

Physical Kinetics

Yury Holubeu *

August 25, 2024

This note is not intended for distribution.

Подробно обсуждается классическая и квантовая кинетика, приводятся приложения к сплошным средам, к плазме и к физике твердого тела, неупорядоченным средам и моделирование. Links below show the [contents of problems](#), the [problems](#) themselves, the contents of a [summary of other topics](#). I used the following [literature](#).

Цели: 1) Тренируюсь 2 недели на задачах и типичных темах, улучшаю запись. Остальное - только если будет проект, связанный с кинетикой.

Contents

1	Preface and main motivation	10
I	— Typical Kinetics in a Nutshell —	12
2	Типичные уравнения и модели кинетики в двух словах	12
2.1	Об общих кинетических уравнениях и методах	12
2.1.1	Обзор общих кинетических параметров и свойства	12
2.1.2	О броуновском движении, ур. Ланжевена, ур. Фоккера-Планка	14
2.1.3	Об уравнении Больцмана, H-теореме, смысле кинетики	16
2.1.4	О процессах первого достижения	17
2.1.5	Малое отклонение от теплового равновесия	18
2.2	О типичной кинетике газов и жидкостей	21
2.2.1	О законах кинетики в гидродинамике и основных свойствах жидкостей (!)	21
2.2.2	Кинетическая теория газов по Ландау	23
2.2.3	О волнах в сплошных средах	23
2.2.4	Типичные явления кинетики газов по Ландау	26
2.2.5	Диффузионное приближение по Ландау	26
2.3	О типичной кинетике в конденсированных средах	26
2.3.1	О кинетике фононов (!?!!?)	26
2.3.2	О кинетике диэлектриков и фононах по Ландау	33
2.3.3	О бесстолкновительной плазме по Ландау	33
2.3.4	О столкновениях в плазме по Ландау	35
2.3.5	О типичной кинетике металлов и электронов по Ландау и Фоминову	35
2.3.6	О кинетике в сверхпроводниках по Ландау (!?!!?)	37
2.4	Суть квантовой кинетики	37
2.4.1	Суть уравнения Линдблада	37
2.4.2	Суть методов функций грин в квантовой кинетике	38
2.4.3	Типичные явления квантовой кинетики	39
2.5	Об других типичных методах кинетики	39
2.5.1	О случайных процессах и математической диффузии	39
2.5.2	О линейном отклике и флуктуационно-диссипативной теореме	40
II	— Special Kinetics in a Nutshell —	42

*yuri.holubev@gmail.com

3	О других задачах	42
3.1	Об отдельных методах кинетики	42
3.1.1	Теория неустойчивостей по Ландау	42
3.1.2	О диаграммной технике для неравновесных систем (???)	42
3.2	О другой кинетике в конденсированных средах	43
3.2.1	О другой кинетике в бесстолкновительной плазме по Ландау	43
3.2.2	О кинетике в ферми- и бозе-жидкостях по Ландау	43
3.2.3	О другой кинетике металлов по Ландау	43
3.3	О других моделях	44
3.3.1	О плазме в магнитном поле по Ландау	44
3.3.2	О кинетике фазовых переходов	45
3.3.3	О фазовой синхронизации в кинетике (???)	45
3.3.4	Об образовании зародышей (????)	46
3.4	О других приложениях (????)	46
3.4.1	О кинетике полимеров (!!??)	46
3.4.2	О кинетике в космологии (???)	46

III Fundamental Kinetic Laws and Equations 47

4	Подход кинетики	47
4.1	Основы построения кинетических теорий и их решений	47
4.1.1	Философия в основе физической кинетики	47
4.1.2	Принцип детального равновесия	47
4.1.3	Уравнение Ланжевена как модель	50
4.1.4	H-теорема Больцмана о неубывании энтропии	53
4.1.5	Случайные силы	56
4.1.6	Корреляторы	56
4.2	Уравнение Больцмана	56
4.2.1	Вывод и свойства уравнения Больцмана	56
4.2.2	уравнение Больцмана в тау-приближении	60
4.2.3	Другое про уравнение Больцмана	62
4.2.4	Интеграл столкновений	63
4.2.5	Метод моментов	66
4.2.6	Цепочка ББКГИ	67
4.2.7	Уравнение Власова	72
4.3	Параметры кинетики (???)	73
4.3.1	Функция распределения	73
4.3.2	Переход к макроскопическим уравнениям	77
4.3.3	Симметрия кинетических коэффициентов и принцип Онсагера	80
4.4	Основы квантовой кинетики	91
4.5	Другие уравнения	91
4.5.1	уравнение баланса энтропии и законы сохранения	91
4.5.2	уравнения для кинетики тепла	92
5	Диффузионное приближение и модели	92
5.1	Диффузия и броуновское движение	93
5.1.1	суть теории диффузии	93
5.1.2	Параметры броуновского движения	93
5.1.3	Уравнение Фоккера—Планка (!!!)	100
5.1.4	Кинетическое уравнение для слабо неоднородного газа	105
5.1.5	Основы описания броуновского движения	110
5.1.6	Случайное блуждание частицы: прыжковая диффузия	110
5.1.7	типичное броуновское движение	111

5.1.8	Различные темы Колоколова (???)	112
5.1.9	Другое про уравнение Фоккера-Планка (?)	113
5.1.10	Соотношение Эйнштейна и формула Смүлоховского из формулы Фоккера-Планка	113
5.1.11	Гидродинамический предел УФП	123
5.1.12	О кинетике макромолекул по Белану (?)	125
5.1.13	Слабо ионизированный газ в электрическом поле	126
5.1.14	Флуктуации в слабо ионизованном неравновесном газе (-)	130
5.1.15	(!!) Рекомбинация и ионизация	130
5.1.16	Другое про диффузию	134
5.2	Гидродинамический предел	134
5.2.1	гидродинамические уравнения: обзор	135
5.2.2	гидродинамические уравнения: вывод	136
5.2.3	Уравнения Навье-Стокса	144
5.2.4	преобразования	145
5.2.5	теплопроводность газа	146
5.2.6	Вязкость газа	148

IV Методы квантовой кинетики 152

6	основы квантовой кинетики	152
6.1	обзор квантовой кинетики	152
6.2	Неравновесная матрица плотности	152
7	уравнения квантовой кинетики	152
7.0.1	Квантовое уравнение Лиувилля	152
7.1	Уравнения Линдблада	152
7.1.1	Основы уравнения Линдблада	152
7.1.2	Уравнения Блоха	160
7.2	Теория линейного отклика Кубо	160
7.3	Запаздывающая, причинная и опережающая функции Грина	160
7.4	рассеяние электронов на примесях	160
7.5	Кинетика ферми-жидкости	160
7.5.1	модель ферми жидкости	161
7.5.2	Условия и скорость нуль-звука	168
8	описание типичных явлений с помощью квантовой кинетики	171
8.1	квантовая кинетика фазовых переходов	171
8.1.1	(+)18 решение уравнения Линдблада двухуровневой системы (????)	171
8.1.2	(+)13 модель Клайды-Леггета	181
8.1.3	(+)17 распад метостабильного состояния	185
8.2	Модельные примеры квантовой кинетики	189
8.2.1	стенка и квантовый газ	189

V Другие кинетические модели сплошных сред 190

8.3	Типичные газовые модели	190
8.3.1	Приближенное решение кинетического уравнения для газов (-)	190
8.3.2	(!!) Диффузия легкого газа в тяжелом	195
8.3.3	(!!) Диффузия тяжелого газа в легком	198
8.3.4	Кинетические явления в газе во внешнем поле (-)	200
8.3.5	Явления в слабо разреженных газах	205
8.3.6	Явления в сильно разреженных газах (-)	214

8.3.7	Динамический вывод кинетического уравнения (-)	226
8.3.8	Кинетическое уравнение с учетом тройных столкновений (-)	230
8.3.9	Вириальное разложение кинетических коэффициентов (-)	235
8.3.10	Флуктуации функции распределения в равновесном газе (-)	237
8.3.11	Флуктуации функции распределения в неравновесном газе (-)	242
8.4	Типичные гидродинамические модели	246
8.4.1	уравнения Навье-Стокса	246
8.4.2	Перенос и перемешивание в случайных потоках	246
8.5	Неравновесная плазма	248
8.5.1	обзор кинетики плазмы	248
8.5.2	метод теории ферми жидкости для плазмы	249
8.5.3	Бесстолкновительная плазма	249
8.5.4	(!!) Самосогласованное поле	250
8.5.5	(!!) Пространственная дисперсия в плазме	253
8.5.6	(+) ¹⁶ Бесстолкновительная плазма	257
8.5.7	диэлектрическая проницаемость и восприимчивость плазмы	257
8.5.8	плазма в графене	262
8.5.9	спектр и затухание	263
8.5.10	(!!) Затухание Ландау	267
8.5.11	типичная модель плазменных колебаний	267
8.5.12	(!!) Столкновения в плазме	272
8.5.13	(!!) Интеграл столкновений Ландау	272
8.5.14	(!!) Передача энергии между электронами и ионами	272
8.5.15	(!!) Длина пробега частиц в плазме	272
8.5.16	(!!) Лоренцева плазма	273
8.5.17	Плазменное эхо - проявление затухания Ландау	273
8.5.18	обзор приложений кинетики плазмы	273
9	Другое о плазме	274
9.0.1	Диэлектрическая проницаемость максвелловской плазмы	274
9.0.2	(!!) Продольные плазменные волны	275
9.0.3	(!!) Ионно-звуковые волны	275
9.0.4	(!!) Релаксация начального возмущения	275
9.0.5	Адиабатический захват электронов	275
9.0.6	Квазинейтральная плазма	275
9.0.7	Гидродинамика двухтемпературной плазмы	276
9.0.8	Солитоны в слабо диспергирующей среде	276
9.0.9	Другое о плазме	276
VI	Кинетика в твердых телах	279
10	Типичные кинетические явления в твердых телах	279
10.1	Электрические кинетические явления в металлах	279
10.1.1	электрические параметры	279
10.1.2	теория Друде	280
10.1.3	закон Ома	280
10.1.4	кинетические уравнения для электронов	281
10.1.5	разные эффекты в двух словах	281
10.1.6	модель рассеяния электронов на случайном потенциале	281
10.1.7	Тензор проводимости и закон Ома $\rho_{\alpha\beta}(\omega, B)$	281
10.1.8	Диффузия и модель Лоренца	285
10.2	Термоэлектрические явления	288
10.2.1	основные уравнения и соотношения для термоэлектричества	288

10.2.2	параметры и свойства	291
10.2.3	кинетические уравнения, их решения и свойства	292
10.2.4	термоэлектрические явления в полупроводниках	297
10.2.5	эффект Зеебека	300
10.2.6	эффект Пельтье	300
10.2.7	эффект Томаса	300
10.3	простейшие электрические явления	301
10.3.1	Magnetoresistance and Hall Effect	301
10.3.2	одномерное рассеяние и отражение	301
10.3.3	Рассеяние электронов с учетом экранировки (???)	304
10.3.4	Эффект Холла в сильных полях	306
10.3.5	Остаточное сопротивление	308
10.4	Фононы по Фоминову	308
10.4.1	ФОНОННЫЙ СПЕКТР	308
10.4.2	ДИЭЛЕКТРИЧЕСКАЯ ПРОНИЦАЕМОСТЬ	312
10.4.3	ТЕОРИЯ УПРУГОСТИ ДЛЯ АКУСТИЧЕСКИХ КОЛЕБАНИЙ	316
10.4.4	АНГАРМОНИЗМ И ТЕПЛОВОЕ РАСШИРЕНИЕ	319
10.4.5	КВАНТОВАНИЕ ФОНОНОВ	320
10.4.6	РАССЕЯНИЕ ЗВУКА НА ПРИМЕСИ	323
10.4.7	КИНЕТИКА ФОНОННОГО ГАЗА	324
10.4.8	ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ФОНОНОВ	327
10.4.9	ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ РЕШЁТКИ ПРИ НИЗКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ ($T < T_D$)	334
10.4.10	РАССЕЯНИЕ ФОНОНОВ НА ПРИМЕСЯХ	336
10.4.11	ВТОРОЙ ЗВУК	338
10.4.12	МЕТОДЫ РАССЕЯНИЯ	340
10.4.13	Электрон-фононное взаимодействие	344
10.4.14	Кинетика других электромагнитных явлений	349
10.5	Кинетика диэлектриков	349
10.5.1	Взаимодействие фононов	349
10.5.2	Кинетическое уравнение для фононов в диэлектрике	349
10.5.3	Теплопроводность диэлектриков при высоких температурах	350
10.5.4	Теплопроводность диэлектриков при низких температурах	350
10.5.5	Теплопроводность и вязкость ферми-жидкости	350
10.6	Кинетика полупроводников	350
10.6.1	модели	350
10.6.2	примеры полупроводников	355
10.6.3	Quantum electron transport	356
10.7	кинетика аморфных систем (??)	364
11	Другие темы кинетики твердого тела	365
11.1	Кинетика сверхпроводников	365
11.2	магнитные жидкости	365
11.2.1	Типичные темы (???)	365
11.2.2	эффект магнитного динамо	366

VII Problems in Kinetics 367

12	Типичные задачи	367
12.0.1	Задачи на уравнение Ланжевена и броуновское движение	367
12.0.2	Задачи на кинетику в рамках случайных процессов	370
12.0.3	Задачи на понимание основных законов кинетики	372
12.0.4	Задачи на кинетику квантовых газов	373

12.0.5	Задачи на кинетику в гидродинамике	373
12.1	Задачи на кинетику твердых тел	375
12.1.1	Задачи на типичную кинетику электронов	375
12.1.2	Задачи кинетики для магнитных явлений	376
12.1.3	Задачи на кинетику в металле и в нормальной ферми-жидкости	381
12.1.4	Задачи на Кинетические коэффициенты	382
12.1.5	Задачи на Эффект Кондо	384
12.1.6	Задачи на Прыжковая проводимость Мотта	384
12.1.7	Задачи на Кулоновская щель	385
12.1.8	Задачи на Кинетика фононов в диэлектрике	385
12.1.9	Задачи на Теплопроводность диэлектрика	385
12.1.10	Задачи на кинетику нормальной и сверхтекучей жидкости	385
12.1.11	Задачи на Звуковые колебания и диссипация	385
12.1.12	Задачи на бесстолкновительную плазму	385
12.1.13	Задачи на Диэлектрическая проницаемость	386
12.1.14	Задачи на Продольные и поперечные колебания	386
12.1.15	Задачи на Макроскопическое квантовое туннелирование	386
12.1.16	Задачи о зародышах	388
12.1.17	Задачи на кинетику нейтронов	389
12.1.18	Задачи на Элементы диаграммной техники Келдыша для неравновесных систем	392
12.2	Задачи на кинетику других систем	393
12.2.1	Задачи про синхронизацию	393
12.2.2	Задачи про кинетику полимеров	396

VIII Other Topics and Special Methods 403

13	Кинетика фазовых переходов и образования зародышей (??)	403
13.1	Основы фазовых переходов	403
13.2	Кинетика фазовых переходов первого рода, Образование зародышей	403
13.2.1	Критический размер зародыша	403
13.2.2	Скорость роста зародыша	403
13.3	Другое о фазовых переходах	406
13.3.1	Кинетика фазовых переходов первого рода, Стадия коалесценции	406
13.3.2	(!!) Релаксация параметра порядка вблизи точки фазового перехода второго рода	406
13.3.3	Динамическая масштабная инвариантность	406
13.3.4	Релаксация в жидком гелии вблизи А-точки	406
13.3.5	Метастабильные состояния и зародыши новой фазы	406
13.3.6	Классическая и квантовая кинетика образования зародышей	406
13.3.7	примеры фазовых переходов	406
13.3.8	Слабая локализация (????)	406
13.4	Теория протекания	408
14	Exact solutions for the statistics of extrema of some random 1D landscapes, Application to the equilibrium and the dynamics of the toy model by Pierre Le Doussal Cécile Monthus	408
14.1	Introduction	409
14.1.1	Overview	409
14.1.2	Definition and properties of the toy model	409
14.1.3	Applications of the toy model	411
14.1.4	Goal and Results	413
14.2	Renormalization procedure for an arbitrary 1D landscape	415

14.2.1	Initial landscape	415
14.2.2	Construction of the renormalized landscape	416
14.2.3	Markovian landscapes and Block-product measures	418
14.3	Explicit Solutions for a class of models	419
14.3.1	Soluble models	419
14.3.2	Properties of the blocks for a Schrodinger measure	420
14.3.3	Explicit solution via a path-integral approach	420
14.3.4	Explicit solution from the RSRG equations	421
14.4	Statistics of extrema in the toy model	422
14.4.1	Blocks of the toy model in terms of Airy functions	423
14.4.2	Normalization of the full Measure for the renormalized landscape	424
14.4.3	Alternative expression of the full measure using barriers	424
14.4.4	Full measure using barriers for free boundary conditions	425
14.4.5	Full measure using barriers on the infinite line	425
14.5	Boltzmann equilibrium at low temperatures of the toy model	426
14.5.1	Distribution of the position at zero temperature	426
14.5.2	Moments of the position at zero temperature	427
14.5.3	Joint distribution of position and energy at zero temperature	428
14.5.4	Samples presenting nearly degenerate minima and thermal fluctuations at low temperature	429
14.6	Non-equilibrium dynamics of the toy model	431
14.6.1	Distribution over samples of the equilibration time	433
14.6.2	Rare configurations with anomalously large equilibration times	435
14.6.3	Probability density of minima in the renormalized landscape	436
14.7	Diffusion front	438
14.8	Results for stationary landscapes	440
14.8.1	Explicit expressions for the blocks	440
14.8.2	Normalization of the full measure	441
14.8.3	Example: Brownian landscape with drift	441
14.8.4	Some further examples	442
14.8.5	An example with a long-ranged constraint: Positive Brownian landscape	443
14.9	Appendixes	444
14.10	Explicit construction of the measure for renormalized landscape	444
14.10.1	Initial landscape	444
14.10.2	Renormalized landscape	445
14.10.3	Block product measures	446
14.11	Renormalization procedure for periodic landscape	446
14.12	Derivation of the explicit solutions for a Schrodinger measure	447
14.12.1	Solution by a path-integral method	447
14.12.2	Solution from the RSRG equations : Factorized Ansatz and Liouville equation	449
14.13	Configurations presenting two nearly degenerate minima	450
14.13.1	Distribution of the absolute minimum for the toy model on an arbitrary interval	450
14.13.2	Probability to have two nearly degenerate minima	451
14.14	Study of two valleys configurations in the toy model	452
14.15	Useful properties of Airy functions	452
References		453
15 О других моделях и приложениях		454
15.1	Другие модели диффузии	454
15.1.1	Амбиполярная диффузия	454
15.1.2	Подвижность ионов в растворах сильных электролитов	455
15.2	Reaction-Diffusion	455
15.2.1	Физическое описание	455

15.2.2 Моделирование	455
15.3 Фазовая синхронизация в кинетике	455
15.3.1 Описание синхронизации	455
15.3.2 Другое о синхронизации (??)	463
15.4 Теория перколяций (!?!?)	464
15.5 О кинетике и флуктуационных эффектах в макрофизике	464
15.6 О кинетике полимеров (??)	464
15.6.1 Основы описания полимеров	464
15.6.2 Модель свободно-сочлененной цепи	464
15.6.3 Модель Пауза	465
15.6.4 On Polymers and Ideal Random Chains by Kleinert	470
15.7 К аэродинамике	471
15.7.1 Некоторые темы	471
15.7.2 (+)y1 моделирование погоды	471
15.8 К ядерным процессам	471
15.8.1 Замедление нейтронов	471
15.9 Кинетика в космологии (!?!?)	472
15.9.1 Основные уравнения	472
15.10 К математике (??)	472
15.10.1 связь со случайными процессами	472
15.11 финансы	472
15.11.1 применение кинетики в игре на бирже	472

IX Appendix 473

A Preface and main motivation	473
A.1 Еще мотивация	473
A.1.1 Мотивация к разделам кинетики	473
A.2 Мышление профессионалов в кинетике	473
A.2.1 Способы догадаться до всех главных идей	473
A.2.2 Необходимые темы для кинетика	473
A.2.3 Дополнительные темы для кинетика	474
A.2.4 способы изучения кинетики	474
A.3 Литература по кинетике	475
A.3.1 Основная	475
A.3.2 Дополнительная	475
A.4 Общий обзор кинетики	478
A.4.1 Популярное введение в кинетику	478
A.4.2 Обзор кинетики как науки	478
A.4.3 Обзор различных кинетических явлений	478
A.4.4 О приложениях и наиболее прикладные темы	478
A.4.5 Общий обзор	478
A.4.6 Связь кинетики с другими разделами физики	479
A.4.7 Связь кинетики с математическими и нефизическими науками	480
A.4.8 Короткий исторический обзор	480
A.5 Описание записи	480
A.5.1 описание глав и разделов	480
A.5.2 обозначения и константы	480
A.6 Кинетические головоломки	480
A.6.1 идейные вопросы кинетики	481
A.6.2 модельные кинетические головоломки	481
A.6.3 интересные явления	481

В Математика для кинетики	481
В.1 Случайные процессы	481
В.1.1 основы математической статистики	483
В.1.2 теория меры	484
В.1.3 Марковские цепи	484
В.1.4 Математическая физика	484
В.1.5 Пропагатор	484
В.1.6 Уравнения Эйнштейна-Колмогорова	484
В.1.7 Численные методы	484
В.1.8 элементы математического анализа	488
В.2 Другие темы	488
В.2.1 Континуальный интеграл для кинетики (???)	488
С Физика для кинетики	488
С.1 статистическая физика	488
С.2 Классическая механика	488
С.2.1 основы механики	489
С.2.2 механическая теория столкновений	491
С.3 квантовая механика	491
С.4 необходимая электродинамика	492
С.5 основы гидродинамики	492
D Моделирование кинетических явлений	493
D.1 Примеры моделирования	493
D.1.1 моделирование диффузии	493
D.1.2 моделирование геометрического хаоса (???)	493
References	494

1 Preface and main motivation



Let's discuss some minimum knowledge and motivation that would be good to understand for studying physical kinetics.

Фундаментальность и необычности кинетических явлений

(потом раскрою)

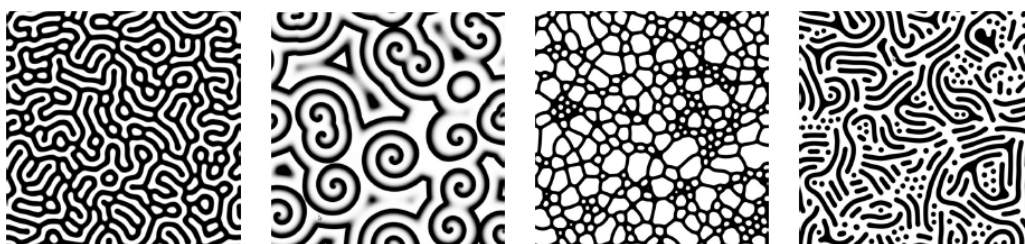
Множество приложений

Укажем приложения

(потом раскрою)

Результаты

Обсудим, что полезного и важного человечество получило, поняв этот предмет.



(доучу когда-то ур р дифф, напишу потом)

Идейные головоломки для мотивации

Как вообще описывать квантовые неравновесные процессы? (распишу, на самом деле, для ответа на этот вопросы мы и открываем именно кинетику)

Образование пузырьков при фазовом переходе

(основа в записи про фазовые переходы, тут применяем эту теорию)

Как закипает вода в чайнике? (там большая теория какая-то, потом додумаю, что-то тут не тривиально все... там со звуком - типичный вопрос, почему он то есть, то нет, то потом снова есть в этом процессе? большой пока вопрос для меня.)

Технические головоломки для мотивации

Какая сила воздействия ферми частиц на стенку? Вот допустим есть ферми-газ, в нем движется стенка. С какой силой газ будет на нее воздействовать? (!!?!?!?!?!?)
(честно, вообще не готов к этой задаче.)
(коротко напишу суть)

Part I

—— Typical Kinetics in a Nutshell ——

2 Типичные уравнения и модели кинетики в двух словах

2.1 Об общих кинетических уравнениях и методах

2.1.1 Обзор общих кинетических параметров и свойства

(тут общезнаменит!!! термач, все такое)

диффузия в термодинамике

ключевые параметры

$f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ - **функция распределения** Определяется как...

??? Функция распределения используется для получения любых на практике нужных величин, за счет интегрирования по ней, умноженной на то, что-то, что связано с данной величиной.

Очень часто домножение происходит на скорость и интегрирование - по импульсам.
(???)

n - **плотность частиц** Плотность частиц в пространстве скоростей задается

$$\tilde{n}(\mathbf{v}, t) = \int d^3r f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$$

$\sigma(\vartheta)$ - **сечение рассеяния** (??!!) По определению сечение рассеяния это:

.....

Вспомним Борновское приближение для дифференциального сечения рассеяния:

$$\sigma(\vartheta) = \left(\frac{m^*}{2\pi\hbar^2} \right)^2 \left| \hat{U}(k - k') \right|^2$$

так что теперь можем записать

$$\frac{1}{\tau(\varepsilon_F)} = 2\pi n_{\text{imp}} v_F \int_0^\pi d\vartheta \sigma_F(\vartheta) (1 - \cos \vartheta) \sin \vartheta$$

где $v_F = \hbar k_F / m^*$ is the Fermi velocity.

связано с ...??

$\sigma(\vartheta)_{tr}$ - **транспортное сечение рассеяния** (??!!) транспортное сечение рассеяния
- по сути полное сечение в направлении движения частиц (?):

$$\sigma(\vartheta)_{tr} = \int_0^\pi d\Omega (1 - \cos \vartheta) \frac{d\sigma}{d\Omega} \vartheta$$

здесь за счет $\cos \vartheta$ получается проекция на прямое направление.

связано с ???чем???

используется в??

ℓ - длина свободного пробега Длина свободного пробега определяется как $\ell = v_F \tau$.

\vec{J}_Q - поток тепла

$$\vec{J}_Q = \int \vec{v}(\varepsilon - \mu) f \cdot \frac{d^3 \vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} g$$

где можно писать просто $d\Gamma \equiv \frac{d^3 \vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} g$, потому что g - кратность вырождения - может быть различной для различных задач.

гидродинамические и диффузионные параметры

Коэффициент самодиффузии D ???

Формула Кубо:???

Коэффициент самодиффузии D выражается через интеграл корреляционной функции проекции скорости (импульса) частицы:

$$D = \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} m_1^{-2} \int_0^\infty e^{-\varepsilon \tau} \langle p_1^x(0) p_1^x(\tau) \rangle d\tau$$

где p_i - импульс частицы (номер 1), верхний индекс x означает x -компоненту вектора, τ - время. Угловые скобки означают усреднение по равновесному распределению Гиббса.

