E(\vec{p})) = \frac{2\sigma + 1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3p \frac{1}{1 + e^{\frac{p^2}{2m} - \mu}} \quad (131)$$

$n$  można fizycznie zmierzyć w pomiarze efektu Halla.

4. Ogólny kształt funkcji rozkładu Fermiego-Diraca:



Zgodnie z zakazem Pauliego, na każdym poziomie energetycznym są maksymalnie 2 elektrony- o przeciwnych spinach.

Elektrony mogą przeskakiwać ze stanów obsadzonych do stanów nieobsadzonych w okolicy Energii Fermiego, w przedziale o szerokości  $k_B T$ .

5. Pochodna funkcji rozkładu Fermiego Diraca:

W  $T = 0K$ :

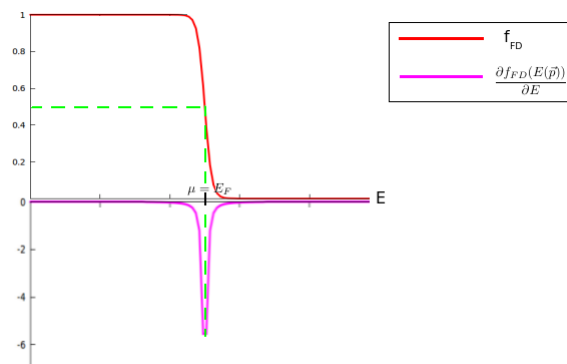
$$\frac{\partial f_{FD}(E(\vec{p}))}{\partial E} = -\delta(E(\vec{p}) - E_F) \quad (132)$$

W  $T > 0K$ :

$$\frac{\partial f_{FD}(E(\vec{p}))}{\partial E} = -\frac{1}{\pi} \frac{k_B T}{(E(\vec{p}) - E_F)^2 + (k_B T)^2} \quad (133)$$

Powyższy wyraz to Lorencjan.

Jest to tzw. funkcja spektralna.[NO I???????????????????? CO TO JEST??]



## 7.2 Całki zdarzeń $I[f(\vec{r}, \vec{p}, t)]$ - przybliżenie czasu relaksacji (PCR)

### 7.2.1 Całka zdarzeń- definicja

Uw. Aby uzyskać czytelność wzorów, dalej w indeksach pominięto wektor nad pędami:  $\vec{p} \equiv p$ .

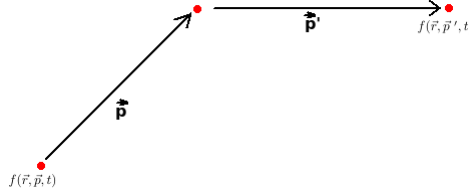
$$I[f(\vec{r}, \vec{p}, t)] = \sum_{p'} \{S_{p'p} - S_{pp'}\} \quad (134)$$

gdzie  $\vec{p}'$  to pęd końcowy, natomiast:

$$S_{pp'} = Q_{pp'} f(\vec{r}, \vec{p}, t) [1 - f(\vec{r}, \vec{p}', t)] \quad (135)$$

gdzie:

- $Q$  opisuje szybkość przejść między  $\vec{p}$  i  $\vec{p}'$  (czyli szybkość rozprożeń);
- $f(\vec{r}, \vec{p}, t)$  to stan, w którym jest elektron;
- $f(\vec{r}, \vec{p}', t)$  to stan, do którego elektron się rozprasza (na atomie).
- $\vec{r}$  w obu wyrazach jest ten sam, czyli elektron rozprasza się w 1 punkcie przestrzeni (nie przemieszcza się w czasie rozproszenia).



### 7.2.2 Równanie Boltzmana- rozwiązanie

1. Ogólna postać, z zastosowaniem definicji całki zdarzeń:

$$\begin{aligned} \partial_t f(\vec{r}, \vec{p}, t) + \vec{v} \cdot \nabla_{\vec{r}} f(\vec{r}, \vec{p}, t) + q(E + \vec{v} \times \vec{B}(\vec{r}, t)) \cdot \nabla_p f(\vec{r}, \vec{p}, t) = \\ = \sum_{p'} \{Q_{p'p} f(\vec{r}, \vec{p}', t) (1 - f(\vec{r}, \vec{p}, t)) - Q_{pp'} f(\vec{r}, \vec{p}, t) (1 - f(\vec{r}, \vec{p}', t))\} \end{aligned} \quad (136)$$