В классическом случае формула упрощается:

$$D = \int_0^\infty \langle v_1^x(0) v_1^x(\tau) \rangle d\tau$$

Коэффициент сдвиговой вязкости ф-ла кубо:???

$$\eta = \lim_{\varepsilon \rightarrow \downarrow 0} \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{1}{V k_B T} \int_0^\infty e^{-\varepsilon \tau} \langle \pi^{xy}(0) \pi^{xy}(\tau) \rangle d\tau$$

где η -коэффициент сдвиговой вязкости, π^{xy} -компоненты тензора потока полного импульса.

Коэффициент объёмной вязкости???

$$\zeta = \lim_{\varepsilon \rightarrow \pm 0} \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{1}{V k_B T} \int_0^\infty e^{-\varepsilon \tau} \langle (1 - \mathcal{P}) \pi^{xx}(0) \pi^{xx}(\tau) \rangle d\tau$$

где ζ - коэффициент объёмной вязкости, оператор

$$\mathcal{P} \pi^{xx} = \langle \pi^{xx} \rangle + (H - \langle H \rangle) \frac{\partial \langle \pi^{xx} \rangle}{\partial \langle H \rangle} + (N - \langle N \rangle) \frac{\partial \langle \pi^{xx} \rangle}{\partial \langle N \rangle}$$

H - гамильтониан системы, N - полное число частиц.

Тензор плотности потоков импульса:

$$\Pi_{ik} = p \delta_{ik} + \rho v_i v_k - \sigma'_{ik} = -\sigma_{ik} + \rho v_i v_k$$

$$\sigma_{ik} = -p \delta_{ik} + \sigma'_{ik}$$

физический смысл следующего.

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int \rho v_i dV &= - \int \frac{\partial \Pi_{ik}}{\partial x_k} dV \\ \frac{\partial}{\partial t} \int \rho v_i dV &= - \oint \Pi_{ik} df_k \end{aligned}$$

Таким образом, Π_{ik} есть i -я компонента количества импульса, протекающего в единицу времени через единицу поверхности, перпендикулярную к оси x_k .

Тензор $\hat{\Pi}_{ik}$ называют тензором плотности потока импульса.

Поток энергии, являющейся скалярной величиной, определяется вектором;

поток же импульса, который сам есть вектор, определяется тензором второго ранга.

Тензор напряжений:

$$\sigma_{ik} = -p\delta_{ik} + \sigma'_{ik}$$

$$\sigma'_{ik} = \eta \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_k} + \frac{\partial v_k}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ik} \frac{\partial v_l}{\partial x_l} \right) + \zeta \delta_{ik} \frac{\partial v_l}{\partial x_l}$$

Процессы внутреннего трения в жидкости возникают только в тех случаях, когда различные участки жидкости движутся с различной скоростью, так что имеет место движение частей жидкости друг относительно друга.

Поэтому вязкий тензор должно зависеть от производных от скорости по координатам.

Если скорость жидкости равна нулю, то вязкость не проявляется.

Если вся жидкость как целое совершает равномерное вращение, вязкость не проявляется.

При равномерном вращении с угловой скоростью Ω скорость \mathbf{v} равна векторному произведению $[\Omega \mathbf{r}]$.

Линейными комбинациями производных $\partial v_i / \partial x_k$, обращающимися в нуль при $\mathbf{v} = [\Omega \mathbf{r}]$, являются суммы

$$\frac{\partial v_i}{\partial x_k} + \frac{\partial v_k}{\partial x_i}$$

Поэтому σ'_{ik} должно содержать именно эти симметричные комбинации производных $\partial v_i / \partial x_k$.

$$\sigma'_{ik} = \eta \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_k} + \frac{\partial v_k}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ik} \frac{\partial v_l}{\partial x_l} \right) + \zeta \delta_{ik} \frac{\partial v_l}{\partial x_l}$$

где $\eta > 0, \zeta > 0$.

$$\begin{aligned} \Pi_{ik} &= p\delta_{ik} + \rho v_i v_k - \sigma'_{ik} = -\sigma_{ik} + \rho v_i v_k \\ \sigma_{ik} &= -p\delta_{ik} + \sigma'_{ik} \end{aligned}$$

Тензор вязких напряжений

$$\sigma'_{\alpha\beta} = \eta \left(\frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} - \frac{2}{3} \delta_{\alpha\beta} \operatorname{div} \mathbf{u} \right) + \zeta \delta_{\alpha\beta} \operatorname{div} \mathbf{u}$$

2.1.2 О броуновском движении, ур. Ланжевена, ур. Фоккера-Планка

Параметры броуновского движения

(на задачах их и ищем почти всегда. укажу, как их искать.)

Время корреляции

Коэффициент диффузии

Об уравнении Ланжевена

Основные формулы Уравнение Ланжевена имеет вид:

$$\frac{d\vec{r}(t)}{dt} = \mu \vec{f}(\vec{r}, t) + \vec{\xi}(t)$$

$$\langle \xi_\alpha(t) \rangle = 0, \quad \langle \xi_\alpha(t_1) \xi_\beta(t_2) \rangle = 2D \delta_{\alpha\beta} \delta(t_1 - t_2)$$

$$D := \frac{1}{3} \int_0^{+\infty} dt \langle \vec{v}(0) \vec{v}(t) \rangle \quad (\text{ф. Грина-Кубо})$$

$$C(\tau) := \langle \vec{v}(0) \vec{v}(\tau) \rangle \quad (\text{автокорр. функция скорости})$$

$$\tau_c := \frac{\int_0^{+\infty} d\tau C(\tau)}{C(0)} \quad (\text{Время корреляции скорости})$$

$$\langle r^2(t) \rangle = 6Dt, \quad \langle \Delta r^2 \rangle = 6D\Delta t. \quad (\text{dim}=3)$$

Допустим у нас процесс $\frac{d\vec{r}(t)}{dt} = \mu \vec{f}(\vec{r}(t), t) + \vec{\xi}(t)$, где $\frac{1}{3} \int_0^{+\infty} dt \langle \vec{\xi}(0) \vec{\xi}(t) \rangle = D$. Гауссов белый шум - это когда $\xi_\alpha(t)$ статистически независимы и являются кусочно-постоянными случайными функциями, для которых ширина каждой ступеньки равна τ_c , а случайные высоты ступенек независимы друг от друга и одинаково распределены с нормальной плотностью вероятности. Дисперсия их определена как

$$\sigma_\xi^2 := 2D/\tau_c.$$

Также $\langle \xi_\alpha(0) \xi_\beta(t) \rangle = 2D \delta_{\alpha\beta} \delta(t)$. Тогда автокорреляционная функция

$$C(t) = \sigma_\xi^2 \left(1 - \frac{|t|}{\tau_c} \right) I(|t| < \tau_c)$$

О поиске плотности распределения

$$n(\vec{r}; t) := \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} e^{i\vec{q}\vec{r}} \langle e^{-i\vec{q}\vec{r}(t)} \rangle$$

(??? почему так определяем??)

Всегда при вычислениях мы дробим интеграл на сумму, а дальше экспоненту от суммы представляем в виде произведений. Например, как $\vec{r}(t) = \vec{r}(0) + \sum_{i=1}^{t/\Delta t} \Delta \vec{r}_i$, или как $\int_0^t \xi(t') dt' = \sum_{l=0}^{t/\tau_c} \xi(l\tau_c)$.

Типично приближаем:

$$\langle e^{-i\vec{q}\vec{r}(t)} \rangle \approx e^{-i\vec{q}\vec{r}(0) - q^2 Dt}$$

где $\langle r^2(t) \rangle = 6Dt$ и $\langle \Delta r^2 \rangle = 6D\Delta t$. Часто вместо q тут стоит какая-то комбинация переменных, тогда она возводится в квадрат. Это следует из прямого интегрирования (??? допишу потом!):

$$\begin{aligned} \langle e^{-i\vec{q}\vec{r}(t)} \rangle &= \left\langle e^{-i\vec{q}(\vec{r}(0) + \sum_{i=1}^{t/\Delta t} \Delta \vec{r}_i)} \right\rangle = e^{-i\vec{q}\vec{r}(0)} \langle e^{-i\vec{q}\Delta \vec{r}} \rangle^{t/\Delta t} = \\ &= e^{-i\vec{q}\vec{r}(0)} \left(1 - \frac{q^2 \langle (\Delta r)^2 \rangle}{6} \right)^{\frac{t}{\Delta t}} = e^{-i\vec{q}\vec{r}(0)} (1 - q^2 D \Delta t)^{\frac{t}{\Delta t}} \approx e^{-i\vec{q}\vec{r}(0) - q^2 Dt} \end{aligned}$$

(?? что с размерностью?? пока забиваю, думаю, все везде в 3д и все.)

Примеры решений уравнений Ланжевена в двух словах

Если есть постоянная сила, то

$$\langle \vec{v}(t) \rangle = \mu \vec{f}, \quad \mu - \text{подвижность}$$

среднее находится модификацией известной формулы переходом в другую систему отсчета и обратно:

$$n(\vec{r}; t) = \frac{1}{(4\pi Dt)^{3/2}} e^{-\frac{(\vec{r} - \vec{r}(0) - \mu \vec{f}t)^2}{4Dt}}$$

Простейшее уравнение:

$$\frac{dx(t)}{dt} = -\mu k x(t) + \xi(t)$$

где $\xi(t)$ такое, что $\langle \xi(t_1) \xi(t_2) \rangle = 2D\delta(t_1 - t_2)$. Его решение $x(t) = x(0)e^{-\mu kt} + e^{-\mu kt} \int_0^t dt' e^{\mu kt'} \xi(t')$ называется процессом Орнштейна-Уленбека. В строчку получаем, $\langle x(t) \rangle = x(0)e^{-\mu kt}$, $\langle x^2(t) \rangle = x^2(0)e^{-2\mu kt} + e^{-2\mu kt} \int_0^t \int_0^t dt_1 dt_2 e^{\mu k(t_1+t_2)} \langle \xi(t_1) \xi(t_2) \rangle = x^2(0)e^{-2\mu kt} + \frac{D}{\mu k} (1 - e^{-2\mu kt})$.

Об уравнении Фоккера-Планка

Уравнение Фоккера - Планка в одномерном случае В одномерном случае УФП приобретает вид:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}(A(x, t)f(x, t)) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{B(x, t)}{2} \frac{\partial}{\partial x} f(x, t) \right)$$

В этой модели. f - B - это A - это
.... (описываю параметры... а хз, B, A)

О гидродинамическом пределе уравнения Фоккера Планка (!!! оно мб очень нужное!!!! по Колоколову пишу)

2.1.3 Об уравнении Больцмана, Н-теореме, смысле кинетики

Об уравнении Больцмана

Суть уравнения Больцмана

$$\begin{aligned} \hat{L}f &= \frac{\partial f}{\partial t} + v_i \frac{\partial f}{\partial x_i} + \frac{F_i}{m} \frac{\partial f}{\partial v_i} = \hat{I}_{st}f \\ \hat{I}_{st} &= \iiint W(1, 2; 1', 2') [f(1')f(2') - f(1)f(2)] dv_2 dv'_1 dv'_2 \\ \frac{\partial \langle na \rangle}{\partial t} + \frac{\partial \langle nv_i a \rangle}{\partial x_i} &= n \langle \hat{L} \rangle + \int a \hat{I}_{st} f d\mathbf{v} \\ \frac{d}{dt} &= \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{V} \cdot \nabla = \frac{\partial}{\partial t} + V_i \frac{\partial}{\partial x_i} \\ f_0 &= n \left(\frac{m}{2\pi T} \right)^{3/2} \exp \left[-\frac{m(\mathbf{v} - \mathbf{V})^2}{2T} \right], \\ \frac{n \langle u^2 \rangle_0}{2} &= \frac{3}{2} T, \quad \Pi_{ik}^0 = nT \delta_{ik}. \end{aligned}$$

Линеаризованное уравнение Больцмана: $f = f_0(1 + \chi)$,

$$\hat{L} \ln f_0 = \iint [\chi(1') + \chi(2') - \chi(1) - \chi(2)] f_0(2) |\mathbf{v}_{12}| d\sigma d\mathbf{v}_2$$

$$\hat{L} \ln f_0 = \frac{m}{T} \left[u_i u_k - \delta_{ik} \frac{u^2}{3} \right] \frac{\partial V_i}{\partial x_k} + \left[\frac{mu^2}{2} - \frac{5}{2} \right] \frac{u_i}{T} \frac{\partial T}{\partial x_i}$$

О тау-приближении

Тау-приближение для однокомпонентного газа:

$$\hat{I}_{st} f = -\frac{f - f_0}{\tau}, \quad f = f_0 - \tau \hat{L} f_0,$$

$$\Pi_{ik} = nT \delta_{ik} \delta_{ik} - \eta \left[\frac{\partial V_i}{\partial x_k} + \frac{\partial V_k}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ik} \frac{\partial V_i}{\partial x_k} \right],$$

$$\mathbf{Q} = -\kappa \nabla T, \quad \eta = nT\tau, \quad \kappa = \frac{5}{2} \frac{nT\tau}{m}.$$

Тау-приближение для легких частиц в тяжелом газе:

$$\tau^{-1} = nv\sigma_{tr} = nv\pi \int_0^\pi (1 - \cos \vartheta) \sigma(\vartheta) d\vartheta$$

Гидродинамическая форма законов сохранения

$$\frac{dn}{dt} = -\operatorname{div} \mathbf{V}$$

$$\frac{dV_i}{dt} = -\frac{1}{mn} \frac{\partial \Pi_{ik}}{\partial x_k} + \frac{F_i}{m}$$

$$\frac{d}{dt} \frac{mn u^2}{2} = -\operatorname{div} \mathbf{Q} - \Pi_{ik} \frac{\partial V_i}{\partial x_k}$$

границы применимости уравнения Больцмана тогда, когда с соотношением неопределенностей все хорошо, нет квантовых явлений.

а если квантуется волновая функция, то там квантовая кинетика.

когда силы короткодействующие.

например, в плазме оно не выполняется, потому что там кулоновские силы и как таковых столкновений не происходит.

переход к уравнению Навье-Стокса ?

1. Функция распределения
2. Принцип детального равновесия
3. Кинетическое уравнение Больцмана
4. Н-теорема
5. Переход к макроскопическим уравнениям

2.1.4 О процессах первого достижения

По Белану (???)

Время первого достижения для процесса Винера (???) плотность вероятности координаты броуновской частицы при наличии стенки в начале координат:

$$p_{\text{surv}}(t) = \int_0^{+\infty} dx n(x; t)$$

$$\partial_t n(x; t) = D \partial_x^2 n(x; t)$$

$$n(x; 0) = \delta(x - x_0), \quad n(0; t) = 0.$$

$$p_{\text{surv}}(t) = \int_0^{+\infty} n(x, t) dx = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{L/2\sqrt{Dt}} d\xi e^{-\xi^2} = \text{erf}\left(\frac{x_0}{2\sqrt{Dt}}\right).$$

$$P(T) = \frac{x_0}{2\sqrt{\pi D T^{3/2}}} \exp\left(-\frac{x_0^2}{4DT}\right) \quad (\text{распр. Леви-Смирнова})$$

Оно имеет степенной хвост $\propto T^{-3/2}$, и по этой причине математическое ожидание времени первого достижения бесконечно велико. Для оценки типичного времени первого достижения можно использовать вершину распределения $P(T) : T_m = x_0^2/6D$.

Метод функции Грина Рассмотрим броуновское движение на неограниченной оси x . Функция Грина $G(x; t|x_0) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \left[\exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{4Dt}\right) \right]$ описывает эволюцию функции распределения координаты частицы, изначально помещенной в точку $x = x_0$. Заметим, что если частица оказалась в начале координат в момент t , то историю ее предшествующей жизни можно разделить на два этапа: первое посещение точки $x = 0$ в некоторый промежуточный момент времени $\tau \in (0, t]$ и возвращение в $x = 0$ спустя время $t - \tau$. С учетом закона полной вероятности сказанное позволяет записать

$$G(0; t|x_0) = \int_0^t d\tau P(\tau) G(0; t - \tau|0)$$

где $P(T)$ это введенная нами выше функция распределения времени первого посещения частицей начала координат. Благодаря тому, что интеграл в правой части этого уравнения представляет собой свертку, после взятия преобразования Лапласа от обеих частей мы находим

$$\tilde{G}(0; s|x_0) = \tilde{P}(s) \tilde{G}(0; s|0), \quad \text{где } \tilde{G}(0; s|x_0) = \int_0^\infty dt e^{-st} G(0; t|x_0) = \frac{1}{\sqrt{sD}} \exp\left(-\sqrt{\frac{s}{D}} |x_0|\right) \text{ и}$$

$$\tilde{P}(s) = \int_0^\infty dt e^{-sT} P(T), \text{ и, следовательно,}$$

$$\tilde{P}(s) = \frac{\tilde{G}(0; s|x_0)}{\tilde{G}(0; s|0)} = \exp\left(-\sqrt{\frac{s}{D}} |x_0|\right),$$

2.1.5 Малое отклонение от теплового равновесия

Н-теорема и тепловое равновесие

$$Z = \prod_i \frac{(n_i + g - 1)!}{(g - 1)! (n_i)!} \approx \prod_i \frac{(n_i + g)!}{(g)! (n_i)!},$$

$$\frac{dS}{dt} = \sum_i \ln \frac{(n_i + g)}{n_i} \frac{dn_i}{dt} = \sum_{\mathbf{k}} \ln \frac{(n_{\mathbf{k}} + 1)}{n_{\mathbf{k}}} \frac{dn_{\mathbf{k}}}{dt} \quad S = \ln Z$$

Покажем теперь, используя кинетическое уравнение, что энтропия не убывает. (??? в чем идея????)

$$\begin{aligned} \frac{dS}{dt} &= \frac{\pi}{V} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} |V_{\mathbf{k}; \mathbf{k}-\mathbf{q}, \mathbf{q}}|^2 \delta(\omega_{\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{q}} - \omega_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}) \frac{1}{n_{\mathbf{k}}} [n_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} n_{\mathbf{q}} - n_{\mathbf{k}} (n_{\mathbf{q}} + n_{\mathbf{k}-\mathbf{q}})] - \\ &\quad - \frac{2\pi}{V} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} |V_{\mathbf{k}+\mathbf{q}; \mathbf{k}, \mathbf{q}}|^2 \delta(\omega_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \omega_{\mathbf{q}} - \omega_{\mathbf{k}}) \frac{1}{n_{\mathbf{k}}} [n_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{q}} - n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} (n_{\mathbf{q}} + n_{\mathbf{k}})] = \\ &= \frac{\pi}{V} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} |V_{\mathbf{k}; \mathbf{q}, \mathbf{k}-\mathbf{q}}|^2 \delta(\omega_{\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{q}} - \omega_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}) \frac{[n_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} n_{\mathbf{q}} - n_{\mathbf{k}} (n_{\mathbf{q}} + n_{\mathbf{k}-\mathbf{q}})]^2}{n_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} n_{\mathbf{q}}} \geq 0 \end{aligned}$$

Найдем равновесное число волн при температуре T из условия максимальности энтропии S . При трехволновом взаимодействии полная энергия $E = \sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} = \text{Const}$, поскольку она сохраняется в каждом элементарном акте взаимодействия. Условие максимальности энтропии при постоянном значении энергии имеет вид

$$\frac{\delta(S - \lambda E)}{\delta n_{\mathbf{k}}} = \frac{\delta}{\delta n_{\mathbf{k}}} \sum_{\mathbf{k}} \left(\ln \frac{(n_{\mathbf{k}} + 1)}{n_{\mathbf{k}}} - \lambda \omega_{\mathbf{k}} \right) \delta n_{\mathbf{k}} = 0,$$

откуда

$$n_{\mathbf{k}}^0 = \frac{1}{e^{\omega_{\mathbf{k}}/T} - 1}$$

где мы положили $\lambda = T$, чтобы совпадало с равновесным бозераспределением при температуре T . В пределе $T \gg \omega_{\mathbf{k}}$ получаем

$$n_{\mathbf{k}}^0 = \frac{T}{\omega_{\mathbf{k}}}$$

- распределение Джинса.

Затухание звука

$$\frac{dn_{\mathbf{k}}}{dt} = -\frac{2\pi}{V} \sum_{\mathbf{q}} |V_{\mathbf{k}+\mathbf{q}; \mathbf{k}, \mathbf{q}}|^2 \delta(\omega_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \omega_{\mathbf{q}} - \omega_{\mathbf{k}}) [n_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{q}} - n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} (n_{\mathbf{q}} + n_{\mathbf{k}})]$$

Для $n_{\mathbf{k}} \gg n_{\mathbf{q}}^0 = T/\omega_{\mathbf{q}}$, $n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^0 = T/\omega_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}$ кинетическое уравнение имеет решение вида $n_{\mathbf{k}}(t) = n_{\mathbf{k}}(0) \exp[-2\gamma_{\mathbf{k}} t]$.

$$\gamma_{\mathbf{k}} = \pi \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} |V_{\mathbf{k}+\mathbf{q}; \mathbf{k}, \mathbf{q}}|^2 \frac{T \omega_{\mathbf{k}}}{\omega_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \omega_{\mathbf{q}}} \delta(\omega_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \omega_{\mathbf{q}} - \omega_{\mathbf{k}}),$$

$$V_{\mathbf{k}+\mathbf{q}; \mathbf{k}, \mathbf{q}} = \sqrt{\frac{c_s}{8\rho_0}} |\mathbf{k} + \mathbf{q}| k q (3g + \cos \theta_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} + \cos \theta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \mathbf{q}} + \cos \theta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \mathbf{k}}).$$

$$|V_{\mathbf{k}+\mathbf{q}; \mathbf{k}, \mathbf{q}}|^2 = \frac{c_s}{8\rho_0} 9(g+1)^2 k q (k+q).$$

$$\gamma_{\mathbf{k}} = \frac{9(g+1)^2 T k}{32\pi \rho_0 c_s} \int_0^{T/c_s} q(k+q) dq = \frac{3(g+1)^2 T^4 k}{32\pi \rho_0 c_s^4}$$

Потоки и колмогоровские спектры

Стационарное решение кинетического уравнения

кинетическое уравнение для трехволнового взаимодействия в симметричном виде:

$$\frac{\partial}{\partial t} n_{\mathbf{k}} = I[n_{\mathbf{k}}] \equiv \pi \int \frac{d\mathbf{k}_1 d\mathbf{k}_2}{(2\pi)^d} (R_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} - R_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k} \mathbf{k}_2} - R_{\mathbf{k}_2, \mathbf{k} \mathbf{k}_1}),$$

(????)

$$I[n_{\mathbf{k}}] = \int \frac{d\mathbf{k}_1 d\mathbf{k}_2}{(2\pi)^d} R_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} (1 - \lambda_1^\gamma - \lambda_2^\gamma) \quad (\text{Построение Каца – Конторовича})$$

где $\gamma = 2d + 2m - 2b - a$, $\lambda_2 = k/k_2$. Видно, что стационарное решение кинетического уравнения возможно, если

$$(1 - \lambda_1^\gamma - \lambda_2^\gamma) = 1 - \left(\frac{\omega}{\omega_1}\right)^\nu - \left(\frac{\omega}{\omega_2}\right)^\nu = 0,$$

где

$$\lambda_1 = \frac{k}{k_1} = \left(\frac{\omega}{\omega_1}\right)^{1/a}, \quad \lambda_2 = \frac{k}{k_2} = \left(\frac{\omega}{\omega_2}\right)^{1/a}, \quad \nu = \frac{2(d + m - b) - a}{a}$$

$$\frac{\partial n(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = D\Delta n(\mathbf{r}, t) + 4\pi q\delta(\mathbf{r})$$

Это уравнение имеет стационарное решение $n(\mathbf{r}) = q/(Dr)$. Плотность потока частиц $\mathbf{j} = -D\nabla n$, тогда $\text{div } \mathbf{j} = -D\Delta n$, и для сферически симметричного источника

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 j_r) = -D\Delta n(\mathbf{r}, t)$$

Интегрируя это уравнение и умножая на площадь, найдем поток числа частиц

$$J_r = -4\pi \int_0^r r'^2 D\Delta n(\mathbf{r}') dr'$$

$$\begin{aligned} J_r &= -4\pi \int_0^r r'^2 D \frac{1}{r'^2} \frac{\partial}{\partial r'} \left(r'^2 \frac{\partial}{\partial r'} \frac{qr'^{s-1}}{D} \right) dr' = \\ &= -4\pi q(s-1) (r^s)_{s \rightarrow +0} = 4\pi q. \end{aligned}$$

Поток энергии равен

$$P(q) \sim \int_0^q k^2 c_s k s \frac{A^2}{\rho_0} k^{-4+2s} dk \Big|_{s \rightarrow 0} \sim \frac{c_s A^2}{\rho_0} = \text{Const.}$$

Значит, константу A в стационарном колмогоровском решении кинетического уравнения можно представить в виде

$$A = \alpha \left(\frac{P\rho_0}{c_s} \right)^{1/2}$$

где α - численный множитель порядка единицы.

Сшивка с накачкой

Сходимость интеграла столкновений

2.2 О типичной кинетике газов и жидкостей

2.2.1 О законах кинетики в гидродинамике и основных свойствах жидкостей (!)

(тут многое может быть!)

Колмогоровский спектр в гидродинамической турбулентности

Соотношение Колмогорова “4/5”

Обратный каскад энергии в двумерной турбулентности

гидродинамические и диффузионные параметры

Коэффициент самодиффузии D ???

Формула Кубо: ???

Коэффициент самодиффузии D выражается через интеграл корреляционной функции проекции скорости (импульса) частицы:

$$D = \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} m_1^{-2} \int_0^{\infty} e^{-\varepsilon \tau} \langle p_1^x(0) p_1^x(\tau) \rangle d\tau$$

где p_i - импульс частицы (номер 1), верхний индекс x означает x -компоненту вектора, τ - время. Угловые скобки означают усреднение по равновесному распределению Гиббса.

В классическом случае формула упрощается:

$$D = \int_0^{\infty} \langle v_1^x(0) v_1^x(\tau) \rangle d\tau$$

Коэффициент сдвиговой вязкости ф-ла кубо: ???

$$\eta = \lim_{\varepsilon \rightarrow \downarrow 0} \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{1}{V k_B T} \int_0^{\infty} e^{-\varepsilon \tau} \langle \pi^{xy}(0) \pi^{xy}(\tau) \rangle d\tau$$

где η -коэффициент сдвиговой вязкости, π^{xy} -компоненты тензора потока полного импульса.

Коэффициент объёмной вязкости ???

$$\zeta = \lim_{\varepsilon \rightarrow \pm 0} \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{1}{V k_B T} \int_0^{\infty} e^{-\varepsilon \tau} \langle (1 - \mathcal{P}) \pi^{xx}(0) \pi^{xx}(\tau) \rangle d\tau$$

где ζ - коэффициент объёмной вязкости, оператор

$$\mathcal{P} \pi^{xx} = \langle \pi^{xx} \rangle + (H - \langle H \rangle) \frac{\partial \langle \pi^{xx} \rangle}{\partial \langle H \rangle} + (N - \langle N \rangle) \frac{\partial \langle \pi^{xx} \rangle}{\partial \langle N \rangle}$$

H - гамильтониан системы, N - полное число частиц.