2. Zasada równowagi mikroskopowej:

Szybkość przejścia ze stanu 1 do stanu 2 i szybkość przejścia ze stanu 2 do stanu 1 jest taka sama:

$$Q_{p'p} = Q_{pp'} \quad (137)$$

3. Zatem całka zdarzeń:

$$\begin{aligned} I[f(\vec{r}, \vec{p}, t)] &= \sum_{p'} Q_{p'p} \{f(\vec{r}, \vec{p}', t) - f(\vec{r}, \vec{p}', t) f(\vec{r}, \vec{p}, t) - f(\vec{r}, \vec{p}, t) + f(\vec{r}, \vec{p}, t) f(\vec{r}, \vec{p}', t)\} = \\ &= \sum_{p'} Q_{p'p} \{f(\vec{r}, \vec{p}', t) - f(\vec{r}, \vec{p}, t)\} = \\ &= -f(\vec{r}, \vec{p}, t) \sum_{p'} Q_{p'p} \{1 - \frac{f(\vec{r}, \vec{p}', t)}{f(\vec{r}, \vec{p}, t)}\} \end{aligned} \quad (138)$$

4. Wprowadzenie czasu relaksacji:

Wymiarem sumy obecnej w całce zdarzeń jest wymiar szybkości  $Q_{p'p}$ , czyli  $\frac{1}{s}$ . To jest przesłanka, by traktować tę sumę jako **odwrotność czasu relaksacji**  $\tau$ :

$$\sum_{p'} Q_{p'p} \left\{ 1 - \frac{f(\vec{r}, \vec{p}', t)}{f(\vec{r}, \vec{p}, t)} \right\} \equiv \tau^{-1}(\vec{r}, \vec{p}, t) \quad (139)$$

zatem:

$$I[f(\vec{r}, \vec{p}, t)] = - \frac{f(\vec{r}, \vec{p}, t)}{\tau(\vec{r}, \vec{p}, t)} \quad (140)$$

Wówczas równanie Boltzmana:

$$\partial_t f(\vec{r}, \vec{p}, t) + \vec{v} \cdot \nabla_{\vec{r}} f(\vec{r}, \vec{p}, t) + \underbrace{q(E + \vec{v} \times \vec{B}(\vec{r}, t))}_{\text{siła Lorentza } F_L} \cdot \nabla_p f(\vec{r}, \vec{p}, t) = - \frac{f(\vec{r}, \vec{p}, t)}{\tau(\vec{r}, \vec{p}, t)} \quad (141)$$

Wprowadza się również wyrażenie:

$$\tau^{-1}(\vec{p}) = \sum_{p'} Q_{pp'} \quad (142)$$

które jest miarą siły oddziaływania z atomami (rozpraszania na nich). Wówczas:

$$\begin{aligned} I[f(\vec{r}, \vec{p}, t)] &= \frac{f(\vec{r}, \vec{p}, t)}{\tau(\vec{p})} - \sum_{p'} Q_{p'p} f(\vec{r}, \vec{p}', t) = \\ &= \frac{f(\vec{r}, \vec{p}, t) - \frac{\sum_{p'} Q_{p'p} f(\vec{r}, \vec{p}', t)}{\sum_{p'} Q_{p'p}}}{\tau(\vec{p})} = \\ &= \frac{f(\vec{r}, \vec{p}, t) - f_0(\vec{r}, \vec{p}, t)}{\tau(\vec{p})} \end{aligned} \quad (143)$$

gdzie:

- $f(\vec{r}, \vec{p}, t)$  to nierównowagowa funkcja rozkładu
- $f_0(\vec{r}, \vec{p}, t)$  to równowagowa funkcja rozkładu

Dla gazu elektronowego:

$$f_0(\vec{r}, \vec{p}, t) = f_{FD} \quad (144)$$

5. Równanie Boltzmana zyskuje postać:

$$\partial_t f(\vec{r}, \vec{p}, t) + \vec{v} \cdot \nabla_{\vec{r}} f(\vec{r}, \vec{p}, t) + \vec{F}_L \cdot \nabla_p f(\vec{r}, \vec{p}, t) = - \frac{f(\vec{r}, \vec{p}, t) - f_0(\vec{r}, \vec{p}, t)}{\tau(\vec{p})} \quad (145)$$

6. Założenia

I. Badamy układy stacjonarne:  $f(\vec{r}, \vec{p}, t) = f(\vec{r}, \vec{p})$  - nie zależy od  $t$

II. Układ jest jednorodny:  $f(\vec{r}, \vec{p}) = f(\vec{p})$  - nie zależy od  $\vec{r}$

Założenia te wprowadzają idealny gaz elektronowy.

7. Zatem równanie Boltzmanna dla idealnego gazu elektronowego:

$$q\vec{E}(\vec{r}, t) \cdot \nabla_p f(\vec{p}) = -\frac{f(\vec{p}) - f_0(\vec{p})}{\tau(\vec{p})} \quad / \cdot \tau(\vec{p}) \quad (146)$$

Biorąc pod uwagę, że  $q = -e$ :

$$e\tau(\vec{p})\vec{E}(\vec{r}, t) \cdot \nabla_p f(\vec{p}) = f(\vec{p}) - f_0(\vec{p}) \quad (147)$$

Stąd:

$$\underbrace{f(\vec{p})}_{\text{funkcja nierównowagowa}} = \underbrace{f_0(\vec{p})}_{\text{funkcja równowagowa}} + \underbrace{e\tau(\vec{p})E \cdot \nabla_p f(\vec{p})}_{\delta f} \quad (148)$$

gdzie:

$\delta f$  to odchylenie od stanu równowagowego (bo  $\nabla_p f$ ). Zakładamy, że zaburzenie to jest niewielkie:

$$f_0(\vec{p}) \gg \delta f(\vec{p}) \quad (149)$$

Powyższe równanie ma postać rozwinięcia w szereg Taylora do 1. wyrazu

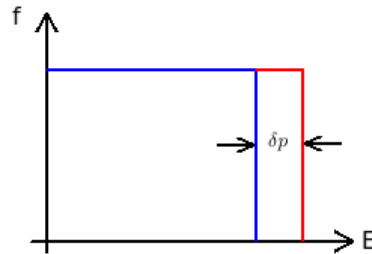
8. Wniosek:

Jeśli przyłożymy małe pole  $\vec{E}(\vec{r}, t)$ , to obowiązuje przybliżenie czasu urojonego i funkcję rozkładu rozwija się w szereg Taylora do 1. wyrazu (bo wychylenie jest niewielkie).

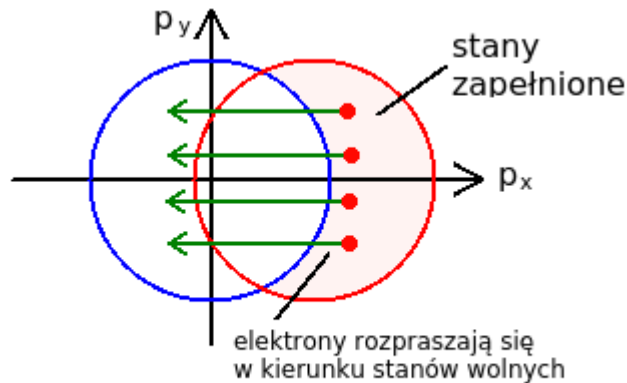
9. Iteracyjne rozwiązywanie równania (148):

$$f_1(\vec{p}) = f_0(\vec{p}) + e\tau(\vec{p})\vec{E}(\vec{r}, t) \cdot \nabla_p f_0(\vec{p}) \simeq f_0(\vec{p} + \underbrace{e\tau(\vec{p})\vec{E}(\vec{r}, t)}_{\delta \vec{p}}) \quad (150)$$

Wniosek: Zmiana pędu spowodowana włączeniem pola  $\vec{E}(\vec{r}, t)$  przesuwa rozkład  $f_{FD}$  o pewne  $\delta p$ :



W książkach ta sama relacja jest pokazywana często w następujący sposób:



10. Gęstość prądu Pamiętajmy:

$$\vec{j} = \sigma \vec{E}(\vec{r}, t) \quad (151)$$

Teraz możemy obliczyć:

$$\begin{aligned} \vec{j} &= evn = \frac{e}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3p \vec{v}(\vec{p}) f(\vec{p}) = \\ &= \frac{e}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3p \vec{v}(\vec{p}) \{f_0(\vec{p}) + e\tau(\vec{p}) \vec{E}(\vec{r}, t) \cdot \nabla_p f(\vec{p})\} \end{aligned} \quad (152)$$

Funkcja równowagowa:

$$f_0 \propto p^2 \quad (153)$$

opisuje pasma niebiorące udział w transporcie, zatem:

$$\int d^3p \vec{v} f_0(\vec{p}) = 0 \quad (154)$$

Zatem:

$$\vec{j} = \frac{e^2}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3p \vec{v}(\vec{p}) \tau(\vec{p}) \nabla_p f(\vec{p}) \cdot \vec{E}(\vec{r}, t) \quad (155)$$

Ale:

$$\nabla_p f(\vec{p}) = \frac{\partial E(\vec{p})}{\partial p} \frac{\partial f(E(\vec{p}))}{\partial E} = \frac{\vec{p}}{m} \frac{\partial f}{\partial E} = \vec{v} \frac{\partial f}{\partial E} \quad (156)$$