Тензор плотности потоков импульса:

$$\Pi_{ik} = p \delta_{ik} + \rho v_i v_k - \sigma'_{ik} = -\sigma_{ik} + \rho v_i v_k$$

$$\sigma_{ik} = -p \delta_{ik} + \sigma'_{ik}$$

физический смысл следующий.

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t} \int \rho v_i dV &= - \int \frac{\partial \Pi_{ik}}{\partial x_k} dV \\ \frac{\partial}{\partial t} \int \rho v_i dV &= - \oint \Pi_{ik} df_k\end{aligned}$$

Таким образом, Π_{ik} есть i -я компонента количества импульса, протекающего в единицу времени через единицу поверхности, перпендикулярную к оси x_k .

Тензор Π_{ik} называют тензором плотности потока импульса.

Поток энергии, являющейся скалярной величиной, определяется вектором;

поток же импульса, который сам есть вектор, определяется тензором второго ранга.

Тензор напряжений:

$$\sigma_{ik} = -p\delta_{ik} + \sigma'_{ik}$$

$$\sigma'_{ik} = \eta \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_k} + \frac{\partial v_k}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ik} \frac{\partial v_l}{\partial x_l} \right) + \zeta \delta_{ik} \frac{\partial v_l}{\partial x_l}$$

Процессы внутреннего трения в жидкости возникают только в тех случаях, когда различные участки жидкости движутся с различной скоростью, так что имеет место движение частей жидкости друг относительно друга.

Поэтому вязкий тензор должно зависеть от производных от скорости по координатам.

Если скорость жидкости равна нулю, то вязкость не проявляется.

Если вся жидкость как целое совершает равномерное вращение, вязкость не проявляется.

При равномерном вращении с угловой скоростью Ω скорость \mathbf{v} равна векторному произведению $[\Omega \mathbf{r}]$.

Линейными комбинациями производных $\partial v_i / \partial x_k$, обращающимися в нуль при $\mathbf{v} = [\Omega \mathbf{r}]$, являются суммы

$$\frac{\partial v_i}{\partial x_k} + \frac{\partial v_k}{\partial x_i}$$

Поэтому σ'_{ik} должно содержать именно эти симметричные комбинации производных $\partial v_i / \partial x_k$.

$$\sigma'_{ik} = \eta \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_k} + \frac{\partial v_k}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ik} \frac{\partial v_l}{\partial x_l} \right) + \zeta \delta_{ik} \frac{\partial v_l}{\partial x_l}$$

где $\eta > 0, \zeta > 0$.

$$\begin{aligned}\Pi_{ik} &= p\delta_{ik} + \rho v_i v_k - \sigma'_{ik} = -\sigma_{ik} + \rho v_i v_k \\ \sigma_{ik} &= -p\delta_{ik} + \sigma'_{ik}\end{aligned}$$

Тензор вязких напряжений

$$\sigma'_{\alpha\beta} = \eta \left(\frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} - \frac{2}{3} \delta_{\alpha\beta} \operatorname{div} \mathbf{u} \right) + \zeta \delta_{\alpha\beta} \operatorname{div} \mathbf{u}$$

2.2.2 Кинетическая теория газов по Ландау

6. Кинетическое уравнение для слабо неоднородного газа

7. Теплопроводность газа

8. Вязкость газа

9. Симметрия кинетических коэффициентов

10. Приближенное решение кинетического уравнения

2.2.3 О волнах в сплошных средах

(??? по Колоколову писал это????)

Гамильтонов формализм для нелинейных волн

$$H = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{s=0}^n \int d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_s d\mathbf{r}_{s+1} \dots d\mathbf{r}_n A(\mathbf{r}_1 \dots \mathbf{r}_n) Q(\mathbf{r}_1) \dots Q(\mathbf{r}_s) P(\mathbf{r}_{s+1}) \dots P(\mathbf{r}_n)$$

$$H_2 = \frac{1}{2} \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 [A(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) P(\mathbf{r}_1) P(\mathbf{r}_2) + B(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) Q(\mathbf{r}_1) Q(\mathbf{r}_2)] + \\ + \frac{1}{2} \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 C(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) Q(\mathbf{r}_1) P(\mathbf{r}_2)$$

переходя к фурье-компонентам, получим

$$H_2 = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} [A_{\mathbf{k}} P_{\mathbf{k}} P_{-\mathbf{k}} + B_{\mathbf{k}} Q_{\mathbf{k}} Q_{-\mathbf{k}} + C_{\mathbf{k}} Q_{\mathbf{k}} P_{-\mathbf{k}}].$$

$$H_2 = \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^* a_{\mathbf{k}},$$

Следующий, кубический по каноническим переменным вклад

$$H_3 = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} a_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}_1}^* a_{\mathbf{k}_2}^* \Delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) + c.c. + \\ + \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} U_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} a_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}_1} a_{\mathbf{k}_2} \Delta(\mathbf{k} + \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2) + c.c.$$

Звук

$$H = \int d^3r \left[\frac{\rho v^2}{2} + \rho \varepsilon(\rho) \right]$$

плотность среды, $\mathbf{v} = \nabla \phi$ — скорость, ϕ — потенциал, ε — внутренняя энергия единицы массы.

уравнение непрерывности и уравнение Эйлера

$$\partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0, \quad \partial_t \mathbf{v} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} = -\frac{1}{\rho} \nabla P$$

или в каноническом виде

$$\partial_t \rho = \frac{\delta H}{\delta \phi}, \quad \partial_t \phi = -\frac{\delta H}{\delta \rho}$$

$$\frac{\delta H}{\delta \phi} = -\nabla \cdot (\rho \nabla \phi) = \partial_t \rho$$

Учитывая потенциальность течения, $\text{rot } \mathbf{v} = 0 \rightarrow (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} = \nabla v^2/2$, получим из уравнения Эйлера

$$\nabla \frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \left[\frac{(\nabla \phi)^2}{2} \right] = -\frac{1}{\rho} \nabla \left(\rho^2 \frac{d\varepsilon}{d\rho} \right) = -\nabla \left(\rho \frac{d\varepsilon}{d\rho} + \varepsilon \right).$$

Интегрируя это равенство, получим

$$-\frac{\partial \phi}{\partial t} = \left[\frac{(\nabla \phi)^2}{2} \right] + \rho \frac{d\varepsilon}{d\rho} + \varepsilon = \frac{\delta H}{\delta \rho}.$$

Кроме того, представим скорость звука в виде

$$c_s^2 = \left(\frac{dP}{d\rho} \right)_s = \frac{d}{d\rho} \left(\rho^2 \frac{d\varepsilon}{d\rho} \right)_0 = 2\rho_0 \varepsilon'_0 + \rho_0^2 \varepsilon''_0.$$

Тогда квадратичная часть есть

$$H_2 = \int d^3r \left[\frac{\rho_0}{2} (\nabla \phi)^2 + \frac{\rho_0^2}{2\rho_0} c_s^2 \right].$$

Переходя к фурье-компонентам, получим

$$H_2 = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \left[\rho_0 k^2 \phi_{\mathbf{k}} \phi_{-\mathbf{k}} + \frac{c_s^2}{\rho_0} \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} \right].$$

(тут укажу словами коротко шаги, как прийти к тому, что ниже)

$$H_3 = \frac{1}{2\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \sqrt{\frac{c_s}{8\rho_0}} \sqrt{k k_1 k_2} \Delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) (a_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}_1}^* a_{\mathbf{k}_2}^* + c.c.) (\cos \theta_{12} + \cos \theta_{k_2} + \cos \theta_{k_1} + 3g),$$

где, например, θ_{12} - угол между волновыми векторами \mathbf{k}_1 и \mathbf{k}_2 , т. е. $\cos \theta_{12} = \mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{k}_2 / (k_1 k_2)$ и т. д. Это выражение будет в дальнейшем часто использоваться для иллюстрации общих утверждений (???).

Квантовое кинетическое уравнение

$$\frac{dp_n}{dt} = \sum_{m \neq n} w_{mn} p_m - p_n \sum_{m \neq n} w_{nm}$$

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^* a_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} a_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}_1}^* a_{\mathbf{k}_2}^* \Delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) + c.c.$$

$$\begin{aligned} \hat{V}_{\mathbf{k}} = & \frac{1}{2\sqrt{V}} \sum_{1,2} (V_{\mathbf{k};1,2} \hat{a}_1^+ \hat{a}_2^+ \hat{a}_{\mathbf{k}} + V_{\mathbf{k};1,\mathbf{a}}^* \hat{a}_{\mathbf{k}}^+ \hat{a}_1 \hat{a}_2) \Delta(\mathbf{k} - \mathbf{1} - \mathbf{2}) + \\ & + \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{1,2} (V_{2;\mathbf{k},1} \hat{a}_{\mathbf{k}}^+ \hat{a}_1^+ \hat{a}_2 + V_{2;\mathbf{k},1}^* \hat{a}_2^+ \hat{a}_{\mathbf{k}} \hat{a}_1) \Delta(\mathbf{2} - \mathbf{1} - \mathbf{k}). \end{aligned}$$

(????)

$$\begin{aligned}\dot{n}_{\mathbf{k}} = & \frac{2\pi}{V} \sum_{\mathbf{1}, \mathbf{2}} |V_{\mathbf{2}; \mathbf{1}, \mathbf{k}}|^2 \left[(n_{\mathbf{k}} + n_{\mathbf{1}} + 1) n_{\mathbf{2}} - n_{\mathbf{1}} n_{\mathbf{k}} \right] \Delta(\mathbf{2} - \mathbf{1} - \mathbf{k}) \delta(\omega_1 + \omega_k - \omega_2) + \\ & + \frac{\pi}{V} \sum_{\mathbf{1}, \mathbf{2}} |V_{\mathbf{k}; \mathbf{1}, \mathbf{2}}|^2 \left[n_{\mathbf{1}} n_{\mathbf{2}} - (n_{\mathbf{1}} + n_{\mathbf{2}} + 1) n_{\mathbf{k}} \right] \Delta(\mathbf{k} - \mathbf{1} - \mathbf{2}) \delta(\omega_k - \omega_1 - \omega_2) .\end{aligned}$$

$$i\dot{a}_{\mathbf{k}} = \{a_{\mathbf{k}}, \mathcal{H}\} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial a_{\mathbf{k}}^*}$$

Классический подход

Найдем изменение числа волн $n_{\mathbf{k}}$ со временем за счет слабого взаимодействия:

$$\partial_t n_{\mathbf{k}} = \langle a_{\mathbf{k}} \partial_t a_{\mathbf{k}}^* + a_{\mathbf{k}}^* \partial_t a_{\mathbf{k}} \rangle .$$

Из уравнений движения следует

$$\partial_t a_{\mathbf{k}} + i\omega_k a_{\mathbf{k}} = -\frac{i}{\sqrt{V}} \sum_{12} \left[V_{1,2\mathbf{k}} a_1 a_2^* \Delta(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}) + \frac{1}{2} V_{\mathbf{k},12}^* a_1 a_2 \Delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \right]$$

Замечая, что в круглых скобках стоят комплексно сопряженные величины, последнее уравнение можно переписать так:

$$\begin{aligned}\partial_t n_{\mathbf{k}} = & \text{Im} \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{12} \Delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) V_{\mathbf{k},12}^* \langle a_1 a_2 a_{\mathbf{k}}^* \rangle - \\ & - \text{Im} \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{12} 2\Delta(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}) V_{1,2\mathbf{k}}^* \langle a_1^* a_2 a_{\mathbf{k}} \rangle .\end{aligned}$$

Если вычислять корреляторы для волнового поля без учета нелинейности, то получим ноль. Поэтому надо найти $\langle a_1^* a_2 a_{\mathbf{k}} \rangle$ в следующем порядке теории возмущений.

Алгебраический подход

(тут жуть какая-то с вычислениями, вообще нет желания конспектировать)

$$[\partial_t - i(\omega_k - \omega_1 - \omega_2)] \langle a_1 a_2 a_{\mathbf{k}}^* \rangle = \frac{i}{\sqrt{V}} V_{\mathbf{k},12} \Delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) [n_1 n_2 - n_k (n_1 + n_2)]$$

Диаграммный подход

(какие-то диаграммы, тоже тронешься, пока будешь разбирать это.)

(мб нарисую диаграммы)

$$\begin{aligned}\langle \tilde{a}_1 a_2^* a_{\mathbf{k}}^* \rangle(t) &= \frac{(-i)}{2\sqrt{V}} \sum_{34} V_{134}^* \int_0^t d\tau e^{i(t-\tau)(\omega_2 + \omega_k - \omega_1 + i\delta)} \langle a_3 a_4 a_2^* a_{\mathbf{k}}^* \rangle_0(\tau) = \\ &= \frac{i}{\sqrt{V}} V_{12\mathbf{k}}^* n_2 n_k \pi \delta(\omega_2 + \omega_k - \omega_1)\end{aligned}$$

2.2.4 Типичные явления кинетики газов по Ландау

11. Диффузия легкого газа в тяжелом
12. Диффузия тяжелого газа в легком
13. Кинетические явления в газе во внешнем поле
14. Явления в слабо разреженных газах
15. Явления в сильно разреженных газах
16. Динамический вывод кинетического уравнения
17. Кинетическое уравнение с учетом тройных столкновений
18. Вириальное разложение кинетических коэффициентов
19. Флуктуации функции распределения в равновесном газе
20. Флуктуации функции распределения в неравновесном газе

2.2.5 Диффузионное приближение по Ландау

21. Уравнение Фоккера-Планка
22. Слабо ионизованный газ в электрическом поле
23. Флуктуации в слабо ионизованном неравновесном газе
24. Рекомбинация и ионизация

(напишу, уже есть в теории, но пока не особо въезжал.)

25. Амбиполярная диффузия
26. Подвижность ионов в растворах сильных электролитов

2.3 О типичной кинетике в конденсированных средах

(тут много всего будет, так что важный раздел.)

2.3.1 О кинетике фононов (!?!?!?)

(по Фоминову потом выпишу суть)

(в твердом теле половина этих тем как минимум указана будет!)

Обзор общих равновесных свойств среды с фононами

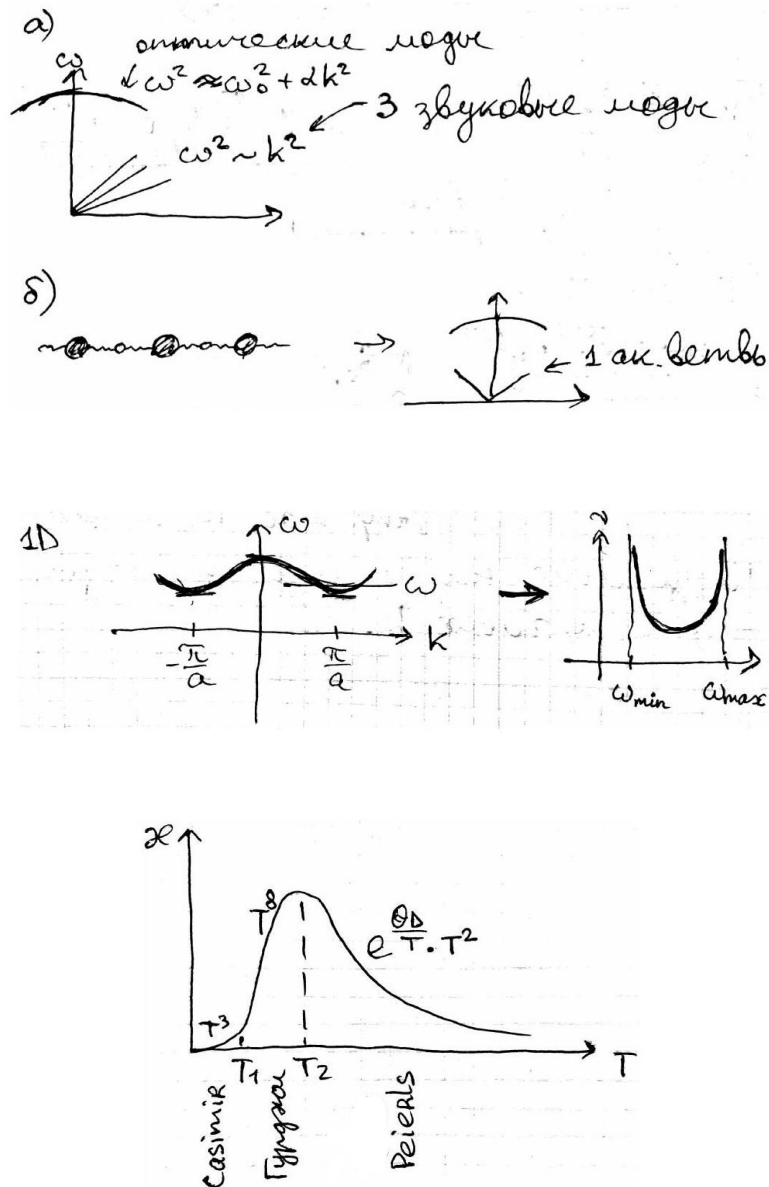
(тут напоминание, что вообще происходит и какие там были итоговые выводы в конд средах)

Фононный вклад в электропроводность металлов:

$$\sigma = \frac{Ne^2\tau_{tr}}{m} \sim \begin{cases} 1/T, & T \gg \Theta_D, \\ 1/T^5, & T \ll \Theta_D. \end{cases}$$

Число Лоренца и закон Видемана-Франца:

$$L = \frac{\kappa}{\sigma T} = \frac{\text{const}}{e^2}.$$



Обзор кинетических свойств среды с фононами

Есть баллистический (кнудсеновский) режим, диффузионный, пуазейлев, второй звук.
 (!! напишу тут обзор этого всего!)

А. Кинетическое уравнение Больцмана для фононов

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} - \frac{\partial \omega}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{k}} = I_{\text{cr}}(f)$$

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \mathbf{v} = \frac{\partial \omega(\mathbf{k}, \mathbf{r})}{\partial \mathbf{k}},$$

$$\frac{d\mathbf{k}}{dt} = -\frac{\partial \omega}{\partial \mathbf{r}}.$$

$$I_{\text{cr}} = I_{\text{ph-ph}} + I_{\text{imp}} + I_{\text{b}},$$

В. τ -приближение.

$$I_{\text{cr}} = -\frac{f - f_0}{\tau} = -\frac{\delta f}{\tau},$$

$$\delta f \equiv f - f_0$$

$$f_0(\varepsilon) = n(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\varepsilon/T} - 1}$$

С. Коэффициент теплопроводности и закон Казимира. Чтобы немного познакомиться с кин.уравнением, рассмотрим задачу о линейном коэффициенте теплопроводности. В этом случае в системе есть слабый градиент температуры, температура является функцией координаты $T = T(\mathbf{r})$. В то же время, ω от \mathbf{r} не зависит. В τ -приближении имеем

$$\mathbf{v} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} = -\frac{\delta f}{\tau}.$$

Поток тепла обозначим Q . Тогда

$$Q_i = -\sum_j \kappa_{ij} \nabla_j T = \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \hbar \omega(\mathbf{k}) v_i(\mathbf{k}) \delta f = -\int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \tau \hbar \omega(\mathbf{k}) v_i(\mathbf{k}) \left(\mathbf{v}(\mathbf{k}) \frac{\partial f}{\partial T} \nabla T \right).$$

Хим.потенциал фононов равен нулю. Это связано с тем, что число фононов не фиксировано и должно находиться из условия минимума свободной энергии, $\partial F / \partial N = 0$. А хим.потенциал равен как раз этой производной.

Малость здесь уже содержится в градиенте температуры, поэтому f можно заменить на f_0 . В результате

$$\kappa_{ij} = \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \tau \hbar \omega(\mathbf{k}) v_i(\mathbf{k}) v_j(\mathbf{k}) \frac{\partial f_0}{\partial T}.$$

При низких температурах ($T \ll T_D$) это даёт

$$\kappa \sim \int dk \cdot k^2 \tau \hbar \omega c^2 \cdot \frac{\hbar \omega}{T^2} \frac{1}{\text{sh}^2 \frac{\hbar \omega}{2T}} \sim \frac{\tau T^3}{\hbar^3 c} \int_0^{T_D/2T} \frac{x^4 dx}{\text{sh}^2 x} \propto T^3$$

- закон Казимира.

17 Это баллистический (кнудсеновский) режим. Другие возможные режимы: диффузионный, пуазейлев, второй

Взаимодействие фононов**А. Анггармонизм и взаимодействие. Слияния и распады. N- и U-процессы.**

28 А. Анггармонизм и взаимодействие. Слияния и распады. N- и U-процессы.

Вспоминаем, что процедура квантования фононов привела к следующему выражению для отклонений [см. (6.2) и (6.9); u и i ещё есть индекс j , но мы его не будем писать для краткости]:

$$\mathbf{u} = \sqrt{\frac{\hbar}{2MN}} \sum_{\mathbf{k}, s} \frac{\mathbf{e}_{\mathbf{k}s} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}}}{\sqrt{\omega(\mathbf{k})}} (a_{\mathbf{k}s} + a_{-\mathbf{k}s}^\dagger).$$

Энергия деформации имеет вид (чтобы не следить за точным соответствием коэффициентов разложения тому, что было раньше, снабдим их индексом)

$$U = U_0 + \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'} D_1 (\mathbf{R} - \mathbf{R}') (u(\mathbf{R}) - u(\mathbf{R}'))^2 +$$

$$+ \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{R}', \mathbf{R}''} K_1 (\mathbf{R} - \mathbf{R}', \mathbf{R} - \mathbf{R}'') (u(\mathbf{R}) - u(\mathbf{R}')) (u(\mathbf{R}) - u(\mathbf{R}'')) (u(\mathbf{R}') - u(\mathbf{R}'')).$$

Ангармоническое слагаемое даёт

$$\left(\frac{\hbar}{2MN}\right)^{3/2} \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{R}', \mathbf{R}''} K_2(\mathbf{R} - \mathbf{R}', \mathbf{R} - \mathbf{R}'') \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{k}''} \frac{1}{\sqrt{\omega(\mathbf{k})\omega(\mathbf{k}')\omega(\mathbf{k}'')}} \times \\ \times (a_{\mathbf{k}} + a_{-\mathbf{k}}^\dagger) (a_{\mathbf{k}'} + a_{-\mathbf{k}'}^\dagger) (a_{\mathbf{k}''} + a_{-\mathbf{k}''}^\dagger) (e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} - e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}'}) (e^{i\mathbf{k}'\mathbf{R}} - e^{i\mathbf{k}'\mathbf{R}''}) (e^{i\mathbf{k}''\mathbf{R}'} - e^{i\mathbf{k}''\mathbf{R}''}).$$

$$\mathbf{k} + \mathbf{k}' + \mathbf{k}'' = \mathbf{b},$$

т.е.

$$\sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{K}\mathbf{R}} = N \sum_{\mathbf{b}} \delta_{\mathbf{K}, \mathbf{b}}.$$

В результате анггармоническое слагаемое (9.3) можно переписать как ¹⁹

$$H_{\text{ВЗ}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k} + \mathbf{k}' + \mathbf{k}'' = \mathbf{b}} B (a_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}'} a_{-\mathbf{k}''}^\dagger + a_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}'}^\dagger a_{\mathbf{k}''}^\dagger),$$

где

$$B(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{k}'') = \left(\frac{\hbar}{2M}\right)^{3/2} \frac{1}{\sqrt{\omega\omega'\omega''}} \sum_{\mathbf{R} - \mathbf{R}', \mathbf{R} - \mathbf{R}''} K_2(\mathbf{R} - \mathbf{R}', \mathbf{R} - \mathbf{R}'') \times \\ \times (1 - e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}' - \mathbf{R})}) (1 - e^{i\mathbf{k}'(\mathbf{R}'' - \mathbf{R})}) (e^{i\mathbf{k}''(\mathbf{R}' - \mathbf{R})} - e^{i\mathbf{k}''(\mathbf{R}'' - \mathbf{R})}).$$

Два слагаемых в гамильтониане (9.11) эрмитово сопряжены друг другу и описывают обратные друг другу процессы. Первое - это слияние (два в один), а второе - распад фононов (один в два). Если $\mathbf{b} = 0$, то это N-процесс (нормальный). Если $\mathbf{b} \neq 0$, то это U-процесс (Umklapp - процесс переброса).

Рис. 7. N- и U-процессы. (??? добавлю эти картинки, все равно пока над ними нужно подумать, их пока не понимаю)

Энергия должна сохраняться,

$$\omega(\mathbf{k}) \pm \omega(\mathbf{k}') - \omega(\mathbf{k}'') = 0$$

$$w_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f | H_{\text{ВЗ}} | i \rangle|^2 \delta(E_f - E_i).$$

В нашем случае эта общая формула даёт

$$w_{\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}', \mathbf{k}''} = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{|B|^2}{N} \delta(\hbar\omega_{\mathbf{k}} - \hbar\omega_{\mathbf{k}'} - \hbar\omega_{\mathbf{k}''}) \delta_{\mathbf{k} + \mathbf{k}' + \mathbf{k}'', \mathbf{b}}$$

(?????? дальше словами напишу суть разных действий!!! там много преобразований, на несколько страниц)

$$w_{\mathbf{k}, \mathbf{k}' \rightarrow \mathbf{k}''} = \frac{2\pi}{\hbar^2} \frac{|B|^2}{N} \delta(\omega_{\mathbf{k}} + \omega_{\mathbf{k}'} - \omega_{\mathbf{k}''}) \delta_{\mathbf{k} + \mathbf{k}' + \mathbf{k}'', \mathbf{b}}$$

В формуле (9.26) нет множителя $1/2$, такого как в (9.22), поскольку здесь один из пары исходных фононов $(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ задан.

Если в процессах, описываемых формулами (9.11) и (9.12), все три фонона - акустические, то нас интересуют малые $\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{k}''$ и $\mathbf{b} = 0$. В этом случае можно выяснить, как ведёт себя B . Вспоминая определение этой величины [формула (9.12)], видим, что под суммой каждая из скобок с экспонентами в длинноволновом пределе оказывается пропорциональна первой степени соответствующего волнового вектора, т.е. первой

степени соответствующей частоты. Поэтому в целом в случае N-процессов с тремя акустическими фононами имеем

$$B \propto \sqrt{\omega\omega'\omega''}$$

где коэффициент пропорциональности - функция от углов, описывающих направления импульсов. Учитывая (9.28), пишем

$$\frac{|B|^2}{N} = A\hbar^3\omega_k\omega_{k'}\omega_{k''}.$$

Можно получить оценку

$$A \sim \frac{a_0^3}{mc^2V},$$

где V - объём всего кристалла. Можно это делать, начиная с выражения для ангармонической энергии: при смещении атомов на величину порядка межатомного расстояния a_0 ангармоническая энергия в расчёте на один атом - порядка атомной (а та - порядка mc^2 , где m - средняя масса атома решётки ²⁰), поэтому в формуле (9.2) получаем $K_1(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \mathbf{R}_3) \sim mc^2/a_0^3$ и т.д. Но можно это сообразить и по размерности. Из формул (9.18) и (9.29) следует, что размерность A есть обратная энергия. При этом эта буква может складываться из микроскопических параметров a_0, m, c и полного объёма V (фурье-преобразования и т.д.). Можно сначала проверить, что зависимость от V имеет вид $A \propto 1/V$ [это следует из N в знаменателе формулы (9.29)]. Тогда нужную размерность мы получим, обезразмерив объём с помощью a_0^3 и сделав энергию mc^2 . Это и даёт оценку (9.30).