Zatem:

$$\vec{j} = \underbrace{\frac{e^2}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3p [\vec{v}(\vec{p}) \otimes \vec{v}(\vec{p})] \tau(\vec{p}) \frac{\partial f}{\partial E}}_{\sigma} \vec{E}(\vec{r}, t) \quad (157)$$

## 8 Kwantowe modyfikacje w równaniu Boltzmannna

### 8.1 Zakres stosowalności równania Boltzmannna

#### 8.1.1 Równanie Boltzmannna

Równanie Boltzmannna przedstawia się następującym równaniem:

$$\partial_t f(\vec{r}, \vec{p}, t) + \vec{v} \cdot \nabla_{\vec{r}} f(\vec{r}, \vec{p}, t) + q \vec{E} \cdot \nabla_{\vec{p}} f(\vec{r}, \vec{p}, t) = \underbrace{f(\vec{r}, \vec{p}, t) - f_0(\vec{r}, \vec{p}, t)}_{\tau(\vec{p})} \quad (158)$$

gdzie człon  $q \vec{E} \cdot \nabla_{\vec{p}} f(\vec{r}, \vec{p}, t)$  to siła Lorentza po zaniedbaniu pola magnetycznego  $\vec{B}(\vec{r}, t)$ . Zakładamy, że mamy do czynienia ze zwyrodniałym gazem elektronowym, zatem:

- ładunek to ładunek elektronu:

$$q = -e \quad (159)$$

- początkowy rozkład to rozkład Fermiego-Diraca:

$$f_0(\vec{r}, \vec{p}, t) = f_{FD}(E) = f_{FD}(p) \quad (160)$$

- tzw. miara oddziaływania między elektronami, wprowadzona na poprzednim wykładzie:

$$\tau^{-1}(\vec{p}) = \sum_{\vec{p}'} Q_{pp'} \quad (161)$$

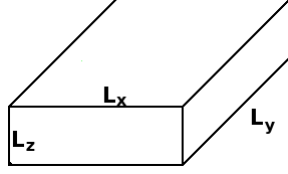
Dzisiejszym celem jest obliczenie  $Q_{pp'}$ .

### 8.1.2 Funkcja falowa

Funkcja falowa w ujęciu kwantowym przedstawia się wzorem:

$$\psi_p(\vec{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{\frac{i}{\hbar} \vec{r} \cdot \vec{p} - i\omega t} \quad (162)$$

Taka funkcja falowa ma wadę - w całej objętości  $V = L_x L_y L_z$ :



gęstość prawdopodobieństwa znalezienia cząstki opisanej funkcją falową  $\psi$  jest stała:

$$\rho_p(\vec{r}, t) = |\psi_p(\vec{r}, t)|^2 = \psi^*(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{V} \quad (163)$$

a to oznacza, że prawdopodobieństwo znalezienia elektronu jest wszędzie takie samo- czyli elektron jest zdelokalizowany.

Nie można się na to zgodzić w przedstawianym toku rozważań, ponieważ jest on prowadzony w podejściu klasycznym.

Należy zatem skonstruować nową funkcję falową:

$$\chi(\vec{r}) = \sum_p C_p e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}} \xrightarrow{\vec{p} \text{ - ciągłe}} \int dp C_p e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}} \quad (164)$$

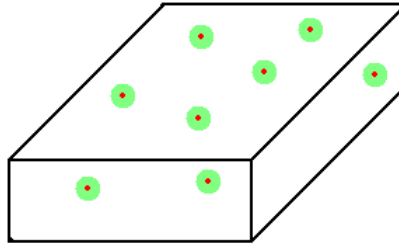
Ostateczne wyrażenie jest transformatą Fouriera, a  $C(p)$  to funkcja kształtu. Wybieramy ją w postaci gaussianu (bo gaussian jest prosty):

$$C(p) = A e^{-\frac{(p-p_F)^2}{2\Delta p^2}} \quad (165)$$

Wtedy:

$$\chi(\vec{r}) = A \int dp e^{-\frac{(p-p_F)^2}{2\Delta p^2}} e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}} \quad (166)$$

Wiadomo, że transformata Fouriera z gaussianu to gaussian, czyli  $\chi(\vec{r})$  jest pewnym gaussianem, zatem gęstość prawdopodobieństwa nie będzie już stała w całej objętości, czyli elektrony nie będą już zdelokalizowane- teraz będą kulkami o rozmyciu  $\Delta r$ :





### 8.1.3 Kryterium stosowalności równania Boltzmannna

Dla "zwykłej" funkcji falowej  $\psi$  spełniona jest komutacja:

$$[\hat{H}, \hat{p}] = \hat{0} \quad (167)$$

zatem operatory energii i pędu mają wspólny ciąg funkcji własnych- są to fale płaskie. Ponadto, z własności komutacji, skoro operatory energii i pędu ze sobą komutują, to oznacza, że mogą być określone dokładnie w jednym momencie (nie obowiązuje ich zasada nieoznaczoności Heisenberga).

Teraz, w funkcji falowej  $\chi$ , utraciliśmy tę jednoznaczność. Funkcje płaskie nie są już funkcjami bazowymi operatora pędu  $\hat{p}$ , zatem pęd nie jest dobrze określony. Dobrze określone są za to pęd Fermiego i wektor falowy Fermiego :

$$p_F = \hbar k_F = \hbar \frac{2\pi}{\lambda_F} \quad (168)$$

$$k_F = \sqrt[3]{3\pi n} \quad (169)$$

gdzie  $n$  to gęstość elektronowa.

Uwzględniamy też relację nieoznaczoności oraz relację de Broglie'a:

$$\Delta p \Delta x \geq \hbar \quad (170)$$

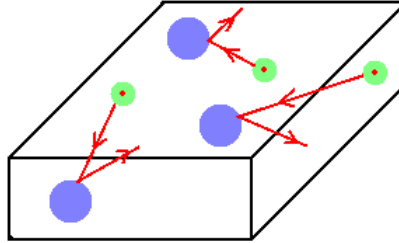
$$\Delta p = \hbar \Delta k \quad (171)$$

Stąd:

$$\Delta x \Delta k \geq 1 \quad (172)$$

gdzie  $\Delta x$  to rozmycie pakietu falowego  $\Delta r$  w przypadku 1-wymiarowym.

Pamiętajmy, że zakładamy, że mamy do czynienia z gazem Lorentza, w którym, w odróżnieniu od gazu idealnego, elektrony rozpraszają się na centrach rozpraszania:



Elektrony między zderzeniami pokonują średnią drogę swobodną:

$$l \propto n_{imp}^{-\frac{1}{3}} \quad (173)$$

gdzie  $n_{imp}$  to gęstość centrów rozpraszania (*imp*- bo traktujemy to jako zaburzenie).

Droga swobodna musi być oczywiście dużo większa od "rozmiaru" elektronu, czyli jego parametru rozmycia  $\Delta x$ :

$$\frac{l}{\Delta x} \gg 1 \quad (174)$$

zatem:

$$l \Delta k \gg 1 \quad (175)$$

więc również:

$$l \Delta k_F \gg 1 \quad (176)$$

Jest to tzw. **kryterium Joffego-Regla**, które określa kiedy można stosować równanie Boltzmanna. Dalsze przekształcenia:

$$\frac{2\pi}{\lambda_F} l \gg 1 \quad \Rightarrow \quad \frac{l}{\lambda_F} \gg 1 \quad (177)$$

Ostatecznie:

$$l \gg \lambda_F \quad (178)$$

czyli droga swobodna jest dużo większa od długości fali de Broglie'a elektronu. Wynika stąd, że stosując równanie Boltzmanna, wycinamy efekty kwantowe wynikające z interferencji fal kwantowych. Inaczej: elektron żyje od zderzenia do zderzenia i nie pamięta, co było wcześniej. To tzw. **proces Markowa**. "Taki prosty obraz jest ukryty w równaniu Boltzmanna".

### 8.1.4 Zakresy stosowalności transportu elektronowego

1. transport dyfuzyjny (niekoherentny)

$$\lambda_F \ll L_\phi < l < L \quad (179)$$

gdzie kolejno:

- $\lambda_F$  - długość fali Fermiego
- $L_\phi$  - długość koherencji (długość, na której elektron wie coś o swojej przeszłości - elektron wie, w jaki sposób uległ rozproszeniu, póki znów się nie rozproszy)
- $l$  - średnia droga swobodna
- $L$  - rozmiar liniowy układu

2. transport koherentny- "transport z pamięcią":

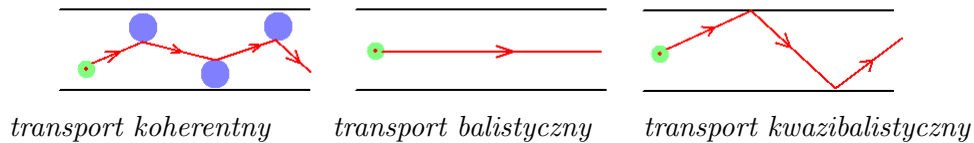
$$\lambda_F \ll l < L_\phi < L \quad (180)$$

3. transport balistyczny (formuły Landauera)- elektron nie spotyka centrów rozpraszania:

$$\lambda_F \ll L \ll l < L_\phi \quad (181)$$

4. transport kwazibalistyczny

Analogicznie jak transport balistyczny, z tym że dopuszcza się odbicia elektronu od ścianek.