В. Время свободного пробега от взаимодействия фононов. Для того, чтобы свести интеграл столкновений к форме, соответствующей τ -приближению и таким образом определить время τ и получить для него оценку, мы рассмотрим только часть линеаризованного интеграла столкновений, содержащую отклонение только в $f_k = f_0 + \delta f$ (т.е. в этом вычислении $f_{k'}$ и $f_{k''}$ будем считать равновесными). Для распадов тогда из (9.25) получаем

$$(f_k + 1)f_{k'}f_{k''} - f_k(f_{k'} + 1)(f_{k''} + 1) \approx -\delta f(f'_0 + f''_0 + 1).$$

В скобке комбинация $(f'_0 + f''_0)$ приводит к индуцированному распаду, а 1 - к спонтанному распаду. Время релаксации τ определяем так:

$$I_{\text{ст}} = -\frac{\delta f_k}{\tau}.$$

От чего зависит: $\tau = \tau(T, \omega)$. Важно, что при этом τ не зависит от функции распределения f_k . Это и означает τ -приближение - формула (9.32) соответствует именно такому виду. Рассмотрим сначала N-процессы. Учитывая

$$\sum_{\mathbf{k}'} = V \int \frac{d^3k'}{(2\pi)^3},$$

имеем (\mathbf{k} задано, по \mathbf{k}' интегрируем; при каждом \mathbf{k}' третий волновой вектор \mathbf{k}'' определён однозначно законом сохранения импульса, поэтому только одно интегрирование)

$$\begin{aligned} \left(\frac{1}{\tau_N}\right)_{\text{расп.}} &= \pi\hbar V \int \frac{d^3k'}{(2\pi)^3} A\omega\omega'\omega'' (f_{k'} + f_{k''} + 1) \delta(\omega - \omega' - \omega''), \\ \left(\frac{1}{\tau_N}\right)_{\text{сл.}} &= 2\pi\hbar V \int \frac{d^3k'}{(2\pi)^3} A\omega\omega'\omega'' (f_{k'} - f_{k''}) \delta(\omega + \omega' - \omega''). \end{aligned}$$

Учтём ещё, что

$$d^3k' = \frac{\omega^2 d\omega' d\Omega_{k'}}{c^3}.$$

Получим оценки $1/\tau$ для нескольких случаев:

1. Спонтанный распад. Основной вклад даёт область $\omega \sim \omega' \sim \omega''$,²¹ в результате (учитывая, что $\omega_D = ck_D = c/a_0$ и в подынтегральное выражение входит ω^5)

$$\left(\frac{1}{\tau_N}\right)_{\text{сп.расп.}} \sim \frac{\hbar a_0^3 \omega^5}{mc^5} = \frac{\hbar a_0^3 \omega_D^5}{mc^5} \left(\frac{\omega}{\omega_D}\right)^5 = \omega_D \left(\frac{\hbar \omega_D}{mc^2}\right) \left(\frac{\hbar \omega}{\hbar \omega_D}\right)^5.$$

Оценим численно параметр, который здесь возник (считаем $c \sim 1 \text{ км/с}$):

$$\gamma = \frac{\hbar \omega_D}{mc^2} = \frac{\hbar}{a_0 mc} \sim \frac{10^{-27}}{5 \cdot 10^{-8} \cdot (10^{-27} \cdot 2 \cdot 10^3 \cdot 10^2) \cdot 10^5} \sim 10^{-3}.$$

Важное качественное обстоятельство: спонтанный распад не зависит от температуры (т.к. в формулу для τ не вошли функции распределения).

2. Индуцированный распад холодного фонона. Для индуцированных распадов помимо частоты фонона возникает второй важный энергетический масштаб - температура. Поэтому нужно рассматривать разные возможные соотношения между $\hbar\omega$ и T . Холодный фонон означает фонон с $\hbar\omega \ll T$. Из-за закона сохранения энергии из холодного фонона могут родиться только два холодных. Основной вклад даёт область $\hbar\omega \sim \hbar\omega' \sim \hbar\omega'' \ll T$, при этом $f(\omega) \approx T/\hbar\omega$. Получается комбинация вида

$$\omega^5 (f_{\omega'} + f_{\omega''})$$

В результате

$$\left(\frac{1}{\tau_N}\right)_{\text{инд.расп.}} \sim \omega_D \left(\frac{\hbar \omega_D}{mc^2}\right) \frac{(\hbar \omega)^4 T}{(\hbar \omega_D)^5}.$$

3. Слияние для холодного фонона.

В этом случае $\hbar\omega \ll T$, при этом фонон, с которым сливаемся, может быть тепловым с $\hbar\omega' \sim T$, тогда и получающийся фонон будет тепловым. Именно этот случай даёт основной вклад: $\hbar\omega' \sim \hbar\omega'' \sim T$. При этом в разности $(f_{\omega'} - f_{\omega''})$, входящей в формулу (9.35), каждое слагаемое порядка единицы, а разность мала

В результате получается комбинация вида

$$\omega \omega'^3 \omega'' (f_{\omega'} - f_{\omega''}) \frac{\omega'}{\omega} \sim \omega T^4.$$

В итоге

$$\left(\frac{1}{\tau_N}\right)_{\text{сл.}} \sim \omega_D \left(\frac{\hbar \omega_D}{mc^2}\right) \frac{\hbar \omega T^4}{(\hbar \omega_D)^5}.$$

4. Распад (спонтанный и индуцированный) и слияние тепловых фононов.

Оценку для случая $\hbar\omega \sim T$ можно получить из вышеприведённых формул (они все стыкуются в этом случае):

$$\frac{1}{\tau_N} \sim \omega_D \left(\frac{\hbar \omega_D}{mc^2}\right) \left(\frac{T}{T_D}\right)^5.$$

5. Процессы переброса для тепловых фононов (при $T \ll T_D$).

При $T \ll T_D$ исходный импульс теплового фонона мал по сравнению с дебаевским:

$$k = \frac{\omega}{c} \sim \frac{T/\hbar}{c} \ll \frac{T_D}{\hbar c} \sim k_D.$$

Распады с перебросом (как спонтанные, так и индуцированные) оказываются невозможны по следующей причине. В силу закона сохранения энергии при распаде имеем $k = k' + k''$, поэтому раз $k \ll k_D$, то и $k', k'' \ll k_D$. Закон сохранения импульса, который для процесса переброса имеет вид $\mathbf{k} + \mathbf{k}' + \mathbf{k}'' = \mathbf{b}$ с ненулевой правой частью, не может быть выполнен. Иными словами, исходный импульс недостаточен для процесса переброса.

Слияния при $T \ll T_D$ возможны, мы можем рассмотреть слияние с любым фононом, не обязательно тепловым - этот процесс может содержать малость из-за функции распределения, но он возможен. Основной вклад будет от $\omega' \sim \omega'' \sim \omega_D$ (нам нужны большие частоты, чтобы был переброс). Получается комбинация вида

$$\omega \omega'^3 \omega'' (f_{\omega'} - f_{\omega''}) \sim T \omega_D^4 e^{-T_D/T}.$$

Температурная зависимость теплопроводности решётки при низких температурах ($T < T_D$)

(?? тут какие-то гениальные вещи!!! не знаю, потом разберу)

Отталкиваясь от формулы (8.14) и используя понятие удельной теплоёмкости фононов с импульсом k , $c_{ph}(k) = \partial(\hbar\omega(k)f_0)/\partial T$, мы можем вместо (8.15) записать ту же самую оценку в немного другом виде:

$$\kappa \sim \int d^3k \cdot c_{ph}(k) l c, \quad l = c\tau.$$

Если же τ не зависит от k (а мы ниже будем рассматривать тепловые фононы, для которых это можно считать справедливым, т.к. их частота задана температурой), то интегрирование относится только к теплоёмкости на импульсе и даёт в результате удельную теплоёмкость с учётом всего спектра (полную в этом смысле):

$$\kappa \sim c_{ph} l c.$$

Мы считаем, что есть образец с некоторым поперечным размером d , а теплопроводность мы измеряем вдоль образца. При самых низких температурах длина свободного пробега определяется рассеянием на стенках, поэтому $l \sim d$, что с учётом

$$c_{ph} \sim \left(\frac{T}{\hbar c}\right)^3 \sim k_D^3 \left(\frac{T}{T_D}\right)^3$$

даёт

$$\kappa \sim \frac{\omega_D^3}{c^2} \left(\frac{T}{T_D}\right)^3 d.$$

Это - закон Казимира T^3 , который мы уже получали [см. (8.15) - теперь мы уточнили, что за τ там возникает]. Соответствует баллистическому (кнудсеновскому на гидродинамическом языке) режиму - фононы рассеиваются на стенках, между рассеяниями летят по прямой. При самых низких T

$$d \ll l_N \ll l_U,$$

Рассеяние фононов на примесях

А. Время свободного пробега и теплопроводность.

В. Двухступенчатая релаксация. 42

Второй звук

А. Гидродинамические уравнения. 43

В. Второй звук и его скорость. 44

Методы рассеяния

А. Изучение структурных свойств твёрдых тел методами упругого рассеяния. 45

В. Неупругое рассеяние нейтронов. 47

С. Фактор Дебая–Уоллера.

2.3.2 О кинетике диэлектриков и фононах по Ландау

66. Взаимодействие фононов

67. Кинетическое уравнение для фононов в диэлектрике

68. Теплопроводность диэлектриков. Высокие температуры

69. Теплопроводность диэлектриков. Низкие температуры

70. Рассеяние фононов на примесях

71. Гидродинамика фононного газа в диэлектрике

72. Поглощение звука в диэлектрике. Длинные волны

73. Поглощение звука в диэлектрике. Короткие волны

2.3.3 О бесстолкновительной плазме по Ландау

27. Самосогласованное поле

28. Пространственная дисперсия в плазме

29. Диэлектрическая проницаемость бесстолкновительной плазмы

30. Затухание Ландау

$$Q = - |\mathbf{E}|^2 \frac{\pi m e^2 \omega}{2k^2} \left. \frac{df(p_x)}{dp_x} \right|_{v_x=\omega/k}.$$

Таким образом, диссипация возникает уже в бесстолкновительной плазме (Л. Д. Ландау, 1946)

$$\epsilon_l'' = - \frac{4\pi^2 e^2 m}{k^2} \left. \frac{df(p_x)}{dp_x} \right|_{v_x=\omega/k}.$$

$$m \frac{d\delta w}{dt} = -eE(t, x_0) = -e \operatorname{Re} \left\{ E_0 e^{ikt(w_0 - \omega/k)} e^{t\delta} \right\}.$$

$$\delta w = -\frac{e}{m} \operatorname{Re} \frac{E(t, x_0)}{ik(w_0 - \omega/k) + \delta},$$

$$\delta x = -\frac{e}{m} \operatorname{Re} \frac{E(t, x_0)}{[ik(w_0 - \omega/k) + \delta]^2}.$$

31. Диэлектрическая проницаемость максвелловской плазмы**32. Продольные плазменные волны**

$$\gamma = \sqrt{\frac{\pi}{8}} \frac{\Omega_e}{(ka_e)^3} \exp \left[-\frac{1}{2(ka_e)^2} - \frac{3}{2} \right]$$

(Л. Д. Ландау, 1946). В силу условия $ka_e \ll 1$, декремент затухания плазменных волн действительно оказывается экспоненциально малым. Он возрастает с уменьшением длины волны и при $ka_e \sim 1$ (когда формула (32, 7) уже неприменима) становится того же порядка величины, что и частота, так что понятие о распространяющихся плазменных волнах теряет смысл.

33. Ионно-эвуковые волны

$$\varepsilon_l = 1 - \frac{\Omega_i^2}{\omega^2} + \frac{1}{(ka_e)^2} \left[1 + i\sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{\omega}{kv_T} \right].$$

Пренебрегая сначала относительно малой мнимой частью, из уравнения $\varepsilon_l = 0$ получим

$$\omega^2 = \Omega_i^2 \frac{k^2 a_e^2}{1 + k^2 a_e^2} = \frac{zT_e}{M} \frac{k^2}{1 + k^2 a_e^2}$$

(в последнем выражении использовано, что $N_e = zN_i$). Для самых длинных волн, при условии $ka_e \ll 1$, закон дисперсии (33, 4) сводится к соотношению ¹⁾

$$\omega = k\sqrt{\frac{zT_e}{M}}, \quad ka_e \ll 1.$$

34. Релаксация начального возмущения

Подставив $f_{\omega\mathbf{k}}^{(+)}$ из (34, 10) в (34, 11), получим уравнение уже для одного только $\varphi_{\omega\mathbf{k}}^{(+)}$; из него найдем

$$\varphi_{\omega\mathbf{k}}^{(+)} = -\frac{4\pi e}{k^2 \varepsilon_l(\omega, k)} \int \frac{g_{\mathbf{k}}(\mathbf{p}) d^3 p}{i(kv - \omega - \omega)},$$

где введена продольная диэлектрическая проницаемость ε_l согласно (29, 9). Снова (как и в §29) введя составляющую импульса $p_x = mv_x$ вдоль направления \mathbf{k} , перепишем эту формулу в виде

$$\varphi_{\omega\mathbf{k}}^{(+)} = -\frac{4\pi e}{k^2 \varepsilon_l(\omega, k)} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{g_{\mathbf{k}}(p_x) dp_x}{i(kv_x - \omega)},$$

где

$$g_{\mathbf{k}}(p_x) = \int g_{\mathbf{k}}(\mathbf{p}) dp_y dp_z$$

2.3.4 О столкновениях в плазме по Ландау

41. Интеграл столкновений Ландау

42. Передача энергии между электронами и ионами

43. Длина пробега частиц в плазме

44. Лоренцева плазма

45. Убегающие электроны

46. Сходящийся интеграл столкновений

47. Взаимодействие через плазменные волны

2.3.5 О типичной кинетике металлов и электронов по Ландау и Фоминову

I. Кинетическое уравнение для электронов в металле 3

II. Проводимость, обусловленная примесями 6

III. Теплопроводность, обусловленная примесями 8

IV. Электрон-электронное рассеяние 9

A. Без процессов переброса 9

B. Роль процессов переброса 11

V. Электрон-фононное рассеяние 12

При деформации решётки возникает поляризация $\mathbf{P}(\mathbf{r})$ (сейчас рассматриваем решётку в непрерывном пределе). Плотность поляризационного заряда есть $\rho_{\text{пол}} = -\text{div } \mathbf{P}$, а энергия взаимодействия электронов с этим зарядом равна

$$V(\mathbf{r}) = -e \int Q(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \text{div } \mathbf{P}(\mathbf{r}') d^3\mathbf{r}'.$$

Без экранирования ядро было бы чистым кулоновским взаимодействием: $Q = 1/|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$. Однако, из-за экранировки оно становится короткодействующим. Считая атомные расстояния малыми, можем считать ядро дельта-функцией:

$$Q(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \approx a^2 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'),$$

где a имеет порядок атомного пространственного масштаба, $a \sim 10^{-8} \text{ см} \sim \hbar/p_0$, откуда

$$V(\mathbf{r}) \sim -ea^2 \text{div } \mathbf{P}(\mathbf{r}).$$

Поляризацию можно оценить как $\mathbf{P} \sim ne\mathbf{u}$, где n - плотность атомов (порядка плотности электронов), \mathbf{u} - смещение. Взаимодействие содержит $\text{div } \mathbf{P}$, что в фурьепредставлении даст $iku_{\mathbf{k}}$, при том что для длинноволновых фононов $\omega = c_s k$. В результате

$$V_{\mathbf{k}} \sim -ie^2 a^2 n \frac{\omega}{c_s} u_{\mathbf{k}}.$$

Используя формулы квантования фононов, можем записать смещение $u_{\mathbf{k}}$ через операторы a и a^\dagger . В первом порядке теории возмущений есть процессы, соответствующие матричным элементам $a_{\mathbf{k}}$ и $a_{\mathbf{k}}^\dagger$, т.е. процессам с поглощением или испусканием одного фонона. Например, для испускания будет матричный элемент

$\langle n_{\mathbf{k}} + 1 | a_{\mathbf{k}}^\dagger | n_{\mathbf{k}} \rangle = \sqrt{n_{\mathbf{k}} + 1}$, и мы получим (N - число элементарных ячеек, M - масса элементарной ячейки):

$$V_{\mathbf{p}-\mathbf{h}\mathbf{k};\mathbf{p}} \sim -ie^2 a^2 n \left(\frac{\hbar(n_{\mathbf{k}} + 1)}{NM\omega} \right)^{1/2} \frac{\omega}{c_s} \sim -ina^3 \frac{e^2}{a} \left(\frac{\hbar\omega(n_{\mathbf{k}} + 1)}{N} \right)^{1/2} \frac{1}{c_s \sqrt{M}}.$$

Поскольку $na^3 \sim 1$, $e^2/a \sim p_0^2/m$, $c_s \sqrt{M} \sim v\sqrt{m}$,² получаем

$$V_{\mathbf{p}-\mathbf{h}\mathbf{k};\mathbf{p}} \sim -ip_0 \left(\frac{\hbar\omega(n_{\mathbf{k}} + 1)}{Nm} \right)^{1/2}.$$

Рассмотрим теперь предельные случаи высоких и низких температур.

VI. Температурная зависимость проводимости и теплопроводности 16

VII. Кин.уравнение при наличии магнитного поля 17

VIII. Эффект Холла и магнитосопротивление в слабом магнитном поле 21

IX. Эффект Холла в сильном магнитном поле 23

X. Термоэлектрические явления 28

XI. Термомагнитные явления в слабом магнитном поле 32

XII. Термомагнитные явления в сильном магнитном поле 33

XIII. Нормальный скин-эффект 36

XIV. Аномальный скин-эффект 37

XV. Аномальный скин-эффект. Решение кин.уравнения 40

XVI. Квантовые эффекты в магнитной восприимчивости электронной системы 46

XVII. Эффект де Гааза–ван Альфена

78. Остаточное сопротивление

79. Электрон-фононное взаимодействие

80. Кинетические коэффициенты металла. Высокие температуры

81. Процессы переброса в металле

82. Кинетические коэффициенты металла. Низкие температуры

83. Диффузия электронов по ферми-поверхности

$$s_\alpha = -D_{\alpha\beta} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial p_\beta} - a_\beta \right),$$

$$D_{\alpha\beta} = T^5 \frac{30\zeta(5)}{\pi^2 v_F^2} \left\langle \frac{M(\mathbf{t})}{u^5(\mathbf{t})} t_\alpha t_\beta \right\rangle$$

Плотность тока вычисляется по функциям φ как интеграл

$$\mathbf{j} = -\frac{2e}{(2\pi)^3} \int \varphi \mathbf{n} dS_F.$$

86. Аномальный скин-эффект

2.3.6 О кинетике в сверхпроводниках по Ландау (!!!!!)

96. Высокочастотные свойства сверхпроводников. Общая формула

97. Высокочастотные свойства сверхпроводников. Предельные случаи

98. Теплопроводность сверхпроводника

2.4 Суть квантовой кинетики

2.4.1 Суть уравнения Линдблада

Об уравнениях для матрицы плотности (???)

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{\rho}_I = [\hat{V}_I(t), \hat{\rho}_I(t)]$$

Формальное решение этого уравнения имеет вид

$$\hat{\rho}_I(t) = \hat{\rho}(0) - \frac{i}{\hbar} \int_0^t [\hat{V}_I(t'), \hat{\rho}_I(t')] dt'.$$

Подставляя это выражение в правую часть предыдущего уравнения, получим

$$\frac{d}{dt} \hat{\rho}_I(t) = -\frac{i}{\hbar} [\hat{V}_I(t), \hat{\rho}_I(0)] - \frac{1}{\hbar^2} \int_0^t dt' [\hat{V}_I(t), [\hat{V}_I(t'), \hat{\rho}_I(t')]]$$

$$\hat{H} = \hat{H}_r + \hat{H}_s + \hat{V}$$

$$\hat{V} = ga^\dagger \hat{\sigma}_- + g^* a \hat{\sigma}_+$$

$$\hat{V}_I(t) = ge^{i(\omega-\omega_0)t} a^\dagger \hat{\sigma}_- + g^* e^{-i(\omega-\omega_0)t} a \hat{\sigma}_+.$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \hat{\rho}_I(t) = & -\frac{i}{\hbar} \left(ge^{i(\omega-\omega_0)t} [a^\dagger \hat{\sigma}_-, \hat{\rho}_I(0)] + g^* e^{-i(\omega-\omega_0)t} [a \hat{\sigma}_+, \hat{\rho}_I(0)] \right) - \\ & - \frac{1}{\hbar^2} \int_0^t dt' \left[\left(ge^{i(\omega-\omega_0)t} a^\dagger \hat{\sigma}_- + g^* e^{-i(\omega-\omega_0)t} a \hat{\sigma}_+ \right), \right. \\ & \left. \left(ge^{i(\omega-\omega_0)t'} [a^\dagger \hat{\sigma}_-, \hat{\rho}_I(t')] + g^* e^{-i(\omega-\omega_0)t'} [a \hat{\sigma}_+, \hat{\rho}_I(t')] \right) \right]. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \hat{\rho}_s(t) = & -\frac{|g|^2}{\hbar^2 Z} \sum_n \left(e^{i(\omega-\omega_0)t} \left\langle n \left| [a^\dagger \hat{\sigma}_-, [a \hat{\sigma}_+, \hat{\rho}_s(t) e^{-\beta \hbar \omega a^\dagger a}]] \right| n \right\rangle I_- + \right. \\ & \left. + e^{-i(\omega-\omega_0)t} \left\langle n \left| [a \hat{\sigma}_+, [a^\dagger \hat{\sigma}_-, \hat{\rho}_s(t) e^{-\beta \hbar \omega a^\dagger a}]] \right| n \right\rangle I_+ \right), \quad (471) \end{aligned}$$

где $I_\pm \equiv \int_0^t e^{\pm i(\omega-\omega_0)t'} dt'$

(далее суммирование, соотношения)

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \hat{\rho}_s = & -A \bar{n} ([\hat{\sigma}_-, \hat{\sigma}_+ \hat{\rho}_s] - [\hat{\sigma}_+, \hat{\rho}_s \hat{\sigma}_-]) + \\ & + A(\bar{n} + 1) ([\hat{\sigma}_+, \hat{\sigma}_- \hat{\rho}_s] - [\hat{\sigma}_-, \hat{\rho}_s \hat{\sigma}_+]). \end{aligned}$$

где $A = \frac{|g|^2 \pi G(\omega_0)}{\hbar^2}$.

$$\frac{\bar{\rho}_{11}}{\bar{\rho}_{00}} = \frac{\bar{n}}{\bar{n} + 1} = e^{-\beta \hbar \omega}$$

различные функции Грина (????)

Известно, что

$$G = \begin{pmatrix} G^{--} & G^{-+} \\ G^{+-} & G^{++} \end{pmatrix}$$

$$G_{\alpha\beta}^{-+}(r, t; r', t') = i \langle \psi_{\beta}^{+}(r', t') \psi_{\alpha}(r, t) \rangle$$

$$G_{\alpha\beta}^{+-}(r, t; r', t') = -i \langle \psi_{\alpha}(r, t) \psi_{\beta}^{+}(r', t') \rangle$$

$$G_{\alpha\beta}^{-}(-r, t; r', t') = \theta(t - t') G_{\alpha\beta}^{+-}(r, t; r', t') + \theta(t' - t) G_{\alpha\beta}^{-+}(r, t; r', t')$$

$$G_{\alpha\beta}^{+}(r, t; r', t') = \theta(t - t') G_{\alpha\beta}^{-+}(r, t; r', t') + \theta(t' - t) G_{\alpha\beta}^{+-}(r, t; r', t')$$

Функция распределения

Функция распределения:

$$n(t, \mathbf{R}, \mathbf{p}) = -i \int G_{\omega, \mathbf{p}}^{-+}(t, \mathbf{R}) \frac{d\omega}{2\pi}$$

$$G_{\omega, \mathbf{p}}^{-+}(t, \mathbf{R}) = \int e^{i\omega t - i\mathbf{p}\mathbf{r}} G_{\omega, \mathbf{p}}^{-+}\left(t + \frac{\tau}{2}, \mathbf{R} + \frac{\mathbf{r}}{2}; t - \frac{\tau}{2}, \mathbf{R} - \frac{\mathbf{r}}{2}\right) d\mathbf{r} d\tau$$

$$[\hat{G}_0(0, 1)]^{-1} \hat{G}(1, 2) = \hat{\tau}_3 \delta(X_1 - X_2) + \int \hat{\tau}_3 \hat{\Sigma}(1, 3) \hat{G}(3, 2) d^4 X_3$$

2.4.2 Суть методов функций грина в квантовой кинетике

Функция Грина для свободных и равновесных фермионов (???)