## 8.2 Elementy teorii przejść kwantowych- obliczenie elementu $Q_{pp'}$

### 8.2.1 Ustalenie hamiltonianu i równania Schroedingera

Założmy, że układ jest scharakteryzowany przez hamiltonian układu niezaburzonego  $\hat{H}_0$  - czyli punktem wyjścia jest transport balistyczny (w 3D).

Równanie własne (czyli bezczasowe równanie Schroedingera):

$$\hat{H}_0 \phi_n(\vec{r}) = E_n \phi_n(\vec{r}) \quad (182)$$

przy czym  $\hat{H}_0$  niekoniecznie jest hamiltonianem swobodnego elektronu- może być w jakimś potencjale, ale nie może się z niczym zderzać.

Nakładamy warunek normalizacji:

$$\int d^3r \phi_m^*(\vec{r}) \phi_n(\vec{r}) = \delta_{mn} \quad (183)$$

i warunek zupełności.

Ewolucja czasowa funkcji falowej (czyli rozwiązanie czasowego równania Schroedingera):

$$\phi(\vec{r}, t) = \phi_n(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \quad (184)$$

Gęstość prawdopodobieństwa:

$$\rho_n(\vec{r}, t) = |\phi_n(\vec{r})|^2 \quad (185)$$

gdzie:

$$|\phi_n(\vec{r})| = \sqrt{\rho_n(\vec{r}, t)} \quad (186)$$

Poddajemy układ  $\hat{H}_0$  zaburzeniu  $\lambda \hat{V}(t)$ :

$$\hat{H}_0 + \lambda \hat{V}(t) \equiv \hat{H} \quad (187)$$

gdzie  $\hat{V}$  to "potencjał" zaburzający, a  $\lambda$  to "parametr małości".

Równanie Schroedingera zależne od czasu dla powyższego hamiltonianu:

$$i\hbar \partial_t \psi(\vec{r}, t) = \hat{H}(t) \psi(\vec{r}, t) \quad (188)$$

Postulujemy:

$$\psi(\vec{r}, t) = \sum_n C_n(t) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \phi_n(\vec{r}) \quad (189)$$

Wprowadzamy oznaczenie:

$$\omega_n \equiv \frac{E_n}{\hbar} \quad (190)$$

Ostatecznie więc w równaniu Schroedingera:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left[ \sum_n C_n e^{-i\omega_n t} \phi_n(\vec{r}) \right] = [\hat{H}_0 + \lambda \hat{V}(t)] \sum_n C_n(t) e^{-i\omega_n t} \phi_n(\vec{r}) \quad (191)$$

Rozwiążmy to równanie.

### 8.2.2 Rozwiązanie równania Schroedingera- etap I

Biorąc pod uwagę równanie (182) i wykonując pochodną czasową, z powyższego równania dostajemy:

$$i\hbar \sum_n \left[ \dot{C}_n e^{-i\omega_n t} \phi_n(\vec{r}) - i\omega_n C_n e^{-i\omega_n t} \right] = [E_n + \lambda \hat{V}(t)] \phi(\vec{r}) C_n(t) e^{-i\omega_n t} \quad (192)$$

gdzie  $\dot{C}$  to pochodna po czasie. Ponieważ  $E_n = \omega_n \hbar$ , to podkreślone czynniki w powyższym równaniu znoszą się.

Tak powstałe równanie scałkujemy obustronnie:

$$\begin{aligned} \sum_n i\hbar \dot{C}_n(t) e^{-i\omega_n t} \phi_n(\vec{r}) &= \lambda \sum_n \hat{V}(t) \phi_n(\vec{r}) C_n(t) e^{-i\omega_n t} \quad \bigg/ \cdot \int d^3r \phi_m^* \\ \sum_n i\hbar \dot{C}_n(t) e^{-i\omega_n t} \int d^3r \phi_n(\vec{r}) \phi_m^*(\vec{r}) &= \lambda \sum_n \underbrace{\int d^3r \phi_m^* \hat{V}(t) \phi_n(\vec{r})}_{\text{element macierzowy } V_{mn}(t)} C_n(t) e^{-i\omega_n t} \end{aligned} \quad (193)$$

$$\sum_n i\hbar \dot{C}_n(t) e^{-i\omega_n t} \delta_{mn} = \lambda \sum_n V_{mn}(t) C_n(t) e^{-i\omega_n t} \quad (194)$$

Z własności delty Kroneckera:

$$i\hbar \dot{C}_m(t) e^{-i\omega_m t} = \lambda \sum_n V_{mn}(t) C_n(t) e^{-i\omega_n t} \quad \Big/ \cdot e^{i\omega_m t}$$

$$i\hbar \dot{C}_m(t) = \lambda \sum_n V_{mn}(t) C_n(t) e^{i(\omega_m - \omega_n)t} \quad (195)$$

Wprowadźmy oznaczenie:

$$\omega_{mn} \equiv \omega_m - \omega_n \quad (196)$$

Ostatecznie dostajemy równanie:

$$i\hbar \dot{C}_m(t) = \lambda \sum_n V_{mn}(t) C_n(t) e^{i\omega_{mn}t} \quad (197)$$

Powyższy rachunek pozwolił sprowadzić równanie Schroedingera do równania, z którego w kolejnym etapie obliczymy współczynniki  $C_n$ . Jak później pokażemy, współczynniki te mają kluczową rolę w obliczeniu  $Q_{pp'}$ .

### 8.2.3 Rozwiązanie równania Schroedingera- etap II

Aby rozwiązać powyższe równanie, załóżmy, że:

$$C_m(t) = \sum_{k/0} C_m^{(k)}(t) \lambda^k = C_m^{(0)}(t) + C_m^{(1)}(t) \lambda + C_m^{(2)}(t) \lambda^2 + \dots \quad (198)$$

czyli rozwijamy  $C_m$  w szereg.  $C^{(k)}$  to  $k$ -ta pochodna po czasie.

Wówczas:

$$i\hbar \left[ \dot{C}_m^{(0)}(t) + \lambda \dot{C}_m^{(1)}(t) + \lambda^2 \dot{C}_m^{(2)}(t) + \dots \right] = \lambda \sum_n V_{mn}(t) e^{i\omega_{mn}t} \left[ C_m^{(0)}(t) + C_m^{(1)}(t) \lambda + C_m^{(2)}(t) \lambda^2 + \dots \right] \quad (199)$$

Następnie porównujemy elementy z tą samą potęgą  $\lambda$ -y. Stąd:

$$\dot{C}_m^{(0)}(t) = 0 \quad (200)$$

$$i\hbar \dot{C}_m^{(1)}(t) = \sum_n V_{mn}(t) e^{i\omega_{mn}t} C_m^{(0)}(t) \quad (201)$$

itd.

Założmy, że w chwili  $t = 0$  układ jest w stanie  $|k\rangle$ , czyli:

$$C_m^{(0)}(t = 0) = \delta_{mk} \quad (202)$$

Równanie (201):

$$\dot{C}_m^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \sum_n V_{mn}(t) e^{i\omega_{mn}t} C_m^{(0)}(t) \quad (203)$$

ma następujące rozwiązanie:

$$C_m^{(1)}(t) - C_m^{(0)}(0) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' \sum_n V_{mn}(t') e^{i\omega_{mn}t'} C_m^{(0)}(t') \quad (204)$$

$$C_m^{(1)}(t) = \delta_{mk} + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' \sum_n V_{mn}(t') e^{i\omega_{mn}t'} C_m^{(0)}(t') \quad (205)$$

Gdy przechodzimy ze stanu  $m$  do stanu  $k$ , to  $\delta_{mk} = 0$  dla  $m \neq k$ . Zatem:

$$C_m^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' \sum_n V_{mn}(t') e^{i\omega_{mn}t'} C_m^{(0)}(t') \quad (206)$$

Powyższe równanie to równanie całkowe, które rozwiążemy metodą całkową:

$$C_m^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' \sum_n V_{mn}(t') e^{i\omega_{mn}t'} \delta_{nk} \quad (207)$$

$$C_m^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' V_{mk}(t') e^{i\omega_{mk}t'} \quad (208)$$

Niech element macierzowy przejścia ze stanu  $m$  do  $k$  będzie stały w czasie:

$$V_{mk}(t) = V_{mk} \quad (209)$$

Wówczas:

$$C_m^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' V_{mk}(t') e^{i\omega_{mk}t'} = \frac{2\pi}{i\hbar} V_{mk} \cdot \underbrace{\frac{1}{2\pi} \int_0^t dt' e^{i\omega_{mk}t'}}_{\delta(\omega_{mk})} \quad (210)$$

gdzie  $\delta(\omega_{mk})$  to delta Diraca. Zatem:

$$C_m^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' V_{mk}(t') e^{i\omega_{mk}t'} = \frac{2\pi}{i\hbar} V_{mk} \delta(\omega_{mk}) \quad (211)$$

Pamiętamy, że współczynniki  $C_m$  to współczynniki rozwinięcia funkcji falowej  $\psi(\vec{r})$ :

$$\psi(\vec{r}) = \sum_k C_k \phi_k(\vec{r}) \quad (212)$$

Zatem znajdując współczynniki  $C_m$ , znaleźliśmy rozwiązanie równania Schroedingera w postaci formuły (212) na funkcję falową.