Функция Грина для свободных и равновесных фермионов:

$$\hat{G}^{(0)}(\omega, \mathbf{p}) = \begin{pmatrix} \frac{1-n_F(\xi_p)}{\omega-\xi_p+i\delta} + \frac{n_F(\xi_p)}{\omega-\xi_p-i\delta} & 2\pi n_F(\xi_p) \delta(\omega-\xi_p) \\ -2\pi i (1-n_F(\xi_p)) \delta(\omega-\xi_p) & -\frac{1-n_F(\xi_p)}{\omega-\xi_p-i\delta} - \frac{n_F(\xi_p)}{\omega-\xi_p+i\delta} \end{pmatrix}$$

Квантовые поправки к проводимости

Полная вероятность перехода $W_{A \rightarrow B}$ из точки A в точку B есть

$$W_{A \rightarrow B} = \left| \sum_i A_i \right|^2 = \sum_i |A_i|^2 + \sum_{i \neq j} A_i A_j^*.$$

За время t (много большего времени свободного пробега $\tau \sim l/v$, где $v = p_0/m$ - скорость электрона) за счет рассеяния на случайно расположенных примесях электрону будет доступен объем $V \sim R^2 b$, где $b \leq l$ толщина проводника, а $R^2 = Nl^2$ - среднеквадратичное смещение электрона при случайном рассеянии на $N = vt/l$ примесях, т. е. $V \sim vtlb$. Чтобы за промежуток времени dt электрон вернулся в исходную точку, надо, чтобы конечная точка пути электрона попала в элемент объема $vdt\lambda^2$. Вероятность этого события равна отношению объемов $vdt\lambda^2/(ltvb)$. Тогда относительное изменение проводимости есть

$$\frac{\Delta\sigma}{\sigma} \sim - \int_{\tau}^{\tau_{\phi}} \frac{v\lambda^2 dt}{vltb} \sim - \frac{\lambda^2}{bl} \ln \frac{\tau_{\phi}}{\tau}$$

Сечение неупругого рассеяния электронов на фононах Σ_{e-ph} при низких температурах ($T \ll \theta$ - температуры Дебая) пропорционально плотности числа фононов, которая определяется как

$$\frac{9N}{\omega_{\max}^3} \int_0^{\omega_{\max}} \frac{\omega^2 d\omega}{e^{\hbar\omega/T} - 1} \sim N \left(\frac{T}{\theta} \right)^3 \quad \text{для} \quad T \ll \hbar\omega_{\max} \equiv \theta,$$

где N - плотность числа атомов в решетке.

$$\Delta\varepsilon \approx \frac{\vec{p} \cdot \hbar\vec{k}}{m} = \frac{p\Delta p \cos \phi}{m}$$

$$\Delta\varepsilon \sim T$$

$$\cos \phi \sim \frac{Tmc_s}{pT} \sim \frac{c_s}{v} \ll 1,$$

$$\sum_{i=1}^n (\hbar\vec{k}_i)^2 \sim n(\hbar k)^2 \sim p^2 \rightarrow n \sim \left(\frac{c_s p}{T} \right)^2 \sim T^{-2}.$$

$$\tau_{\phi, e-ph} \sim \frac{n}{\Sigma_{e-ph}} \sim T^{-5}$$

$$\frac{\Delta\sigma}{\sigma} \sim -\frac{\lambda^2}{bl} \ln \frac{c\hbar}{evlH\tau}$$

$$\Delta\sigma(H) - \Delta\sigma(0) \sim -\frac{\lambda^2\sigma}{bl} \ln \frac{evlH\tau_{\phi}}{c\hbar}$$

Таким образом, магнитное поле $H_0 \sim \hbar c / (evl\tau_{\phi})$ подавляет интерференционный вклад траекторий, возвращающихся назад, и увеличивает проводимость.

2.4.3 Типичные явления квантовой кинетики

2.5 Об других типичных методах кинетики

2.5.1 О случайных процессах и математической диффузии

Одномерное движение: дискретное блуждание на прямой

Асимптотическое поведение на больших временах, связь с уравнением диффузии.
Обобщение на случай произвольной размерности пространства.

Уравнение диффузии: возможные типы граничных условий

Одномерное уравнение диффузии

Диффузия в ограниченной области

Возможные граничные условия для уравнения диффузии и их физическая интерпретация.

Отражающие граничные условия

.

Поглощающие граничные условия

.

Граничное условие, задающее постоянную пристеночную концентрацию

задача о случайно расположенных на прямой поглощающих центрах

Сумма большого количества независимых одинаково распределённых случайных величин.

Задача о диффузии на прямой со случайно расположенными поглощающими центрами: принцип формирования статистики;

определение статистики в терминах оптимальных флуктуаций, перемежаемость статистики.

1.5

Закон Аррениуса

Схема построения решения для функции распределения.

Обобщение решения на различные случаи: двумерный случай; случай, когда потенциал в точке перевала имеет особенность типа $-|x|$.

1.7

Проводимость классического газа с трением

Проводимость для модели среды с трением.

Классический эффект Холла.

1.8

Шумы, возникающие за счет активационных переходов

Модель туннельной системы с двумя локальными минимумами.

1.9

Стохастический резонанс

3

Перенос и перемешивание в случайных потоках

Понятие о хаотическом потоке, примеры таких течений.

Перенос примеси потоком. Эйлеров и лагранжевы способы описания.

Диффузия примеси.

Размешивание примеси хаотическим потоком.

2.5.2 О линейном отклике и флуктуационно-диссипативной теореме

(уже в статфизе вроде написал, потом заново напишу это, ну и почитаю специальные книги про это.)

Отклик на механическое возмущение

(по книге Колоколова)

$$\frac{\partial \hat{\rho}_I}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{V}_I, \hat{\rho}_I] - \gamma (\hat{\rho}_I - \hat{\rho}_0)$$

где $\hat{\rho}_0$ - матрица плотности в равновесии. Формальным решением этого уравнения является

$$\hat{\rho}_I(t) = \hat{\rho}_0 - \frac{i}{\hbar} e^{-\gamma t} \int_{-\infty}^t e^{\gamma t'} [\hat{V}_I(t'), \hat{\rho}_I(t')] dt'$$

В первом приближении по возмущению V получаем формулу Кубо:

$$\hat{\rho}_I(t) \approx \hat{\rho}_0 - \frac{i}{\hbar} e^{-\gamma t} \int_{-\infty}^t e^{\gamma t'} [\hat{V}_I(t'), \hat{\rho}_0(t')] dt'.$$

$$\langle j_\alpha \rangle = \sum_l \frac{e}{m} \langle p_{\alpha l} \rangle = \frac{e}{m} \sum_l Sp(\hat{\rho} \hat{p}_{\alpha l}).$$

$$\begin{aligned} Sp(e^{i\hat{H}_0\tau/\hbar} \hat{p}_{\alpha l} [\hat{r}_{\beta j}, \hat{\rho}_0] e^{-i\hat{H}_0\tau/\hbar}) &= Sp(\hat{p}_{\alpha l} [\hat{r}_{\beta j}, \hat{\rho}_0]) = \\ &= Sp(\hat{\rho}_0 [\hat{p}_{\alpha l}, \hat{r}_{\beta j}]) = -i\hbar \delta_{lj} \delta_{\alpha\beta}. \end{aligned}$$

Таким образом, тензор проводимости равен

$$\sigma_{\alpha\beta} = \frac{ine^2}{m(\omega + i\gamma)} \delta_{\alpha\beta}$$

Двухвременные запаздывающие функции Грина

примеры применения

????

Отклик на электрическое поле. Электропроводность

Уравнения Блоха и электронный парамагнитный резонанс (ЭПР)

Part II

—— Special Kinetics in a Nutshell ——

3 О других задачах

(тут очень много специфики, так что раздел наберется большим, но пока тут мало что)

3.1 Об отдельных методах кинетики

3.1.1 Теория неустойчивостей по Ландау

61. Пучковая неустойчивость

62. Абсолютная и конвективная неустойчивость

63. Усиление и непропускание

64. Неустойчивость при слабой связи двух ветвей спектра колебаний

65. Неустойчивость конечных систем

3.1.2 О диаграммной технике для неравновесных систем (???)

(пока по Ландау, но скорее всего и по другим тоже напишу)

- 91. Мацубаровская восприимчивость
- 92. Гриневские функции неравновесной системы
- 93. Диаграммная техника для неравновесных систем
- 94. Собственно-энергетические функции
- 95. Кинетическое уравнение в диаграммной технике

3.2 О другой кинетике в конденсированных средах

3.2.1 О другой кинетике в бесстолкновительной плазме по Ландау

- 35. Плазменное эхо
- 36. Адиабатический захват электронов
- 37. Квазинейтральная плазма
- 38. Гидродинамика двухтемпературной плазмы
- 39. Солитоны в слабо диспергирующей среде
- 40. Диэлектрическая проницаемость вырожденной бесстолкновительной плазмы
- 48. Поглощение в плазме в высокочастотном пределе
- 49. Квазилинейная теория затухания Ландау
- 50. Кинетическое уравнение для релятивистской плазмы
- 51. Флуктуации в плазме

3.2.2 О кинетике в ферми- и бозе-жидкостях по Ландау

- 74. Кинетическое уравнение для квазичастиц в ферми-жидкости
- 75. Теплопроводность и вязкость ферми-жидкости
- 76. Поглощение звука в ферми-жидкости
- 77. Кинетическое уравнение для квазичастиц в бозе-жидкости

3.2.3 О другой кинетике металлов по Ландау

84. Гальваномагнитные явления в сильных полях. Общая теория

Тогда выражение (84, 4) сводится к

$$\frac{dn}{dt} \approx -\frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} e \mathbf{v} \mathbf{E} + \frac{\partial \delta \tilde{n}}{\partial \tau}.$$

Представим $\delta \tilde{n}$ в виде

$$\delta \tilde{n} = \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} e \mathbf{E} \mathbf{g}, \quad \mathbf{g} = \mathbf{g}(\varepsilon, p_z, \tau)$$

(ср. (78, 6)). Тогда окончательно левая сторона кинетического уравнения примет вид

$$\frac{dn}{dt} = \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} e \mathbf{E} \left(-\mathbf{v} + \frac{\partial \mathbf{g}}{\partial \tau} \right).$$

Интеграл же столкновений в правой стороне кинетического уравнения после линеаризации запишем в виде

$$\text{St } n = \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} e \mathbf{E} I(\mathbf{g})$$

- 85. Гальваномагнитные явления в сильных полях. Частные случаи
- 87. Скин-эффект в инфракрасной области
- 88. Геликоидальные волны в металле
- 89. Магнитоплазменные волны в металле
- 90. Квантовые осцилляции проводимости металла в магнитном поле

3.3 О других моделях

3.3.1 О плазме в магнитном поле по Ландау

(не уверен, насколько нужен этот раздел, но ладно, пусть побудет)

- 52. Диэлектрическая проницаемость бесстолкновительной холодной плазмы
- 53. Функция распределения в магнитном поле
- 54. Диэлектрическая проницаемость магнитоактивной максвелловской плазмы
- 55. Затухание Ландау в магнитоактивной плазме
- 56. Электромагнитные волны в магнитоактивной холодной плазме
- 57. Влияние теплового движения на распространение электромагнитных волн в магнитоактивной плазме
- 58. Уравнения гидродинамики магнитоактивной плазмы
- 59. Кинетические коэффициенты плазмы в сильном магнитном поле

Вклад в ток от функции распределения (59, 11 – 12) равен

$$\mathbf{j}^{(2)} = \frac{eN_e}{3\omega_{Be}^2} \nabla_{\perp} \langle v^2 v_{ei}(v) \rangle = \frac{4\sqrt{2\pi z e^5 L_e N_e}}{3m^3/2\omega_{Be}^2} \nabla_{\perp} \frac{P_e}{T^{3/2}}.$$

Для вычисления искомых кинетических коэффициентов надо подставить ток $\mathbf{j}_{\perp} = \mathbf{j}^{(1)} + \mathbf{j}^{(2)}$ в равенство (58, 13)

$$\frac{1}{eN_e} \nabla_{\perp} P_e = \frac{\mathbf{j}_{\perp}}{\sigma_{\perp}} + \Re B[\mathbf{b}\mathbf{j}_{\perp}] + \alpha_{\perp} \nabla_{\perp} T + \mathcal{N}B[\mathbf{b}\nabla_{\perp} T],$$

определяющие эти коэффициенты. Положив сначала $\nabla T = 0$ и собирая члены порядка $1/\omega_{Be}$, найдем, что

$$\mathbf{j}^{(1)}/\sigma_{\perp} + \Re B[\mathbf{b}\mathbf{j}^{(2)}] = 0,$$

откуда

$$\sigma_{\perp} = \frac{3\pi^{1/2} e^2 N_e}{2^{1/2} m v_{ei}}$$

где v_{ei} (без указания аргумента) обозначает

$$v_{ei} = v_{ei}(v_{Te}) = \frac{4\pi z e^4 L_e N_e}{m^{1/2} T^{3/2}}.$$

Электронная теплопроводность

Тепловой поток в плазме складывается как из электронной, так и из ионной частей; рассмотрим сначала первую из них. Электронный тепловой поток вычисляется как интеграл

$$\mathbf{q}_e = \frac{m}{2} \int v^2 \mathbf{v} \delta f_e d^3 p$$

В первом приближении по $1/\omega_{Be}$, подставив сюда (59, 5), находим

$$\mathbf{q}_e^{(1)} = -\frac{m}{2\omega_{Be}} ([br_{\perp}] \langle \mathbf{v} \rangle \mathbf{v} v^2) N_e = -\frac{m}{6\omega_{Be}} [br_{\perp}] N_e \langle v^4 \rangle,$$

откуда

$$\mathbf{q}_e^{(1)} = -\frac{5c}{2eB} [\mathbf{b}\Gamma_{\perp}] P_e T = -\frac{w_e}{e} \mathbf{j}^{(1)} - \frac{5cP_e}{2eB} [\mathbf{b}\nabla_{\perp} T], \quad (59, 20)$$

где $w_e = 5T/2$ -электронная тепловая функция, отнесенная к одному электрону. Сравним с определением коэффициента \mathcal{L} в (58, 14), получим

$$\mathcal{L}_e = -\frac{5cN_e T}{2eB^2}$$

60. Дрейфовое приближение

3.3.2 О кинетике фазовых переходов

99. Одномерное автомодельное движение

100. Разрывы в начальных условиях

101. Одномерные бегущие волны

102. Образование разрывов в звуковой волне

103. Характеристики

3.3.3 О фазовой синхронизации в кинетике (???)

О модели Курамото, Сакагучи-Курамото

Модель Курамото — есть $N \gg 1$ осцилляторов, динамика фазы i -го:

$$\dot{\theta}_i = \Omega_i + \frac{K}{N} \sum_{j=1}^N \sin(\theta_j - \theta_i)$$

где $K \geq 0$ — это константа взаимодействия. Множитель $1/N$ введен, чтобы обеспечить конечность силы взаимодействия в пределе $N \rightarrow \infty$.

Параметр порядка:

$$re^{i\psi} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N e^{i\theta_j}$$

Подставим, используем метод среднего поля (??):

$$\dot{\theta}_i = \omega_i - Kr \sin \theta_i$$

где $\omega_i = \Omega_i - \Omega_0$.

(????)

$$\partial_t n(\theta|\omega) = -\partial_{\theta}[(\omega - Kr \sin \theta)n(\theta|\omega)]$$

$$n_{\text{drift}}(\theta|\omega) = \frac{\sqrt{\omega^2 - K^2 r^2}}{2\pi|\omega - Kr \sin \theta|}$$

Уравнение самосогласования

$$1 = K \int_{-\pi/2}^{+\pi/2} d\theta \cos^2 \theta g(\Omega_0 + Kr \sin \theta)$$

(?? получается из расписывание параметра порядка (???))

Разложим, получим критическое значение, после которого есть решения

$$K_c = \frac{2}{\pi g(\Omega_0)}$$

Модель Сакагучи-Курамото

$$\dot{\theta}_i = \Omega_i + \frac{K}{N} \sum_{j=1}^N \sin(\theta_j - \theta_i) + \xi_i$$

где $\langle \xi_i(t) \rangle = 0$, $\langle \xi_i(t_1) \xi_j(t_2) \rangle = 2D\delta_{ij}\delta(t_1 - t_2)$. Преобразуем

$$\dot{\theta}_i = \omega_i - Kr \sin \theta_i + \xi_i,$$

где $\omega_i = \Omega_i - \Omega_0$ - расстройка фазы.

Эволюция условной плотности распределения $n(\theta|\omega)$ фазы осциллятора при заданном значении расстройки его частоты ω описывается уравнением Фоккера-Планка

$$\partial_t n(\theta|\omega) = -\partial_\theta[(\omega - Kr \sin \theta)n(\theta|\omega)] + D\partial_\theta^2 n(\theta|\omega)$$

$$K_c(D) = \frac{2}{D} \left[\int_{-\infty}^{+\infty} g(\omega + \Omega_0) \frac{d\omega}{D^2 + \omega^2} \right]^{-1}$$

Общие указания для решения таких задач (????)

3.3.4 Об образовании зародышей (????)

(тоже есть тут теория про это, пока не до нее.)

Основные формулы

3.4 О других приложениях (????)

(потом мб увеличу разделы, пока малые они, потому что не так много этим занимался.)

3.4.1 О кинетике полимеров (!!???)

(тут крутые штуки, потом напишу, уже почти готов.)

3.4.2 О кинетике в космологии (???)

(там тоже типичные уравнения про нее есть.)

Part III

Fundamental Kinetic Laws and Equations

4 Подход кинетики

Обсудим конструкции, которые лежат в основе кинетики, которые далее используются в различных задачах.

(тут минимально примеров и нет фокуса на газы. про газы - чисто следующая глава!!!)

4.1 Основы построения кинетических теорий и их решений

(я хз, что писать, пусть повесит раздел, мб потом придумаю что-то. тренироваться нужно, вот что!)

4.1.1 Философия в основе физической кинетики

(???? пропишу потом все это подробнее, все-таки такое тоже есть, пусть сразу это и не видно.)

4.1.2 Принцип детального равновесия

мотивация

???

чет пока не могу сказать, где он нужен так что пока что опустил

идейно полезно понимать, что происходит.

основные свойства столкновений просматриваем подробно.

короче, пока ее не дожал, ну да и потом вернусь, чисто такая теория.

принцип детального равновесия в двух словах

(???)

что у нас столкновений в одну сторону столько же, сколько в обратную????

Принцип детального равновесия утверждает, что в равновесии число столкновений с переходом $\Gamma, \Gamma_1 \rightarrow \Gamma', \Gamma'_1$ равно числу столкновений с переходом $\Gamma'^T, \Gamma'^T_1 \rightarrow \Gamma^T, \Gamma^T_1$.

Здесь мы имеем дело с «детальным равновесием» в буквальном смысле этого слова: каждый микроскопический процесс столкновений балансируется обратным ему процессом.

теория

Рассмотрим столкновения молекул, из которых одна обладает значениями величин Γ , лежащими в заданном интервале $d\Gamma$, а другая - в интервале $d\Gamma_1$, причем в результате столкновения эти молекулы приобретают значения Γ в интервалах соответственно $d\Gamma'$ и $d\Gamma'_1$;

для краткости будем говорить просто о столкновениях молекул Γ и Γ_1 с переходом

$$\Gamma, \Gamma_1 \rightarrow \Gamma', \Gamma'_1.$$

Полное число таких столкновений, отнесенное к единице времени и к единице объема газа:

$$f(t, \mathbf{r}, \Gamma) d\Gamma$$

можно написать в виде произведения числа молекул в единице объема $f(t, \mathbf{r}, \Gamma) d\Gamma$ на вероятность каждой из них испытать столкновение рассматриваемого типа.

Эта вероятность пропорциональна числу молекул Γ_1 в единице объема $f(t, \mathbf{r}, \Gamma_1) d\Gamma_1$ и интервалам $d\Gamma', d\Gamma'_1$ значений величин Γ обеих молекул после столкновения.

Таким образом, число столкновений с переходом $\Gamma, \Gamma_1 \rightarrow \Gamma', \Gamma'_1$, происходящих в 1 с в 1см^3 , можно представить в виде

$$w(\Gamma', \Gamma'_1; \Gamma, \Gamma_1) f f_1 d\Gamma d\Gamma_1 d\Gamma' d\Gamma'_1$$

(здесь и ниже индексы у функций f отвечают индексам их аргументов $\Gamma: f_i \equiv f(t, \mathbf{r}, \Gamma_i), f' \equiv f(t, \mathbf{r}, \Gamma')$ и т. п.);

коэффициент w есть некоторая функция всех перечисленных в ней аргументов Γ .

Отношение $w d\Gamma' d\Gamma'_1$ к абсолютной величине относительной скорости $\mathbf{v} - \mathbf{v}_1$ сталкивающихся молекул имеет размерность площади и представляет собой эффективное сечение столкновений:

$$d\sigma = \frac{w(\Gamma', \Gamma'_1; \Gamma, \Gamma_1)}{|\mathbf{v} - \mathbf{v}_1|} d\Gamma' d\Gamma'_1$$

Функция w может быть определена в принципе лишь путем решения механической задачи о столкновении частиц, взаимодействующих по данному закону.

Но некоторые свойства этой функции могут быть выяснены уже на основании общих соображений.

Как известно, вероятность столкновения обладает важным свойством, следующим из симметрии законов механики (классической или квантовой), относительно обращения знака времени (см. III, § 144, ага, уже пошел квантмех переучивать).

Обозначим посредством Γ^T значения величин, получающихся из Γ при обращении времени.

Эта операция меняет знаки всех импульсов и моментов; поэтому если $\Gamma = (\mathbf{p}, \mathbf{M})$, то $\Gamma^T = (-\mathbf{p}, -\mathbf{M})$.

Поскольку обращение времени переставляет состояния «до» и «после» столкновения, то

$$w(\Gamma', \Gamma'_1; \Gamma, \Gamma_1) = w(\Gamma^T, \Gamma_1^T; \Gamma'^T, \Gamma_1'^T)$$

Отметим, что это соотношение обеспечивает выполнение в состоянии статистического равновесия принципа детального равновесия, согласно которому в равновесии число столкновений с переходом $\Gamma, \Gamma_1 \rightarrow \Gamma', \Gamma'_1$ равно числу столкновений с переходом $\Gamma'^T, \Gamma_1'^T \rightarrow \Gamma^T, \Gamma_1^T$.

Действительно, представив эти числа в виде (2, 1), имеем

$$\begin{aligned} w(\Gamma', \Gamma'_1; \Gamma, \Gamma_1) f_0 f_{01} d\Gamma d\Gamma_1 d\Gamma' d\Gamma'_1 = \\ = f(\Gamma^T, \Gamma_1^T; \Gamma'^T, \Gamma_1'^T) f'_0 f'_{01} d\Gamma^T d\Gamma_1^T d\Gamma'^T d\Gamma_1'^T \end{aligned}$$

где f_0 -равновесная (больцмановская) функция распределения.

Произведение элементов фазового объема $d\Gamma d\Gamma_1 d\Gamma' d\Gamma'_1$ при обращении времени не меняется;

поэтому дифференциалы в обеих сторонах написанного равенства можно опустить.

Далее, при замене t на $-t$ энергия не меняется: $\varepsilon(\Gamma) = \varepsilon(\Gamma^T)$, где $\varepsilon(\Gamma)$ - энергия молекулы как функция величин Γ .

Поскольку равновесная функция распределения (в неподвижном как целое газе) зависит только от энергии,

$$f_0(\Gamma) = \text{const} \cdot e^{-\varepsilon(\Gamma)/T},$$

где T -температура газа, то и $f_0(\Gamma) = f_0(\Gamma^T)$.

Наконец, в силу закона сохранения энергии при столкновении двух молекул $\varepsilon + \varepsilon_1 = \varepsilon' + \varepsilon'_1$. Поэтому

$$f_0 f_{01} = f'_0 f'_{01}$$

и написанное выше равенство сводится к (2, 3). Это утверждение остается, конечно, справедливым и для газа, движущегося с макроскопической скоростью \mathbf{V} .

Равновесная функция распределения в таком случае есть

$$f_0(\Gamma) = \text{const} \cdot \exp\left(-\frac{\varepsilon(\Gamma) - \mathbf{pV}}{T}\right)$$

и равенство (2,5) продолжает соблюдаться.

В силу сохранения импульса при столкновениях: $\mathbf{p} + \mathbf{p}_1 = \mathbf{p}' + \mathbf{p}'_1$.

Обратим внимание на то, что равенство (2,5) связано только с видом распределения (2,4) или (2,5) как функции величин Γ ; параметры же T и \mathbf{V} могут при этом меняться по объему газа.

вторая формулировка

Принципу детального равновесия можно придать также и несколько иную формулировку.

Для этого произведем наряду с обращением времени еще и инверсию - изменение знака всех Координат.

Если молекулы не обладают достаточной симметрией, то при инверсии они «перейдут» в стереоизомерные молекулы, с которыми они не могут быть совмещены никаким поворотом молекулы как целого (????).

Другими словами, в таких случаях преобразование инверсии означало бы замену газа по существу другим (стереоизомерным) веществом и никаких новых заключений о свойствах его самого нельзя было бы сделать.

Если же симметрия молекул не допускает стереоизомерии, то при инверсии газ остается тем же и величины, описывающие свойства макроскопически однородного газа, должны остаться неизменными.

Обозначим посредством Γ^{TP} совокупность величин, получающихся из Γ одновременным обращением времени и инверсии.

Инверсия меняет знак всех обычных (полярных) векторов, в том числе импульса \mathbf{p} , и оставляет неизменными аксиальные векторы, в том числе вектор момента \mathbf{M} .

Поэтому, если $\Gamma = (\mathbf{p}, \mathbf{M})$, то $\Gamma^{TP} = (\mathbf{p}, -\mathbf{M})$.

Наряду с равенством (2,3) будем иметь также и равенство

$$w(\Gamma', \Gamma'_1; \Gamma, \Gamma_1) = w(\Gamma^{TP}, \Gamma_1^{TP}; \Gamma'^{TP}, \Gamma_1'^{TP})$$

О переходах, к которым относятся функции w в обеих сторонах равенства (2,3), говорят как об обращенных по времени по отношению друг к другу.

Они не являются в буквальном смысле прямым и обратным, поскольку отличаются значениями Γ (Γ . и Γ^T).

Для одноатомного газа, однако, принцип детального равновесия может быть сформулирован также и в терминах прямых и обратных переходов.

Поскольку величинами Γ являются здесь всего три компоненты импульса атома, то $\Gamma = \Gamma^{TP} = \mathbf{p}$ и из (2,7) имеем

$$w(\mathbf{p}', \mathbf{p}'_1; \mathbf{p}, \mathbf{p}_1) = w(\mathbf{p}, \mathbf{p}_1; \mathbf{p}', \mathbf{p}'_1)$$

Здесь мы имеем дело с «детальным равновесием» в буквальном смысле этого слова: каждый микроскопический процесс столкновений балансируется обратным ему процессом.

Функция w удовлетворяет еще одному общему соотношению, не имеющему отношения к симметрии относительно обращения времени.

Вывод этого соотношения более нагляден, если производить его в квантовомеханических терминах, рассматривая переходы между состояниями, образующими дискретный ряд;

речь идет о состояниях пары молекул, движущихся в заданном конечном объеме.

Как известно, амплитуды вероятностей различных процессов столкновения образуют унитарную матрицу \hat{S} (так называемая матрица рассеяния, или S -матрица).

Условие унитарности гласит: $\hat{S}^+ \hat{S} = 1$, или, в явном виде с матричными индексами (нумерующими различные состояния),

$$\sum_n S_{in}^+ S_{nk} = \sum_n S_{ni}^* S_{nk} = \delta_{ik}$$

В частности, при $i = k$

$$\sum_n |S_{ni}|^2 = 1$$

Квадрат $|S_{ni}|^2$ определяет вероятность столкновения с переходом $i \rightarrow n$, и написанное равенство выражает собой просто условие нормировки вероятностей: сумма вероятностей всех возможных переходов из заданного начального состояния равна единице.

Но условие унитарности можно написать и в виде $\hat{S} \hat{S}^+ = 1$ с другим порядком множителей \hat{S} и \hat{S}^+ .