#### 8.2.4 Znaczenie współczynników $C_m$

Całkując obustronnie równanie (212):

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r}) &= \sum_k C_k \phi_k(\vec{r}) & / \int d^3r \phi_m^*(\vec{r}) \\ \int d^3r \phi_m^*(\vec{r}) \psi(\vec{r}) &= \sum_k C_k \int d^3r \phi_m^*(\vec{r}) \phi_k(\vec{r}) \end{aligned} \quad (213)$$

$$\int d^3r \phi_m^*(\vec{r}) \psi(\vec{r}) = \sum_k C_k \delta_{mk} \quad (214)$$

$$\int d^3r \phi_m^*(\vec{r}) \psi(\vec{r}) = C_m \quad (215)$$

Zatem  $C_m$  to amplituda prawdopodobieństwa wystąpienia stanu  $\phi_m$  w superpozycji stanów własnych  $\phi$ , czyli  $\psi$ . Natomiast

$$|C_m|^2 \equiv P_m \quad (216)$$

to prawdopodobieństwo wystąpienia tego stanu.

W ten sposób:

$$|C_m^{(1)}(t)|^2 \equiv P_m(t) \quad (217)$$

to prawdopodobieństwo przejścia ze stanu  $k$  do stanu  $m$ .

Zatem:

$$P_m(t) = \left| \frac{2\pi}{i\hbar} V_{mk} \delta(\omega_{mk}) \right|^2 = \frac{4\pi^2}{\hbar^2} |V_{mk}|^2 \delta^2(\omega_{mk}) = \dots \quad (218)$$

Następnie wykonuje się szereg przekształceń (których nie przedstawiono na wykładzie), m.in. zastąpienie:  $\delta \rightarrow \frac{\sin(kx)}{kx}$ , scałkowanie i inne przekształcenia. Uzyskuje się:

$$P_m(t) = \frac{4\pi^2}{\hbar^2} |V_{mk}|^2 \frac{\delta(\omega_{mk})}{2\pi} \lim_{T \rightarrow \infty} T \quad (219)$$

### 8.2.5 Obliczenie współczynników $Q_{pp'}$

Prawdopodobieństwo przejścia ze stanu  $k$  do stanu  $m$  na jednostkę czasu to:

$$\Gamma_{k \rightarrow m} = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{P_m(t)}{T} = \frac{4\pi^2}{\hbar^2} |V_{mk}|^2 \frac{\delta(\omega_{mk})}{2\pi} \quad (220)$$

$$\Gamma_{k \rightarrow m} = \frac{2\pi}{\hbar^2} |V_{mk}|^2 \delta(\omega_{mk}) \quad (221)$$

Pamiętamy, że  $\omega_{mk} \equiv \omega_m - \omega_k = \frac{E_m - E_k}{\hbar}$ , zatem:

$$\Gamma_{k \rightarrow m} = \frac{2\pi}{\hbar^2} |V_{mk}|^2 \delta\left(\frac{E_m - E_k}{\hbar}\right) \quad (222)$$

Z własności delty Diraca:

$$\Gamma_{k \rightarrow m} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{mk}|^2 \delta(E_m - E_k) \quad (223)$$

W końcu miara oddziaływania między elektronami, wprowadzona na poprzednim wykładzie:

$$\frac{1}{\tau} \equiv \sum_{p'} Q_{p'p} \quad (224)$$

to:

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\Omega} \sum_{p'} \Gamma_{p \rightarrow p'} = \frac{1}{\Omega} \sum_{p'} \frac{2\pi}{\hbar} |V_{mk}|^2 \delta(E_m - E_k) \quad (225)$$

”Uciągamy”  $p'$ :

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\Omega} \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int d^3p' \frac{2\pi}{\hbar} |V_{mk}|^2 \delta(E_m - E_k) \quad (226)$$

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{(2\pi)^2 \hbar} \int d^3p' |V_{mk}|^2 \delta(E_m - E_k) \quad (227)$$

Jeżeli założymy, że  $\phi_m$  to fale płaskie, to:

$$E_p = \frac{p^2}{2m} \quad (228)$$

Zatem:

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{(2\pi)^2 \hbar} \int d^3p' |V_{mk}|^2 \delta\left(\frac{p^2 - (p')^2}{2m}\right) \quad (229)$$

W tym miejscu dr Spisak zaleca przeanalizować zadanie z książki ”Wybrane rozdziały MMF- rozwiązane problemy”, w którym zakłada się potencjał w kształcie delty Diraca. Niestety nie znalazłam tego zadania.