Тогда получим $\sum_n S_{in} S_{kn}^* = \delta_{ik}$ и при $i = k$

$$\sum_n |S_{in}|^2 = 1$$

т. е. равна единице также и сумма вероятностей всех возможных переходов в заданное конечное состояние.

Исключив из обеих сумм по одному члену с $n = i$ (переход без изменения состояния), напомним

$$\sum_n' |S_{ni}|^2 = \sum_n' |S_{in}|^2$$

Это и есть искомое равенство. В терминах функций w оно запишется в виде

$$\int w(\Gamma', \Gamma_1'; \Gamma, \Gamma_1) d\Gamma' d\Gamma_1' = \int w(\Gamma, \Gamma_1; \Gamma', \Gamma_1') d\Gamma' d\Gamma_1'.$$

(и что с этого???? как же тупо Ландау написал конечно... ничего из этого как бы и не следует, типа думайте сами)

4.1.3 Уравнение Ланжевена как модель

Обсудим подробно уравнение Ланжевена с точки зрения стохастических процессов. Модели с ним разберем подробно в других разделах.

Теория

Вывод уравнения Ланжевена

Функция распределения (???) (?? тут все формулы про нее, пока не понимаю, откуда такие формулы взялись)

Получим функцию распределения $n(x; t)$ случайной величины $x(t)$:

$$n(\vec{r}; t) = \int \frac{dq}{2\pi} e^{iqx} \left\langle e^{-iq(x(0) + \int_0^t \xi(t') dt')} \right\rangle$$

Процесс Винера

Основные свойства процесса Винера Рассмотрим одномерное уравнение Ланжевена без внешней силы

$$\frac{dx(t)}{dt} = \xi(t).$$

Тут $\xi(t)$ - гауссов белый шум, то есть случайная величина с нулевым средним $\langle \xi_\alpha(t) \rangle = 0$ и парной корреляционной функцией $\langle \xi(t_1) \xi(t_2) \rangle = 2D\delta(t_1 - t_2)$.

Его решение задает так называемый процесс Винера:

$$x(t) = x(0) + \int_0^t dt' \xi(t')$$

Поэтому после усреднения $\langle \xi_\alpha(t) \rangle = 0$ получаем, что

$$\langle x(t) \rangle = x(0).$$

Второй момент находим также перемножением первых. У нас остается только два члена и далее для упрощения подставим свойства ξ :

$$\begin{aligned} \langle x^2(t) \rangle &= x^2(0) + \int_0^t \int_0^t dt_1 dt_2 \langle \xi(t_1) \xi(t_2) \rangle = \\ &= x^2(0) + 2D \int_0^t \int_0^t dt_1 dt_2 \delta(t_2 - t_1) = \\ &= x^2(0) + 2Dt \end{aligned}$$

Функция распределения в процессе Винера Функцию распределения $n(x; t)$ случайной величины $x(t)$ в момент времени t найдем так:

$$\begin{aligned} n(\vec{r}; t) &= \int \frac{dq}{2\pi} e^{iqx} \left\langle e^{-iqr(t)} \right\rangle = \int \frac{dq}{2\pi} e^{iqx} \left\langle e^{-iq(x(0) + \int_0^t \xi(t') dt')} \right\rangle = \\ &= \int \frac{dq}{2\pi} e^{iq(x-x(0))} \left\langle e^{-iq\tau_c \sum_{l=0}^{t/\tau_c} \xi(l\tau_c)} \right\rangle = \\ &= \int \frac{dq}{2\pi} e^{iq(x-x(0))} \left\langle \prod_{l=0}^{t/\tau_c} e^{-iq\tau_c \xi(l\tau_c)} \right\rangle = \\ &= \int \frac{dq}{2\pi} e^{iq(x-x(0))} \prod_{l=0}^{t/\tau_c} \left\langle e^{-iq\tau_c \xi(l\tau_c)} \right\rangle = \\ &= \int \frac{dq}{2\pi} e^{iq(x-x(0))} \left(e^{-q^2 \sigma_\xi^2 \tau_c^2 / 2} \right)^{t/\tau_c} = \\ &= \int \frac{dq}{2\pi} e^{iq(x-x(0)) - q^2 Dt} = \\ &= \frac{1}{\sqrt{4Dt}} e^{-\frac{(x-x(0))^2}{4Dt}}. \end{aligned}$$

Ожидаемо, получили гауссово распределение. Тут мы представили интеграл в виде суммы, далее вынесли сумму из экспоненты как произведение, далее применили выведенную формулу для усреднения $\langle e^{-iq\tilde{r}(t)} \rangle \approx e^{-q^2 Dt}$, далее вычислил гауссов интеграл вида $\int dx e^{Ax-Bx^2} = e^{A^2/(4B)} \sqrt{\frac{\pi}{B}}$.

Другое о процессе Винера

Процесс Орнштейна-Уленбека

Основные свойства процесса Орнштейна-Уленбека Рассмотрим одномерное уравнение Ланжевена с гармонической внешней силой

$$\frac{dx(t)}{dt} = -\mu k x(t) + \xi(t)$$

Тут $\xi(t)$ - гауссов белый шум, то есть случайная величина с нулевым средним $\langle \xi_\alpha(t) \rangle = 0$ и парной корреляционной функцией $\langle \xi(t_1) \xi(t_2) \rangle = 2D \delta(t_1 - t_2)$.

Его решение называется процессом Орнштейна-Уленбека и имеет вид:

$$x(t) = x(0)e^{-\mu kt} + e^{-\mu kt} \int_0^t dt' e^{\mu kt'} \xi(t').$$

Для его получения мы просто решили обычным образом простой диффур методом вариации постоянной.

Из $\langle \xi_\alpha(t) \rangle = 0$ сразу получаем, что первый момент равен

$$\langle x(t) \rangle = x(0)e^{-\mu kt}.$$

Второй момент тоже находится элементарно, но уже интегрированием коррелятора:

$$\begin{aligned} \langle x^2(t) \rangle &= x^2(0)e^{-2\mu kt} + e^{-2\mu kt} \int_0^t \int_0^t dt_1 dt_2 e^{\mu k(t_1+t_2)} \langle \xi(t_1) \xi(t_2) \rangle = \\ &= x^2(0)e^{-2\mu kt} + 2De^{-2\mu kt} \int_0^t \int_0^t dt_1 dt_2 e^{\mu k(t_1+t_2)} \delta(t_2 - t_1) = \\ &= x^2(0)e^{-2\mu kt} + \frac{D}{\mu k} (1 - e^{-2\mu kt}). \end{aligned}$$

Функция распределения в процессе Орнштейна-Уленбека Найдем функцию распределения $n(x; t)$ случайной величины $x(t)$ так:

$$\begin{aligned}
 n(\vec{r}; t) &= \int \frac{dq}{2\pi} e^{iqx} \left\langle \exp \left[-iq \left(x(0)e^{-\mu kt} + e^{-\mu kt} \int_0^t dt' e^{\mu kt'} \xi(t') \right) \right] \right\rangle = \\
 &= \int \frac{dq}{2\pi} e^{iq(x-x(0)e^{-\mu kt})} \left\langle e^{-iq\tau_c e^{-\mu kt} \sum_{l=0}^{t/\tau_c} \exp(\mu kl\tau_c) \xi(l\tau_c)} \right\rangle = \\
 &= \int \frac{dq}{2\pi} e^{iq(x-x(0)e^{-\mu kt})} \left\langle \prod_{l=0}^{t/\tau_c} e^{-iq\tau_c \exp(-\mu kt + \mu kl\tau_c) \xi(l\tau_c)} \right\rangle = \\
 &= \int \frac{dq}{2\pi} e^{iq(x-x(0)e^{-\mu kt})} \prod_{l=0}^{t/\tau_c} \left\langle e^{-iq\tau_c \exp(-\mu kt + \mu kl\tau_c) \xi(l\tau_c)} \right\rangle = \\
 &= \int \frac{dq}{2\pi} e^{iq(x-x(0)e^{-\mu kt})} \prod_{l=0}^{t/\tau_c} e^{-q^2 \frac{\sigma_\xi^2}{2} \tau_c^2 \exp(-2\mu kt + 2\mu kl\tau_c)} = \\
 &= \int \frac{dq}{2\pi} e^{iq(x-x(0)e^{-\mu kt})} \exp \left[-q^2 D e^{-2\mu kt} \sum_{l=0}^{t/\tau_c} \tau_c e^{2\mu kl\tau_c} \right] = \\
 &= \int \frac{dq}{2\pi} e^{iq(x-x(0)e^{-\mu kt})} \exp \left[-q^2 D e^{-2\mu kt} \int_0^t dt' e^{2\mu kt'} \right] = \\
 &= \int \frac{dq}{2\pi} e^{iq(x-x(0)) - \frac{q^2 D}{2\mu k} (1 - e^{-2\mu kt})} = \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2\pi \frac{D}{\mu k} (1 - e^{-2\mu kt})}} \exp \left[-\frac{(x - x(0)e^{-\mu kt})^2}{2 \frac{D}{\mu k} (1 - e^{-2\mu kt})} \right].
 \end{aligned}$$

Тут мы сперва разделили интеграл на сумму, вынесли сумму в произведение, занесли усреднение под каждый множитель, применили $\langle e^{-iq\tilde{r}(t)} \rangle \approx e^{-q^2 D t}$, далее внесли произведение, получили снова интеграл, его вычислили, и в итоге вычислили изначальный гауссов интеграл вида $\int dx e^{Ax - Bx^2} = e^{A^2/(4B)} \sqrt{\frac{\pi}{B}}$.

Вывод в том, что гармоническая сила (как и однородная) не нарушает гауссовости крупномасштабной статистики броуновского движения.

О приложениях уравнения Ланжевена (?)

(потом напишу)

Об уравнении Ланжевена по Тонгу (???)

(??? что-то он тоже написал, но я хз пока, что.)

4.1.4 Н-теорема Больцмана о неубывании энтропии

В термодинамике и кинетической теории, Н-теорема, полученная Больцманом в 1872 году, описывает неубывание энтропии идеального газа в необратимых процессах, исходя из уравнения Больцмана.

На первый взгляд может показаться, что она описывает необратимое возрастание энтропии исходя из микроскопических обратимых уравнений динамики.

В своё время этот результат вызвал бурные споры.

мотивация

???

о чем тут спорить можно? что тут такого интересного?

обзор следствий и применений Н-теоремы

(???)

Следствие H -теоремы Больцмана диагональные элементы оператора Ω неотрицательны:

$$\eta_{ikik} \geq 0$$

доказательство возрастание энтропии при переходе к равновесию через кинетическое уравнение

Предоставленный самому себе газ, как и всякая замкнутая макроскопическая система, стремится перейти в равновесное состояние.

Соответственно эволюция неравновесной функции распределения согласно кинетическому уравнению должна сопровождаться возрастанием энтропии газа.

Покажем, что это действительно так.

Как известно, энтропия идеального газа, находящегося в неравновесном макроскопическом состоянии, описываемом функцией распределения f , равна

$$S = \int f \ln \frac{e}{f} dV d\Gamma$$

(см. V, § 40).

Дифференцируя это выражение по времени, пишем

$$\frac{dS}{dt} = \int \frac{\partial}{\partial t} \left(f \ln \frac{e}{f} \right) dV d\Gamma = - \int \ln f \frac{\partial f}{\partial t} dV d\Gamma$$

Поскольку установление статистического равновесия в газе осуществляется столкновениями молекул, то возрастание энтропии должно быть связано именно со столкновительной частью изменения функции распределения.

Изменение же этой функции, связанное со свободным движением молекул, не может изменить энтропии газа.

Действительно, эта часть изменения функции распределения дается (для газа во внешнем поле $U(\mathbf{r})$) первыми двумя членами в правой стороне уравнения

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\mathbf{v} \nabla f - \mathbf{F} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} + \text{St} f$$

Их вклад в производную dS/dt равен

$$- \int \ln f \left[-\mathbf{v} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} - \mathbf{F} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} \right] dV d\Gamma = \int \left[\mathbf{v} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{F} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \right] \left(f \ln \frac{f}{e} \right) dV d\Gamma$$

Но интеграл по dV от члена с производной $\partial/\partial \mathbf{r}$ преобразуется согласно теореме Гаусса в интеграл по поверхности; при интегрировании по всему объему газа он обращается в нуль, поскольку за пределами занимаемого газом объема $f = 0$.

Аналогичным образом, член с производной $\partial/\partial \mathbf{p}$ при интегрировании по d^3p преобразуется в интеграл по бесконечно удаленной поверхности в импульсном пространстве и тоже обращается в нуль.

Таким образом, для изменения энтропии остается

$$\frac{dS}{dt} = - \int \ln f \cdot \text{St } f d\Gamma dV$$

Этот интеграл можно преобразовать с помощью приема, который мы сформулируем в общем виде для интеграла

$$\int \varphi(\Gamma) \text{St } f d\Gamma$$

где $\varphi(\Gamma)$ - любая функция величин Γ .

Представив интеграл столкновений в виде (3,6), пишем

$$\int \varphi(\Gamma) \text{St } f d\Gamma = \int \varphi' w(\Gamma, \Gamma_1; \Gamma', \Gamma'_1) f' f'_1 d^4\Gamma - \int \varphi w(\Gamma', \Gamma'_1; \Gamma, \Gamma_1) f f_1 d^4\Gamma$$

где для краткости обозначено $d^4\Gamma = d\Gamma d\Gamma_1 d\Gamma' d\Gamma'_1$.

Поскольку интегрирование производится здесь по всем переменным $\Gamma, \Gamma_1, \Gamma', \Gamma'_1$, то можно, не меняя интеграла, произвести любое переобозначение переменных.

Взаимно переобозначив Γ, Γ_1 и Γ', Γ'_1 во втором интеграле, получим

$$\int \varphi(\Gamma) \text{St } f d\Gamma = \int (\varphi - \varphi') w(\Gamma, \Gamma_1; \Gamma', \Gamma'_1) f' f'_1 d^4\Gamma$$

Переобозначив теперь $\Gamma, \Gamma' \leftrightarrow \Gamma_1, \Gamma'_1$, взяв полусумму получающихся таким образом интегралов и учтя очевидную симметрию функции по отношению к двум сталкивающимся частицам, получим формулу преобразования

$$\int \varphi(\Gamma) \text{St } f d\Gamma = \frac{1}{2} \int (\varphi + \varphi_1 - \varphi' - \varphi'_1) w' f' f'_1 d^4\Gamma$$

В частности, интеграл $\int \text{St } f d\Gamma = 0$; представив здесь $\text{St } f$ в виде (3, 7), получим

$$\int \text{St } f d\Gamma = \int w' (f' f'_1 - f f_1) d^4\Gamma = 0$$

В применении к интегралу (4,3) формула (4,4) дает

$$\frac{dS}{dt} = \frac{1}{2} \int w' f' f'_1 \ln \frac{f' f'_1}{f f_1} d^4\Gamma dV = \frac{1}{2} \int w' f f_1 x \ln x d^4\Gamma dV$$

где обозначено $x = f' f'_1 / f f_1$. Вычтя из этого выражения половину равного нулю интеграла (4, 5), перепишем его в виде

$$\frac{dS}{dt} = \frac{1}{2} \int w' f f_1 (x \ln x - x + 1) d^4\Gamma dV$$

Функция в скобках в подинтегральном выражении неотрицательна при всех $x > 0$: она равна нулю при $x = 1$ и возрастает по обе стороны от этой точки. По оп ределению положжтельны такАе и множители w', f, f_1 под знаком интеграла. Таким обра 3Ом, мы приходим к требуемому результату

$$\frac{dS}{dt} \geq 0$$

выражающему собой закон неубывания энтропии.

Обратим внимание на то, что в силу неотрицательности подинтегрального выражения в (4, 6) (а тем самым и в (4,3)) положителен не только весь интеграл (4,3) по $d\Gamma dV$, но и интеграл только по $d\Gamma$.

Другими словами, столкновения приводят к возрастанию энтропии в каждом элементе объема газа.

Это, конечно, не значит, что энтропия вообще возрастает в каждом элементе объема, так как она может переноситься из одного участка в другой за счет свободного движения молекул.

важность теоремы и ее применения

важность в том, что казалось бы, из обратимых процессов не должна неубывать энтропия.

однако всё хорошо.

запишу потом это.

4.1.5 Случайные силы

4.1.6 Корреляторы

4.2 Уравнение Больцмана

уравнение Больцмана играет центральную роль в кинетике, так что хотелось бы как можно скорее освоиться с его применением.

4.2.1 Вывод и свойства уравнения Больцмана

формализм в подходе Больцмана

Определим динамику функции распределения $f(t, \mathbf{r}, \mathbf{\Gamma})$.

Если столкновениями молекул можно было бы пренебречь вовсе, то каждая молекула газа представляла бы собой замкнутую подсистему и для функции распределения молекул была бы

$$\frac{df}{dt} = 0$$

Полная производная означает здесь дифференцирование вдоль фазовой траектории молекулы, определяемой ее уравнениями движения.

Напомним, что теорема Лиувилля имеет место для функции распределения, определенной именно как плотность в фазовом пространстве (т. е. в пространстве переменных, являющихся канонически сопряженными обобщенными координатами и импульсами).

Это обстоятельство не мешает, конечно, тому, что сама функция f может быть затем выражена и через любые другие переменные.

В отсутствие внешнего поля величины $\mathbf{\Gamma}$ свободно движущейся молекулы остаются постоянными и меняются только ее координаты \mathbf{r} ; при этом

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \nabla f$$

Если же газ находится, например, во внешнем поле $U(\mathbf{r})$, действующем на координаты центра инерции молекулы, то

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \nabla f + \mathbf{F} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}}$$

где $\mathbf{F} = -\nabla U$ -сила, действующая на молекулу со стороны поля.

уравнение Больцмана в случае столкновений

Учет столкновений нарушает постоянство функции распределения вдоль фазовых траекторий, то есть вместо $\frac{df}{dt} = 0$, надо писать

$$\frac{df}{dt} = \text{St } f$$

где символ $\text{St } f$ означает скорость изменения функции распределения благодаря столкновениям: $dV d\Gamma \cdot \text{St } f$ есть отнесенное к единице времени изменение за счет столкновений числа молекул в фазовом объеме $dV d\Gamma$.

Распишем полные производные через частные:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\mathbf{v} \nabla f + \text{St } f.$$

Это уравнение определяет полное изменение функции распределения в заданной точке фазового пространства;

член $dV d\Gamma (\mathbf{v} \nabla f)$ есть убыль (в 1 с) числа молекул в заданном элементе фазового пространства, связанная с их свободным движением.

Величину $\text{St } f$ называют интегралом столкновений.

появление интеграла столкновений и его первые преобразования

????? что такое w ?????

кинетическое уравнение приобретает реальный смысл лишь после установления вида интеграла столкновений.

К этому вопросу мы сейчас и перейдем.

При столкновении двух молекул значения их величин Γ меняются.

Поэтому всякое столкновение, испытанное молекулой, выводит ее из заданного интервала $d\Gamma$; о таких столкновениях говорят как об актах «ухода».

Полное число столкновений с переходами $\Gamma, \Gamma_1 \rightarrow \Gamma', \Gamma'_1$ со всеми возможными значениями $\Gamma_1, \Gamma', \Gamma'_1$ при заданном Γ , происходящих в единицу времени в объеме dV , равно интегралу

$$dV d\Gamma \int w(\Gamma', \Gamma'_1; \Gamma, \Gamma_1) f f_1 d\Gamma_i d\Gamma'_1$$

Происходят, однако, и такие столкновения («приход»), в результате которых молекулы, обладавшие первоначально значениями величин Γ , лежащими вне заданного интервала $d\Gamma$, попадают в этот интервал.

Это-столкновения с переходами $\Gamma', \Gamma'_1 \rightarrow \Gamma, \Gamma_1$ снова со всеми возможными $\Gamma_1, \Gamma', \Gamma'_1$ при заданном Γ .

Полное число таких столкновений (в единицу времени в объеме dV) равно

$$dV d\Gamma \int w(\Gamma, \Gamma_1; \Gamma', \Gamma'_1) f' f'_1 d\Gamma_1 d\Gamma' d\Gamma'_i$$

Вычтя число актов ухода из числа актов прихода, найдем таким образом, что в результате всех столкновений рассматриваемое число молекул увеличивается в 1 с на

$$dV d\Gamma \int (w' f' f'_1 - w f f_1) d\Gamma_1 d\Gamma' d\Gamma'_1$$

где для краткости обозначено $w \equiv w(\Gamma', \Gamma'_1; \Gamma, \Gamma_1)$, $w' \equiv w(\Gamma, \Gamma_1; \Gamma', \Gamma'_1)$.

Таким образом, находим следующее выражение для интеграла столкновений:

$$\text{St } f = \int (w' f' f'_1 - w f f_1) d\Gamma_i d\Gamma' d\Gamma'_1$$

Во втором члене в подынтегральном выражении интегрирование по $d\Gamma' d\Gamma'_1$ относится только к функции w ; множители f, f_1 от этих переменных не зависят.

Поэтому эту часть интеграла можно преобразовать с помощью соотношения унитарности (2, 9).

В результате интеграл столкновений примет вид

$$\text{St}f = \int w' (f' f'_1 - f f_1) d\Gamma_1 d\Gamma' d\Gamma'_1$$

в котором оба члена входят с одинаковым коэффициентом w' .

Установив вид интеграла столкновений, мы тем самым получили возможность написать кинетическое уравнение

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \nabla f = \int w' (f' f'_1 - f f_1) d\Gamma_1 d\Gamma' d\Gamma'_1$$

Это интегро-дифференциальное уравнение называют также уравнением Больцмана.

Оно было впервые установлено основателем кинетической теории Людвигом Больцманом в 1872 г.

равновесное состояние - частный случай кинетического уравнения

Равновесное статистическое распределение должно удовлетворять кинетическому уравнению тождественным образом.

Это условие действительно выполняется.

Равновесное распределение стационарно и (в отсутствие внешнего поля) однородно; поэтому (2,5) обращается в нуль подынтегральное выражение.

Удовлетворяет кинетическому уравнению, конечно, и равновесное распределение для газа во внешнем поле.

Достаточно вспомнить, что левая часть кинетического уравнения есть полная производная df/dt , тождественно обращающаяся в нуль для всякой функции f , зависящей только от интегралов движения; равновесное же распределение выражается только через интеграл движения - полную энергию молекулы $\varepsilon(\Gamma)$.

В изложенном выводе кинетического уравнения столкновения происходящие в одной точке пространства. Ясно поэтому, что Кинетическое уравнение позволяет в принципе следить за изменением функции распределения лишь за промежутки времени, большие по сравнению с длительностью столкновений, и на рас-

??

вения.

Последние порядка величины радиуса действия молеку-

???

ностей, рассмотрение которых допускается кинетическим уравнением (к происхождению этих ограничений мы вернемся еще в § 16).

Но фактически обычно нет необходимости (да и возможности) в столь детальном описании поведения системы; для этого понадобилось бы, в частности, и задание начальных условий (пространственного распределения молекул газа) с такой же точностью, что фактически неосуществимо.

В реальных физических вопросах существуют характерные параметры длины L и времени T , навязываемые системе условиями задачи (характерные длины градиентов макроскопических величин газа, длины и периоды распространяющихся в нем звуковых волн и т. п.).

В таких задачах достаточно следить за поведением системы на расстояниях и за времена, малые лишь по сравнению с этими L и T . Другими словами, малыми лишь по сравнению с L и T должны быть физически бесконечно малые элементы объема и времени. Усредненными по таким элементам задаются и начальные условия задачи.

интеграл столкновений через сечение столкновений

можно записать так:

$$\text{St} f = \int v_{\text{отн}} (f' f'_1 - f f_1) d\sigma d^3 p_1$$

Для одноатомного газа величины Γ сводятся к трем компонентам импульса атома \mathbf{p} , а согласно (2,8) функция w в интеграле столкновений может быть заменена функцией $\omega = w(\mathbf{p}', \mathbf{p}'_1; \mathbf{p}, \mathbf{p}_1)$.

Выразив затем эту функцию через дифференциальное сечение столкновений $d\sigma$ согласно $w d^3 p' d^3 p'_1 = v_{\text{отн}} d\sigma$ (где $v_{\text{отн}} = |\mathbf{v} - \mathbf{v}_1|$) получим

$$\text{St} f = \int v_{\text{отн}} (f' f'_1 - f f_1) d\sigma d^3 p_1$$

Функция w , а с нею и сечение $d\sigma$, определенное согласно (2,2), содержат в себе δ -функциональные множители, выражающие законы сохранения импульса и энергии, в силу которых переменные $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}', \mathbf{p}'_1$ (при заданном \mathbf{p}) в действительности не независимы.

Но после того, как интеграл столкновений выражен в виде (3,9), можно считать, что эти δ -функции уже устранены соответствующими интегрированиями;

тогда $d\sigma$ будет обычным сечением рассеяния, зависящим (при заданном $v_{\text{отн}}$) только от угла рассеяния.

понятие длины свободного пробега

Для качественного рассмотрения кинетических явлений в газе используется грубая оценка интеграла столкновений с помощью понятия длины свободного пробега l — некоторого среднего расстояния, проходимого молекулой между двумя последовательными столкновениями.

Эта величина имеет, конечно, лишь качественный характер; самое ее определение зависит от того, какое именно кинетическое явление в газе рассматривается.

Длина свободного пробега может быть выражена через сечение столкновений σ и плотность числа молекул в газе N .

Пусть молекула в своем движении прошла 1 см; на этом пути она столкнулась с молекулами, находящимися в объеме σ (объем цилиндра с площадью сечения σ и длиной 1 см); в этом объеме имеется σN молекул.

Ясно поэтому, что

$$l \sim 1/N\sigma$$

Сечение столкновений $\sigma \sim d^2$, где d — молекулярные размеры.

Написав также $N \sim \bar{r}^{-3}$, где \bar{r} — среднее расстояние между молекулами, найдем, что

$$l \sim \bar{r} \left(\frac{\bar{r}}{d} \right)^2 = d \left(\frac{\bar{r}}{d} \right)^3$$

Поскольку в газе $\bar{r} \gg d$, то длина пробега $l \gg \bar{r}$.

Отношение $\tau \sim l\bar{v}$ называют временем свободного пробега.

грубая оценка интеграла столкновений

Для грубой оценки интеграла столкновений можно положить

$$\text{St} f \sim -\frac{f - f_0}{\tau} \sim -\frac{\bar{v}}{l} (f - f_0)$$

Написав в числителе разность $f - f_0$, мы тем самым учли, что интеграл столкновений обращается в нуль для равновесной

функции распределения. Знак минус в (3,12) выражает тот факт, что столкновения являются механизмом установления статистического равновесия, т. е. стремятся уменьшить отклонение функции распределения от равновесной. В этом смысле величина τ играет роль времени релаксации для установления равновесия в каждом элементе объема газа.

4.2.2 уравнение Больцмана в тау-приближении

обзор применений

вид уравнения в тау-приближении

проводимость Друде в гидродинамическом подходе (???)

учет упругих столкновений на беспорядке

(8 задача из задания. это вроде запись семинара)

Работаем с уравнением Больцмана:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial r_\alpha} + \frac{\partial f}{\partial p_\alpha} F_\alpha = I_1[f] + I_2[f]$$

Рассмотрим интеграл столкновений, он представляет из себя два члена, один - за счет столкновений на примесях, другой - друг на друге.

Здесь интеграл столкновений записан в виде двух: $I_1[f]$ - часть, учитывающая прилет, $I_2[f]$ - разлет. Распишем интеграл столкновений учитывает два направления - прилет и разлет:

$$I_1[f] = \int w(p, p_1, p', p'_1) f(p) f(p'_1) (1 - f(p)) (1 - f(p_1)) d\Gamma_1 d\Gamma' d\Gamma'_1 - \quad (4.1)$$

$$- \int w(p, p_1, p', p'_1) f(p) f(p'_1) (1 - f(p')) (1 - f(p_1')) d\Gamma_1 d\Gamma' d\Gamma'_1 \quad (4.2)$$

$$I_2[f] = \int w(p, p, p') f(p) f(p') (1 - f(p')) - w(p, p', p) f(p) f(p') (1 - f(p')) d\Gamma_1 d\Gamma' d\Gamma'_1$$

$$I_2[f] = \int w(p, p') (f(p) - f(p')) d\Gamma$$

зануляется он при...

$$\int p_\alpha I_2 d\Gamma \neq 0$$

Если

$$f = \int A(\dots) d\Gamma,$$

то получаем

$$\int A \frac{\partial f}{\partial t} d\Gamma + \int A \frac{\partial f}{\partial t} d\Gamma + \int A \frac{\partial f}{\partial t} d\Gamma = \int A I_1 d\Gamma + \int A I_2 d\Gamma$$

Покомпонентно суть каждого члена следующая:

$$\frac{\partial}{\partial t} (n \langle A \rangle) + \frac{\partial}{\partial r_\alpha} j_{A\alpha} - F_\alpha \int \frac{\partial A}{\partial p_\alpha} f d\Gamma$$

Так как $\int A f d\Gamma = n\langle A \rangle$, потому что $\langle A \rangle = \frac{\int A f d\Gamma}{\int f d\Gamma}$. Касательно последнего члена, используем приближение и интегрируем по частям:

$$\int \frac{\partial f}{\partial p_\alpha} F_\alpha d\Gamma = F_\alpha \int \frac{\partial f}{\partial p_\alpha} A d\tilde{\Gamma} dp_\alpha + F_\alpha \left[\int f A d\tilde{\Gamma} - \int \dots \right]$$

Исследуем полученное уравнение. Если подставить $A = 1$, то

$$\frac{\partial}{\partial t}(n\langle A \rangle) + \frac{\partial}{\partial r_\alpha} j_{A\alpha} - F_\alpha \int \frac{\partial A}{\partial p_\alpha} f d\Gamma$$

Если подставить $A = p_\beta$

тензор плотности потока импульса

Тензор плотности потока импульса, как известно, имеет вид:

$$\Pi_{\alpha\beta} = j_{A\alpha} \int p_\beta v_\alpha f d\Gamma$$

Про него знаем, что

$$\Pi_{\alpha\beta} = \int p_\beta v_\alpha f d\Gamma = m \int v_\beta v_\alpha f d\Gamma = \quad (4.3)$$

$$= m \int (V_\beta + u_\beta)(V_\alpha + u_\alpha) f d\Gamma = \quad (4.4)$$

$$= m V_\alpha V_\beta \int f d\Gamma + 0 + 0 + m \int u_\alpha u_\beta f d\Gamma = \quad (4.5)$$

$$= mn V_\alpha V_\beta + m \int u_\alpha u_\beta f d\Gamma \quad (4.6)$$

где была введена тепловая скорость $u : v = V + u$

$$mn V_\alpha V_\beta + m \int u_\alpha u_\beta f d\Gamma = mn V_\alpha V_\beta + m \int u u_\alpha u_\beta f_0(\varepsilon_u) d\Gamma + m \int u u_\alpha u_\beta \delta f d\Gamma$$

где $\varepsilon_u = mu^2/2$.

$$\Pi_{\alpha\beta} = mn V_\alpha V_\beta + p \delta_{\alpha\beta} - \sigma_{\beta\alpha}$$

Здесь вводится сдвиговая вязкость (обычная) через тензор вязких напряжений $\sigma'_{\alpha\beta}$, определяем $\sigma_{\alpha\beta} = \sigma'_{\alpha\beta} - p \delta_{\alpha\beta}$

Еще кстати есть объемная, которую мы не смотрим.

Теперь распишем

$$u^2 f_0 d\Gamma = \frac{2}{m} \int \frac{mu^2}{2} f_0 d\Gamma = \frac{2}{m} \int f_0 d\Gamma \frac{\int \dots}{\dots} = \frac{2}{m} n \frac{3}{2} T = \frac{3p}{m}$$

$$F_\alpha \int \frac{\partial f}{\partial p_\alpha} A d\tilde{\Gamma} dp_\alpha = n F_\beta$$

Также известно, что

$$\langle p_\beta \rangle = \langle m v_\beta \rangle = m v_\beta$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(n\langle p_\beta \rangle) = \frac{\partial}{\partial t}(n\langle m n v_\beta \rangle) = \frac{\partial}{\partial t}(\rho v_\beta)$$

тензор плотности потока импульса из уравнения Больцмана

Рассмотрим жидкость, которая зажата вдоль двух пластинок.

$$\Pi_{\alpha\beta} = m \int u_x u_y \delta f d\Gamma$$

$$\Pi_{\alpha\beta} = -\eta \frac{\partial V_{0x}}{\partial y}$$

Запишем уравнение Больцмана:

$$\frac{\partial f}{\partial r_\alpha} v_\alpha = I_1[f] = -\frac{f - f_0}{\tau_{tr}(\varepsilon_u)}$$

Теперь:

$$\frac{\partial f}{\partial r_\alpha} v_\alpha = I_1[f] = -\frac{f - f_0}{\tau_{tr}(\varepsilon_u)}$$

Нам нужно найти δf

различные формы уравнения Больцмана

Подготовимся для применения уравнения Больцмана, для этого познакомимся с разными его формами.

(пока выписки из разных мест)

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} = \frac{1}{\tau} \left[-f + \int \frac{d\hat{\mathbf{v}}}{4\pi} f \right].$$

Запишем его в форме

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} = \frac{1}{\tau} (\mathbb{P} - 1)f,$$

Тогда кинетическое уравнение для функции $f(t, \mathbf{p})$ запишется в виде

$$\frac{\partial f(t, \mathbf{p})}{\partial t} = \int \{w(\mathbf{p} + \mathbf{q}, \mathbf{q})f(t, \mathbf{p} + \mathbf{q}) - w(\mathbf{p}, \mathbf{q})f(t, \mathbf{p})\} d^3q$$

где справа стоит разность между числом частиц, поступающих (в 1 с) в заданный элемент импульс пространства d^3p и покидающих его за то же время.

4.2.3 Другое про уравнение Больцмана

обобщение уравнения Больцмана на неточечные частицы ??? не гуглится, не знаю.

мб больцмана-Энского?

но и не важно.

примеры уравнений Больцмана

Приведем примеры уравнений Больцмана и укажем их особенности для лучшего понимания.

Общий вид уравнения Больцмана следующий:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\mathbf{v} \nabla f + \text{St } f.$$

ур (6.19)???

Без члена с градиентом температуры,

$$mv_\alpha v_\beta \left(V_{\alpha\beta} - \frac{1}{3} \delta_{\alpha\beta} \operatorname{div} \mathbf{V} \right) + \left(\frac{mv^2}{3} - \frac{\varepsilon(\Gamma)}{c_v} \right) \operatorname{div} \mathbf{V} = I(\chi)$$

Кинетическое уравнение для каждого сорта частиц в плазме (электронов и ионов) имеет вид

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \dot{\mathbf{p}} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = \operatorname{St} f$$

После пренебрежения интегралом столкновений кинетические уравнения для функций распределения электронов (f_e) и ионов (f_i) принимают вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_e}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f_e}{\partial \mathbf{r}} - e \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} [\mathbf{vB}] \right) \frac{\partial f_e}{\partial \mathbf{p}} &= 0 \\ \frac{\partial f_i}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f_i}{\partial \mathbf{r}} + ze \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} [\mathbf{vB}] \right) \frac{\partial f_i}{\partial \mathbf{p}} &= 0 \end{aligned}$$

у максимова даже в (???) линеаризованное уравнение Больцмана принимает вид

$$\Omega \chi + \frac{m}{T} \{u_\alpha u_\beta\} \{\nabla_\beta V_\alpha\} = 0$$

вот это я точно не въезжаю.

4.2.4 Интеграл столкновений

Выше мы видели, что по сути кинетическое уравнение напрямую зависит от вида интеграла столкновений и от его преобразований, так что приведем тут весь необходимый анализ.

суть интеграла столкновений

примеры интегралов столкновений

Линеаризация интеграла столкновений по малому отклонению Обсудим линеаризацию интеграла столкновений по малому отклонению от локально-равновесного распределения

Определим вид интеграла столкновений

$$I_{st} = \int d\Gamma_1 d\Gamma' d\Gamma'_1 w' \{f f_1 - f' f'_1\}$$

в линейном приближении по малому отклонению от равновесного распределения:

$$\begin{aligned} I_{st} &= \int d^3\Gamma w' \{f^0 f_1^0 (1 + \chi) (1 + \chi_1) - f^{0'} f_1^{0'} (1 + \chi') (1 + \chi'_1)\} \approx \\ &\approx f^0 \int d^3\Gamma w' f_1^0 \{\chi + \chi_1 - \chi' - \chi'_1\} \end{aligned}$$

поскольку $f^0 f_1^0 = f^{0'} f_1^{0'}$; напомним, что $d^3\Gamma = d\Gamma_1 d\Gamma' d\Gamma'_1$.

определение $\hat{\Omega}$ как оператора столкновений с точностью до константы (???)
 (???) Введем обозначение $I_{st} = f_0 \hat{\Omega} \chi$, где

$$\hat{\Omega} \chi = \int d^3 \Gamma w' f_1^0 \{ \chi + \chi_1 - \chi' - \chi'_1 \}$$

Скалярное произведение уже было определено выше следующим образом:

$$\langle a, b \rangle = \int d\Gamma f_0 a b$$

Поэтому

$$\langle \varphi, \hat{\Omega} \chi \rangle = \int d\Gamma f_0 \varphi \hat{\Omega} \chi$$

самосопряженность Ω Для одноатомных газов $w = w'$. Отсюда следует самосопряженность оператора Ω .

В самом деле, представим исследуемое скалярное произведение в виде

$$\begin{aligned} \langle \varphi, \hat{\Omega} \chi \rangle &= \int d^4 \Gamma f^0 f_1^0 \varphi w' \{ \chi + \chi_1 - \chi' - \chi'_1 \} = \\ &= (\Gamma \leftrightarrow \Gamma_1) = \int d^4 \Gamma f^0 f_1^0 w' \varphi_1 \{ \chi + \chi_1 - \chi' - \chi'_1 \} = \\ &= \frac{1}{2} \int d^4 \Gamma f^0 f_1^0 w' (\varphi + \varphi_1) \{ \chi + \chi_1 \} - \frac{1}{2} \int d^4 \Gamma f^{0'} f_1^{0'} w' (\varphi + \varphi_1) \{ \chi' + \chi'_1 \} \end{aligned}$$

Первый интеграл в правой части уравнения выше симметричен относительно замены $\varphi \leftrightarrow \chi$.

В последнем интеграле делаем замену $\Gamma \leftrightarrow \Gamma'$; $\Gamma_1 \leftrightarrow \Gamma'_1$.

Учитывая, что $w = w'$ и $f^0 f_1^0 = f^{0'} f_1^{0'}$, находим

$$\begin{aligned} &\int_1 d^4 \Gamma f^0 f_1^0 w' (\varphi' + \varphi'_1) \{ \chi + \chi_1 \} = \\ &\frac{1}{2} \int d^4 \Gamma f^{0'} f_1^{0'} w' (\chi + \chi_1) \{ \varphi' + \varphi'_1 \} \end{aligned}$$

????? Поэтому последний интеграл также не изменяется при преобразовании $\varphi \leftrightarrow \chi$, что доказывает самосопряженность оператора $\hat{\Omega}$:

$$\langle \varphi, \hat{\Omega} \chi \rangle = \langle \chi, \hat{\Omega} \varphi \rangle$$

неотрицательность диагональных матричных элементов $\hat{\Omega}$ Докажем неотрицательность диагональных матричных элементов этого оператора.

Для этого воспользуемся законом возрастания энтропии (см.????? свойство 3 интеграла столкновений):

$$\int d\Gamma I_{st} \ln f \geq 0$$

который представим в виде

$$\begin{aligned} \int d\Gamma I_{st} \ln f &= \int d\Gamma I_{st} \ln f^0 + \int d\Gamma I_{st} \ln(1 + \chi) \approx \\ &\approx \int d\Gamma I_{st} \chi = \int d\Gamma \chi f_0 \hat{\Omega} \chi = \langle \chi, \hat{\Omega} \chi \rangle \geq 0 \end{aligned}$$

Пусть

$$\hat{\Omega} \psi_n = \Omega_n \psi_n$$

где ψ_n - полный набор ортогональных функций.

Для функции

$$\chi = \sum_m c_m \psi_m; c_m = c_m(r, t), \psi_m = \psi_m(\Gamma)$$

имеем

$$\langle \chi \cdot \hat{\Omega} \chi \rangle = \sum c_n c_m \langle \psi_m, \hat{\Omega} \psi_n \rangle = \sum c_n c_m \Omega_n \langle \psi_m, \psi_n \rangle = \sum_n c_n^2 \langle \psi_n, \psi_n \rangle$$

$$\Omega_n \geq 0$$

Откуда следует, что $\Omega_n \geq 0$, так как $c_n^2 \langle \psi_n, \psi_n \rangle \geq 0$.

Если функция ψ_n - интеграл движения, то собственное значение $\Omega_n = 0$.

???????

собственные значения Ω_n - это частоты релаксации (????) Покажем, что ненулевые Ω_n имеют смысл частот релаксации.

Пространственно однородное уравнение Больцмана с линеаризованным интегралом столкновений имеет вид

$$\frac{\partial}{\partial t} (f_0(1 + \chi)) = -f_0 \hat{\Omega} \chi$$

Для стационарного локально-равновесного распределения имеем

$$f_0 \frac{\partial}{\partial t} \chi = -f_0 \hat{\Omega} \chi$$

Перепишем его в форме

$$\sum_m \psi_m \frac{\partial c_m}{\partial t} = - \sum_m c_m \Omega_m \psi_m$$

Поскольку ψ_m - ортогональный набор, то

$$\frac{\partial c_m}{\partial t} = -c_m \Omega_m, c_m = c_m(0) e^{-\Omega_m t}$$

Если предположить, что все Ω_n равны, то

$$I_{st} = f_0 \hat{\Omega} \chi = \sum_m f_0 c_m \Omega_m \psi_m = \Omega f_0 \chi = \frac{f - f_0}{\tau}$$

Величина Ω обозначена как τ^{-1} . Такое приближение называется приближением времени релаксации или τ -приближением.

τ -приближение можно применять и в случае неравных друг другу значений Ω_n , если в приличном приближении можно ограничиться одним членом ряда (1.52).

Оператор столкновения и его свойства

тау приближение

одно из часто встречающихся приближений для решения кинетических уравнений это тау приближение.

освоимся с ним, потому что в простейшем случае именно его и нужно использовать.

суть тау приближения

примеры применения тау приближения наберу позже

границы применимости и другие приближения то се, разберемся позже.
примеры приведем.

примеры интегралов столкновений

Интеграл столкновений при рассеянии электронов на примесях в металле

4.2.5 Метод моментов

(я не знаю, что это, закоулок какой-то теории, наверное.)

метод моментов - суть????

хз.

переход к методу моментов

(нужна теория типа векторного анализа, это в дополнениях нужно прописать!!!!)

(также до этого упущен кусок нужной теории!!!)

Часто кинетическое уравнение решается с помощью так называемого метода моментов, или метода Чепмена-Энскога.

Пусть температура газа однородна, то есть $\nabla T = 0$.

Тогда неравновесность газа обусловлена неоднородным распределением скорости потока V .

В этом случае???????

$$N = \frac{m}{T} \left(u_\alpha u_\beta - \frac{1}{3} \delta_{\alpha\beta} u^2 \right) \nabla_\beta V_\alpha$$

Любой тензор второго ранга есть суперпозиция своих неприводимых частей $T^{(0)}, T_\gamma^{(1)}, \{T_{\alpha\beta}\}$, определенных следующим образом:

$$\begin{aligned} T_{\alpha\beta} &= \delta_{\alpha\beta} T^{(0)} + e_{\alpha\beta\gamma} T_\gamma^{(1)} + \{T_{\alpha\beta}\}; \\ T^{(0)} &= \frac{1}{3} T_{\gamma\gamma}; \\ T_\gamma^{(1)} &= \frac{1}{2} e_{\gamma\delta\omega} T_{\delta\omega}; \\ \{T_{\alpha\beta}\} &= \frac{1}{2} \left(T_{\alpha\beta} + T_{\beta\alpha} - \frac{2}{3} \delta_{\alpha\beta} T_{\gamma\gamma} \right). \end{aligned}$$

Применим это представление к тензору $\nabla_\beta V_\alpha$:

$$\nabla_\beta V_\alpha = \frac{1}{3} \delta_{\alpha\beta} \operatorname{div} \mathbf{V} + e_{\alpha\beta\gamma} (\operatorname{rot} V)_\gamma + \{\nabla_\beta V_\alpha\}$$

Поскольку некоторые выражения зануляются, (???)

$$\begin{aligned} \left(u_\alpha u_\beta - \frac{1}{3} \delta_{\alpha\beta} u^2 \right) \delta_{\alpha\beta} &= 0 \\ \left(u_\alpha u_\beta - \frac{1}{3} \delta_{\alpha\beta} u^2 \right) e_{\alpha\beta\gamma} &= u_\alpha u_\beta e_{\alpha\beta\gamma} = -u_\alpha u_\beta e_{\beta\alpha\gamma} = -u_\beta u_\alpha e_{\beta\alpha\gamma} = -u_\alpha u_\beta e_{\alpha\beta\gamma} = 0 \end{aligned}$$

то число частиц

$$\begin{aligned} N &= \frac{m}{T} \left(u_\alpha u_\beta - \frac{1}{3} \delta_{\alpha\beta} u^2 \right) \{ \nabla_\beta V_\alpha \} = \\ &= \frac{m}{T} \{ u_\alpha u_\beta \} \{ \nabla_\beta V_\alpha \} \end{aligned}$$

так как $u_\alpha u_\beta - \delta_{\alpha\beta} u^2$ и $\{ \nabla_\beta V_\alpha \}$ - симметричные тензоры.

Таким образом, линеаризованное уравнение Больцмана принимает вид (??????)

$$\Omega \chi + \frac{m}{T} \{ u_\alpha u_\beta \} \{ \nabla_\beta V_\alpha \} = 0$$

Оператор Ω действует только на Γ и не действует на координаты.

Поэтому легко избавиться от функции $\{ \nabla_\beta V_\alpha \}$.

Ищем решение в виде

$$\chi = \frac{m}{T} \{ \nabla_\beta V_\alpha \} \chi_{\alpha\beta}$$

для него

$$\Omega \chi_{\alpha\beta} + \{ u_\alpha u_\beta \} = 0$$

Если решение χ известно, то

$$\begin{aligned} \sigma_{ik} &= p \delta_{ik} - \Pi_{ik} = p \delta_{ik} - \int d\Gamma f^0 (1 + \chi) m u_i u_k = \\ &= p \delta_{ik} - \int d\Gamma f^0 m u_i u_k - \int d\Gamma f^0 \chi m u_i u_k \end{aligned}$$

Второй интеграл уже считался выше (???) и равен $p \delta_{ik}$.

Поэтому

$$\sigma_{ik} = - \int d\Gamma f^0 \chi m u_i u_k$$

В силу известного свойства скалярного произведения $\langle u^2 \chi \rangle = 0$, можно в подынтегральном выражении заменить $u_i u_k$ на $\{ u_i u_k \}$.

Поэтому

$$\begin{aligned} \sigma_{ik} &= - \int d\Gamma f^0 \chi m \{ u_i u_k \} = -m \langle \{ u_i u_k \} \chi \rangle = \\ &= - \frac{m^2}{T} \{ \nabla_\beta V_\alpha \} \langle \{ u_i u_k \} \chi_{\alpha\beta} \rangle = \eta_{ik\alpha\beta} \{ \nabla_\beta V_\alpha \}; \\ \eta_{ik\alpha\beta} &= - \frac{m^2}{T} \langle \{ u_i u_k \} \chi_{\alpha\beta} \rangle = \frac{m^2}{T} \langle \chi_{\alpha\beta} \Omega \chi_{ik} \rangle \end{aligned}$$

Выражение (1.58) определяет связь между тензором вязких напряжений и градиентом скорости.

(!!!)

Следовательно, тензор $\eta_{ik\alpha\beta}$ является обобщенным кинетическим коэффициентом вязкости.

Ниже мы увидим, что в изотропном случае он сводится к скаляру - коэффициенту первой вязкости η .

4.2.6 Цепочка ББКГИ

Обсудим подробно цепочку ББКГИ.

(потом перепишу это лучше!)

суть цепочки

хотим найти одочастичную функцию распределения
оказывается, она зависит от двухчастичной функции
и так далее
нужно ее оборвать

алгоритм вывода через цепочку ББКГ

Получаем цепочку ББКГ:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial}{\partial t} + \sum_{i=1}^n \frac{\mathbf{p}_i}{m} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} + \sum_{i=1}^n \left(\mathbf{X}_i + \sum_{j=1}^n \mathbf{F}_{ij} \right) \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_i} \right) f^{(n)} = \\ = - \sum_{i=1}^n \iint \mathbf{F}_{i,n+1} \cdot \frac{\partial f^{(n+1)}}{\partial \mathbf{p}_i} d\mathbf{r}_{n+1} d\mathbf{p}_{n+1} \quad (4.7) \end{aligned}$$

необходимая механика для уравнения Больцмана

Обсудим основы механики, которые используются для получения уравнения Больцмана. Подробнее они объяснены, например, в дополнениях к этой записи.
(вкратце все приведу из дополнений)

обзор параметров системы

Вспомним из механики, как описываем системы:
приведенная функция распределения $f^{(n)}(\mathbf{r}^n, \mathbf{p}^n; t)$ как

$$f^{(n)}(\mathbf{r}^n, \mathbf{p}^n; t) = \frac{N!}{(N-n)!} \iint f^{[N]}(\mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N; t) d\mathbf{r}^{(N-n)} d\mathbf{p}^{(N-n)}$$

где $\mathbf{r}^n \equiv \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n$ и $\mathbf{r}^{(N-n)} \equiv \mathbf{r}_{n+1}, \dots, \mathbf{r}_N$.

смысл в том, что у нее n частиц имеют такие-то координаты и импульсы.

она показывает плотность частиц, то есть доля числа частиц в ф. пр. к этому объему.
 $f^{[N]}$ - функция распределения N частиц.

уравнения Гамильтона и Лиувилля в случае наличия силы

Для поиска уравнений движения для $f^{(n)}$, рассмотрим специальный случай, когда общая сила, действующая на частицу i это сумма внешних сил \mathbf{X}_i , появляющихся за счет внешнего потенциала $\phi(\mathbf{r}_i)$, и пары сил \mathbf{F}_{ij} за счет взаимодействия с другими всеми частицами j , учитывая что с собой нет взаимодействия $\mathbf{F}_{ii} = 0$.

теперь второе уравнение Гамильтона имеет вид:

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{r}_i} = -\mathbf{X}_i - \sum_{j=1}^N \mathbf{F}_{ij}$$

Уравнение Лиувилля можно записать с учетом вида полной производной по времени, $\frac{dB}{dt} = \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial B}{\partial \mathbf{r}_i} \cdot \dot{\mathbf{r}}_i + \frac{\partial B}{\partial \mathbf{p}_i} \cdot \dot{\mathbf{p}}_i \right)$, получаем:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i}{m} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} + \sum_{i=1}^N \mathbf{X}_i \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_i} \right) f^{[N]} = - \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \mathbf{F}_{ij} \cdot \frac{\partial f^{[N]}}{\partial \mathbf{p}_i}$$

Умножим на $N!/(N-n)!$ и проинтегрируем по $3(N-n)$ координатам $\mathbf{r}_{n+1}, \dots, \mathbf{r}_N$ и $3(N-n)$ импульсами $\mathbf{p}_{n+1}, \dots, \mathbf{p}_N$.
(???)

переход к цепочке ББГКИ с помощью приближений

Первое приближение - перейти к приведенной функции распределения.

Функция распределения $f^{[N]}$ нулевая, когда r_i находится вне объема, занимаемом системой и должна уменьшаться с ростом $\mathbf{p}_i \rightarrow \infty$, чтобы гарантировать сходимость интеграла по импульсам от ней к единице.

Поэтому $f^{[N]}$ обнуляется на пределах интегрирования, а производная $f^{[N]}$ по каждой компоненте координаты и импульса дадут нулевой вклад после интегрирования по этой компоненте, ибо выразятся через эту же функцию.

???? поэтому при интегрировании исчезают в уравнении Лиувилля все члены с $i > n$.

Поэтому домножим уравнение на $\frac{N!}{(N-n)!}$, проинтегрируем и теперь для приведенной функции распределения $f^{(n)}$ получится уравнение:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \sum_{i=1}^n \frac{\mathbf{p}_i}{m} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} + \sum_{i=1}^n \mathbf{X}_i \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_i} \right) f^{(n)} = - \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \mathbf{F}_{ij} \cdot \frac{\partial f^{(n)}}{\partial \mathbf{p}_i} - \frac{N!}{(N-n)!} \sum_{i=1}^n \sum_{j=n+1}^N \iint \mathbf{F}_{ij} \cdot \frac{\partial f^{[N]}}{\partial \mathbf{p}_i} d\mathbf{r}^{(N-n)} d\mathbf{p}^{(N-n)} \quad (4.8)$$

За счет одинаковости частиц, функция $f^{[N]}$ симметрична при перестановке в ней частиц местами и суммы членов от $j = n+1$ до N в правой части (4.8) могут быть заменены на величину $(N-n)$, умноженную на значение любого одного члена..

Теперь напишем уравнение (4.8) в виде, подчеркивающим связь $f^{(n)}$ с $f^{(n+1)}$:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \sum_{i=1}^n \frac{\mathbf{p}_i}{m} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} + \sum_{i=1}^n \left(\mathbf{X}_i + \sum_{j=1}^n \mathbf{F}_{ij} \right) \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_i} \right) f^{(n)} = - \sum_{i=1}^n \iint \mathbf{F}_{i,n+1} \cdot \frac{\partial f^{(n+1)}}{\partial \mathbf{p}_i} d\mathbf{r}_{n+1} d\mathbf{p}_{n+1} \quad (4.9)$$

Данная система называется иерархией Bogolyubov-Born-Green-Kirkwood-Yvon или BBGKY.

Уравнения точны, хотя и ограничены в своей применимости к системам, для которых взаимодействия частиц являются попарно аддитивными.

Однако они не сразу полезны, потому что они просто выражают одну неизвестную функцию, $f^{(n)}$, в терминах другой, $f^{(n+1)}$. Поэтому необходимо некоторое другое соотношение, которое позволит сдвинуться дальше.

На практике самый важный член в BBGKY иерархии это член при $n = 1$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}_1}{m} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_1} + \mathbf{X}_1 \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1} \right) f^{(1)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1; t) = - \iint \mathbf{F}_{12} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1} f^{(2)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{p}_2; t) d\mathbf{r}_2 d\mathbf{p}_2$$

приближение для уравнения Власова

Чтобы приближенно решить

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}_1}{m} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_1} + \mathbf{X}_1 \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1} \right) f^{(1)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1; t) = - \iint \mathbf{F}_{12} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1} f^{(2)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{p}_2; t) d\mathbf{r}_2 d\mathbf{p}_2,$$

нужно связать двухчастичную функцию распределения $f^{(2)}$ с одночастичной $f^{(1)}$.

Простейшая связь может быть в том, чтобы не учитывать парную корреляцию этих двух функций, то есть

$$f^{(2)}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, \mathbf{r}', \mathbf{p}'; t) \approx f^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{p}; t) f^{(1)}(\mathbf{r}', \mathbf{p}'; t)$$

В итоге получаем уравнение Власова:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} + [\mathbf{X}(\mathbf{r}, t) + \bar{\mathbf{F}}(\mathbf{r}, t)] \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \right) f^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{p}; t) = 0$$

где $\bar{\mathbf{F}}(\mathbf{r}, t) = \iint \mathbf{F}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t) f^{(1)}(\mathbf{r}', \mathbf{p}'; t) d\mathbf{r}' d\mathbf{p}'$ есть средняя сила, оказываемая другими частицами, находящимися в \mathbf{r}' , на выбранную частицу, находящуюся в момент времени t в \mathbf{r} .

Уравнение (4.2.6) может быть переписано схематически в виде

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}_1}{m} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_1} + \mathbf{X}_1 \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1} \right) f^{(1)} = \left(\frac{\partial f^{(1)}}{\partial t} \right)_{\text{coll}}$$

где член $(\partial f^{(1)}/\partial t)_{\text{coll}}$ это вероятность изменений $f^{(1)}$ за счет столкновений частиц.

Член столкновения строго задается правой частью (4.2.6), но в уравнении Власова он устраняется заменой истинной внешней силы $\mathbf{X}(\mathbf{r}, t)$ эффективной силой - величиной, заключенной в квадратные скобки в уравнении Власова, - которая частично зависит от самой $f^{(1)}$.

По этой причине уравнение Власова называется "бесстолкновительным" приближением.

В самом известном из всех кинетических уравнений, выведенном Больцманом более века назад, $(\partial f^{(1)}/\partial t)_{\text{coll}}$ вычисляется с помощью двух допущений, что только столкновения двух тел вовлечены и что последовательные столкновения некоррелированы.

Эти допущения в общем случае оправдываются только при низких плотностях:

Второе из этих предположений, предположение о "молекулярном хаосе", формально соответствует предположению, что некоррелированность функций распределения применяется до любого столкновения, и не обязательно после него.

Проще говоря, это означает, что при столкновении двух частиц не сохраняется память о каких-либо предыдущих столкновениях между ними, предположение, которое явно разрушается, когда столкновения являются частыми событиями.

Двойное столкновение в точке \mathbf{r} характеризуется импульсами $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2$ двух частиц до столкновения и их импульсами $\mathbf{p}'_1, \mathbf{p}'_2$ после; импульсы после столкновения связаны с их предшествующими значениями законами классической механики.

С приближениями Больцмана член столкновения в правой части уравнения Власова (???) становится

$$\left(\frac{\partial f^{(1)}}{\partial t} \right)_{\text{coll}} = \frac{1}{m} \iint \sigma(\Omega, \Delta p) \left[f^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{p}'_1; t) f^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{p}'_2; t) - f^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{p}_1; t) f^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{p}_2; t) \right] d\Omega d\mathbf{p}_2 \quad (4.10)$$

где $\Delta p \equiv |\mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_1|$ и $\sigma(\Omega, \Delta p)$ это дифференциальное сечение рассеяния под телесным углом $d\Omega$.

Как показал Больцман, эта форма члена столкновений способна объяснить тот факт, что многочастичные системы необратимо эволюционируют к равновесному состоянию.

Эта необратимость описывается Н-теоремой Больцмана; источником необратимости является предположение о молекулярном хаосе.

Решение уравнения Больцмана приводит к явным выражениям для коэффициентов гидродинамического транспорта в терминах некоторых интегралов столкновения.

Дифференциальное сечение рассеяния и, следовательно, сами интегралы столкновения могут быть оценены численно для данного выбора взаимодействия двух тел, хотя для твердых сфер они имеют простую аналитическую форму.

Однако полученные результаты применимы только к разбавленным газам.

модификация Энского для случая твердых сфер

В случае твердых сфер уравнение Больцмана позднее было модифицировано полуэмпирическим путем Энским таким образом, что расширило область его применимости до значительно более высоких плотностей.

Теория Энского сохраняет два ключевых допущения, связанных с выводом уравнения Больцмана, но она также исправляет двумя способами конечный размер сталкивающихся частиц.

Во-первых, учитывается изменение скорости столкновения при взаимодействии твердой сферы.

Поскольку то же самое взаимодействие также ответственно за увеличение давления над его значением идеального газа, увеличение скорости столкновения относительно его предела низкой плотности может быть вычислено, если известно уравнение состояния твердой сферы.

Во-вторых, "коллизонный перенос" добавляется в теорию за счет переписывания интеграла столкновений в форме, в которой функции распределения для двух сталкивающихся частиц оцениваются не в одной и той же точке \mathbf{r} , а в точках, разделенных расстоянием, равным диаметру твердой сферы.

Это важная модификация теории, потому что при высоких плотностях именно взаимодействия, а не смещения частиц обеспечивают главным образом перенос энергии и импульса.

Плотность вероятности фазового пространства системы в термодинамическом равновесии является функцией изменяющихся во времени координат и импульсов, но не зависит от t в каждой точке системы.

фазовое пространство

Мы будем использовать символ $f_0^{[N]}(\mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N)$ для обозначения равновесной плотности вероятности;

из следует $\frac{\partial f^{[N]}}{\partial t} = \{\mathcal{H}, f^{[N]}\}$, что достаточным условием для того, чтобы плотность вероятности описывала систему в равновесии, является то, что она должна быть некоторой функцией гамильтониана.

Интегрирование $f_0^{[N]}$ по подмножеству координат и импульсов в виде

$$f^{(n)}(\mathbf{r}^n, \mathbf{p}^n; t) = \frac{N!}{(N-n)!} \iint f^{[N]}(\mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N; t) d\mathbf{r}^{(N-n)} d\mathbf{p}^{(N-n)}$$

дает набор равновесных функций распределения фазового пространства $f_0^{(n)}(\mathbf{r}^n, \mathbf{p}^n)$.

равновесная одночастичная функция распределения

Случай $n = 1$ соответствует равновесной одночастичной функции распределения; при отсутствии внешнего поля распределение не зависит от \mathbf{r} и имеет знакомую

максвелловскую форму, т.е.

$$f_0^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \frac{\rho \exp(-\beta |\mathbf{p}|^2 / 2m)}{(2\pi m k_B T)^{3/2}} \equiv \rho f_M(\mathbf{p})$$

где $f_M(\mathbf{p})$ это Максвелловское распределение импульса, нормированное, то есть

$$\int f_M(\mathbf{p}) d\mathbf{p} = 1$$

Соответствующее распределение скоростей \mathbf{u} есть

$$\phi_M(\mathbf{u}) = \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} \exp(-m\beta |\mathbf{u}|^2 / 2)$$

переход в тау-приближение

хз нужно знать.

равновесные функции распределения для уравнения Больцмана

Например, это распределение Максвелла для невырожденного газа: ...

Для ферми газа это распределение Ферми

$$f = \left(\exp\left\{ \frac{\frac{m(v-V)^2}{2} - \mu}{T} \right\} + 1 \right)^{-1}$$

интеграл столкновений и его смысл

У интеграла столкновений есть равновесная функция распределения, которое его зануляет.

Например, для свободных электронов это функция Ферми-Дирака

поток импульса из уравнения Больцмана

4.2.7 Уравнение Власова

Обсудим подробно уравнение Власова.

??? обзор применений уравнения Власова

Уравнение Власова не подходит для жидкостей, однако оно широко используется в физике плазмы, где дальнodelствующий характер кулоновского потенциала оправдывает обработку взаимодействий в среднем поле.

(потом конкретно напишу)

??? коэффициенты гидродинамического переноса из уравнения Власова

Из полученных кинетических уравнений можно вычислить коэффициенты гидродинамического переноса, но для реальных жидкостей уравнение Власова не очень применимо, так говорят.

?? границы применимости уравнения Власова

сделанные приближения редко подходят для жидкостей, поскольку????? корреляции между частицами в основном учены слишком грубо.

?? Другие аппроксимации для цепочки ББКГ

еще другие есть, кроме Власова, пока этим заниматься не буду

??? связь аппроксимации Власова и среднего поля

говорят, это типичная аппроксимация среднего поля, но почему?
потом напишу.

4.3 Параметры кинетики (???)

Обсудим подробно параметры кинетики.
(много разделов про них будет.)

4.3.1 Функция распределения

посмотрим на разные ее детали.

мотивация

???

теория

(пока какая-то и не полная теория, и не очень полезная, общие соображения просто)

Эта глава посвящена изложению кинетической теории обычных газов из электрически нейтральных атомов или молекул.

Кинетика изучает неравновесные состояния и процессы в идеальном газе.

Напомним, что под идеальным подразумевается газ настолько разреженный, что каждая молекула в нем почти все время движется как свободная, взаимодействуя с другими молекулами лишь при непосредственных столкновениях с ними.

Это значит, другими словами, что среднее расстояние между молекулами $\bar{r} \sim N^{-1/3}$ (N - число молекул в единице объема) предполагается большим по сравнению с их собственными размерами, точнее, по сравнению с радиусом действия межмолекулярных сил d ;

малую величину $Nd^3 \sim (d\bar{r})^3$ иногда называют «параметром газовойности».

определение функции распределения

Статистическое описание газа осуществляется функцией распределения $f(t, q, p)$ молекул газа в их фазовом пространстве.

Она является, вообще говоря, функцией выбранных каким-либо образом обобщенных координат молекулы q , и соответствующих им обобщенных импульсов p , а в нестационарном состоянии - еще и от времени t .

Обозначим посредством $d\tau = dqdp$ элемент объема фазового пространства молекулы; dq и dp условно обозначают соответственно произведения дифференциалов всех координат и всех импульсов.

Произведение $f^2 d\tau$ есть среднее число молекул, находящихся в заданном элементе $d\tau$, т. е. обладающих значениями q и p в заданных интервалах dq и dp .

К смыслу понятия среднего в этом определении мы вернемся еще ниже.

Хотя функция f будет везде подразумеваться определенной как плотность распределения именно в фазовом пространстве, в кинетической теории целесообразно

выражать ее через определенным образом выбранные переменные, которые могут и не являться канонически сопряженными обобщенными координатами и импульсами.

Условимся, прежде всего, об этом выборе.

Поступательное движение молекулы всегда классично.

Оно описывается координатами $\mathbf{r} = (x, y, z)$ ее центра инерции и импульсом \mathbf{p} (или скоростью $\mathbf{v} = \mathbf{p}/m$) ее движения как целого.

В одноатомном газе поступательным исчерпывается все движение частиц (атомов).

функция распределения - вращательные и колебательные вклады

В многоатомных газах молекулы обладают еще и вращательными и колебательными степенями свободы.

Вращательное движение молекулы в газе практически всегда тоже классично.

Оно описывается, прежде всего, заданием вектора вращательного момента молекулы \mathbf{M} .

Для двухатомной молекулы этого достаточно.

Такая молекула представляет собой ротатор, вращающийся в плоскости, перпендикулярной вектору \mathbf{M} .

Что же касается угла φ поворота оси молекулы в этой плоскости, то в реальных физических задачах функцию распределения можно считать независимой от него, т.е. все ориентации молекулы в указанной плоскости - равновероятными.

Это обстоятельство связано с быстротой изменения угла φ при вращении молекулы, и его происхождение можно пояснить следующим образом.

Скорость изменения φ (угловая скорость вращения молекулы есть $\dot{\varphi} \equiv \Omega = M/I$).

Среднее значение этой скорости $\bar{\Omega} \sim \bar{v}/d$, где d - молекулярные размеры, а \bar{v} -среднее значение линейных скоростей.

Но различные молекулы имеют различные значения Ω , распределенные по некоторому закону вокруг $\bar{\Omega}$.

Поэтому молекулы, имевшие в начальный момент одинаковые φ , очень быстро расходятся по значениям φ ; происходит, как говорят, быстрое «размешивание» по углам.

Пусть в начальный момент $t = 0$ распределение молекул по углам $\varphi = \varphi_0$ (в интервале от 0 до 2π) и по Ω дается некоторой функцией $f(\varphi_0, \Omega)$.

Выделим из нее независимое от φ среднее значение

$$f = \bar{f}(\Omega) + f'(\varphi_0, \Omega), \quad \bar{f}(\Omega) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} f(\varphi_0, \Omega) d\varphi_0$$

так что $f'(\varphi_0, \Omega)$ - знакопеременная функция с равным нулю средним значением.

При дальнейшей эволюции за счет свободного вращения молекул ($\varphi = \Omega t + \varphi_0$) функция распределения меняется согласно

$$f(\varphi, \Omega, t) = \bar{f}(\Omega) + f'(\varphi - \Omega t, \Omega)$$

(причем аргумент $\varphi - \Omega t$ подразумевается приведенным к интервалу от 0 до 2π путем вычитания надлежащего целого кратного от 2π).

С течением времени f' становится все более быстро осциллирующей функцией от Ω : характерный период осцилляций $\Delta\Omega \sim 2\pi/t$ и уже за время свободного (между двумя столкновениями) пробега молекул становится малым по сравнению с $\bar{\Omega}$.

Но все наблюдаемые физические величины содержат в себе некоторое усреднение функции распределения по Ω ;

вклад же быстро осциллирующей функции f' в такие средние пренебрежимо мал.

Именно это и позволяет заменить функцию распределения $f(\varphi, \Omega)$ усредненной по углам функцией $\bar{f}(\Omega)$.

Изложенные соображения имеют, очевидно, общий характер и относятся к любым быстро меняющимся величинам (фазам), пробегающим значения в конечных интервалах.

возвращаясь к вращательным степеням свободы молекул, отметим, что в многоатомных газах функция распределения может еще зависеть от углов, определяющих фиксированную ориентацию осей молекулы по отношению к вектору M .

Так, в молекулах типа симметрического волчка это — угол между M и осью волчка (угол прецессии);

от быстро меняющихся же углов вращения волчка вокруг собственной оси и прецессионного вращения этой оси вокруг M функцию распределения снова можно считать не зависящей.

Колебательное движение атомов внутри молекулы практически всегда квантуется, так что колебательное состояние молекулы определяется соответствующими квантовыми числами.

В обычных условиях (при не слишком высоких температурах), однако, колебания вообще не возбуждены и молекула находится на своем основном (нулевом) колебательном уровне.

В дальнейшем мы будем обозначать символом Γ совокупность всех переменных, от которых зависит функция распределения, за исключением координат молекулы как целого и времени t .

Из элемента фазового объема $d\tau$ выделим множитель $dV = dxdydz$, а остальную его часть, преобразованную к используемым переменным (и проинтегрированную по углам, от которых функция f не зависит), обозначим символом $d\Gamma$.

Величины Γ обладают важным общим свойством: это - интегралы движения, остающиеся постоянными для каждой молекулы в течение ее свободного (в отсутствие внешнего поля) движения между двумя последовательными столкновениями; в результате же каждого столкновения эти величины, вообще говоря, меняются.

А координаты x, y, z молекулы как целого, разумеется, меняются в течение ее свободного движения.

элементы фазового объема для разных газов

Для одноатомного газа величинами Γ являются три компоненты импульса атома $p = mv$, так что $d\Gamma = d^3p$.

Для двухатомной молекулы в Γ входит, помимо импульса p , еще и вращательный момент M ;

соответственно элемент $d\Gamma$ можно представить в виде

$$d\Gamma = 2\pi d^3p M dM d\phi_M$$

где ϕ_M - элемент телесных углов для направления вектора M .

Для молекулы типа симметричного волчка в число величин входит также и угол θ между M и осью волчка;

Элемент фазового пространства имеет вид:

$$d\Gamma = 4\pi^2 d^3p M^2 dM d\phi_M d\cos\theta,$$

в котором один множитель 2π возникает от интегрирования по углу вращения волчка вокруг своей оси, а другой множитель 2π - от интегрирования по углу прецессионного вращения.

Интеграл

$$\int f(t, \mathbf{r}, \Gamma) d\Gamma = N(t, \mathbf{r})$$

есть плотность пространственного распределения частиц газа; NdV есть среднее число молекул в элементе объема dV .

замечания о размерах физически бесконечно малых элементов объема и средним межмолекулярным расстоянием

В этой связи необходимо сделать следующие замечания.

Когда речь идет о бесконечно малом элементе объема dV , то подразумевается, собственно говоря, не математически, а физически малый объем, т.е. участок пространства, размеры которого очень малы по сравнению с характеристическими размерами задачи L , но в то же время велики по сравнению с размерами молекулы.

Это значит, другими словами, что утверждение о нахождении молекулы в данном элементе объема dV определяет расстояний порядка ее размеров.

Это обстоятельство весьма существенно. (!! в самом деле, это принципиально важно для понимания природы столкновений!)

Если бы координаты частиц газа определялись точно, то при столкновении, скажем, двух атомов одноатомного газа, движущихся по определенным классическим траекториям, результат столкновения был бы тоже вполне определенным.

Если же речь идет (Как всегда в кинетической теории газов) о столкновении атомов, происходящем в данном физически малом элементе объема, то ввиду неопределенности точного взаимного расположения атомов результат столкновения тоже будет неопределенным и можно говорить лишь о вероятности того или иного его исхода.

Мы можем теперь уточнить, что, говоря о средней плотности числа частиц, мы имеем в виду усреднение по объемам определенных таким образом физически бесконечно малых элементов и соответственно по временам порядка величины времени пролета частиц через такие элементы.

Поскольку размеры элементов объема, по отношению к которым определена функция распределения, велики по сравнению с молекулярными размерами d , то расстояния L , на которых быть тоже велики по сравнению с d .

Соотношение же между размерами физически бесконечно малых элементов объема и средними межмолекулярным расстоянием \bar{r} может быть, вообще говоря, произвольным.

Существует, однако, различие в характере определяемой функцией распределения плотности N в зависимости от величины этого соотношения.

Если размеры элементов dV не велики по сравнению с \bar{r} , то плотность N не является макроскопической величиной: флуктуации числа частиц, находящихся в dV , сравнимы с его средним значением.

Плотность N становится макроскопической величиной, лишь если она определена по отношению к объемам dV , содержащим много частиц; тогда флуктуации числа частиц в этих объемах относительно малы.

Ясно, однако, что такое определение возможно лишь, если и характерные размеры задачи $L \gg \bar{r}$.

место функции распределения в классической и квантовой механике

ответим на вопрос, что конкретно представляет из себя она там?

важная связка.

4.3.2 Переход к макроскопическим уравнениям

!! сбалансирую, как отдельный важный метод

вкратце

??

теория

Кинетическое уравнение Больцмана дает микроскопическое описание эволюции состояния газа.

Покажем, каким образом производится переход от кинетического уравнения к обычным уравнениям гидродинамики, осуществляющим менее детальное, макроскопическое описание этой эволюции.

Такое описание применимо в условиях, когда макроскопические свойства газа (его температура, плотность, скорость и т. п.) достаточно медленно меняются вдоль его объема: расстояния L , на которых происходит существенное изменение этих свойств, должны быть велики по сравнению с длиной свободного пробега молекул l . Мы уже упоминали, что интеграл

$$N(t, \mathbf{r}) = \int f(t, \mathbf{r}, \Gamma) d\Gamma$$

есть плотность распределения молекул газа в пространстве; произведение $\rho = mN$ есть соответственно массовая плотность газа. Скорость макроскопического движения газа обозначим через \mathbf{V} (в отличие от микроскопических скоростей молекул \mathbf{v}); она определяется как среднее значение

$$\mathbf{V} = \bar{\mathbf{v}} = \frac{1}{N} \int \mathbf{v} f d\Gamma$$

Столкновения не меняют ни числа сталкивающихся частиц ни их суммарных энергии и импульса.

Ясно поэтому, что столкновительная часть изменения функции распределения не может привести к изменению также и макроскопических величин в каждом элементе объема газа-его плотности, внутренней энергии макроскопической скорости \mathbf{V} .

Действительно, столкновительные части изменения полных числа, энергии и импульса молекул в единице объема газа даются равными нулю интегралами

$$\int St f d\Gamma = 0, \quad \int \varepsilon St f d\Gamma = 0, \quad \int p St f d\Gamma = 0$$

В этих равенствах легко убедиться, применив к интегралам преобразование (4,4) соответственно с $\varphi = 1, \varepsilon$ или p (первый интеграл обращается в нуль тождественно, а второй и третий в силу сохранения энергии и импульса при столкновениях).

Напишем теперь кинетическое уравнение

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} (v_\alpha f) = St f$$

и проинтегрируем его по $d\Gamma$, предварительно умножив на m, p_β или ε .

уравнения перехода к макросостояниям

Во всех трех случаях правая сторона уравнения обратится в нуль и мы получим следующие уравнения:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \rho \mathbf{V} &= 0 \\ \frac{\partial}{\partial t} \rho V_\alpha + \frac{\partial \Pi_{\alpha\beta}}{\partial x_\beta} &= 0 \\ \frac{\partial}{\partial t} N \bar{\varepsilon} + \operatorname{div} \mathbf{q} &= 0\end{aligned}$$

Первое из них есть обычное гидродинамическое уравнение непрерывности, выражающее собой сохранение массы газа.

Второе уравнение выражает сохранение импульса.

Тензор $\Pi_{\alpha\beta}$ определен как

$$\Pi_{\alpha\beta} = \int m v_\alpha v_\beta f d\Gamma$$

и представляет собой тензор плотности потока импульса: его компонента $\Pi_{\alpha\beta}$ есть α -я компонента импульса, переносимого молекулами в 1 с через единичную площадку, перпендикулярную оси x_β .

Наконец, (5,7) есть уравнение сохранения энергии; вектор \mathbf{q} определен как

$$\mathbf{q} = \int \varepsilon \mathbf{v} f d\Gamma$$

и представляет собой плотность потока энергии в газе.

Для приведения (5,6) Н(5,7)К Виду обычных гидродинамических уравнений надо, однако, еще выразить $\Pi_{\alpha\beta}$ и \mathbf{q} через

макроскопические величины.

Мы уже упоминали, что макроскопическое описание газа предполагает достаточную малость градиентов его макроскопических характеристик.

В таком случае в первом приближении можно считать, что в каждом отдельном участке газа успевает установиться тепловое равновесие, между тем как весь газ в целом не находится в равновесии.

Другими словами, в каждом элементе объема функция распределения f принимается локс совпадающей с равновесной функцией f_0 с теми плотностью, температурой и макроскопической скоростью, которые имеются в данном элементе.

Такое приближение означает пренебрежение всеми диссипативными процессами. Уравнения (5,6 – 7) сводятся при этом к уравнениям гидродинамики идеальной жидкости.

Убедимся в этом.

Равновесное распределение в участке газа,

движущемся как целое со скоростью \mathbf{V} ,

отличается от равновесного распределения распределения в неподвижном газе лишь преобразованием Галилея;

перейдя в систему отсчета K' ,

движущуюся вместе с газом, мы получим обычное распределение Больцмана.

Скорости \mathbf{v}' молекул в этой системе связаны с их скоростями в исходной системе K посредством $\mathbf{V} = \mathbf{v}' + \mathbf{V}$.

Пишем

$$\Pi_{\alpha\beta} = mN \langle v_\alpha v_\beta \rangle = mN \langle (V_\alpha + v'_\alpha) (V_\beta + v'_\beta) \rangle = mN (V_\alpha V_\beta + \langle v'_\alpha v'_\beta \rangle)$$

члены $V_\alpha v'_\beta$ и $V_\beta v'_\alpha$ обращаются в нуль при усреднении по направлению K' равновероятны.

По этой же причине

$$\langle v'_\alpha v'_\beta \rangle = \frac{1}{3} \langle v'^2 \rangle \delta_{\alpha\beta}$$

средний же квадрат тепловой скорости $\langle v'^2 \rangle = 3T/m$, где T - температура газа.

Наконец, заметив, что NT есть давление газа \hat{P} , получим

$$\Pi_{\alpha\beta} = \rho V_\alpha V_\beta + \delta_{\alpha\beta} P$$

т.

е.

известное выражение для тензора потока импульса в идеальной жидкости; уравнение (5,6) с этим тензором эквивалентно гидродинамическому уравнению Эйлера (см.

VI, § 7).

Для преобразования интеграла (5,9) замечаем, что энергия молекулы ε в системе отсчета K связана с ее энергией ε' в системе K посредством

$$\varepsilon = \varepsilon' + m \mathbf{V} \mathbf{v}' + \frac{1}{2} m V^2$$

Подставив это выражение и $\mathbf{v} = \mathbf{v}' + \mathbf{V}$ в $\mathbf{q} = N \overline{\varepsilon \mathbf{v}}$, получим

$$\mathbf{q} = N \mathbf{V} \left[\frac{m V^2}{2} + \frac{m}{3} \overline{v'^2} + \overline{\varepsilon'} \right] = \mathbf{V} \left(\frac{\rho V^2}{2} + P + N \overline{\varepsilon'} \right)$$

Но $N \overline{\varepsilon'}$ есть термодинамическая внутренняя энергия газа, отнесенная к единице объема; сумма же $N \overline{\varepsilon'} + P$ есть тепловая функция W того же количества газа.

Таким образом,

$$\mathbf{q} = \mathbf{V} \left(\frac{\rho V^2}{2} + W \right)$$

в согласии с известным выражением потока энергии в гидродинамике идеальной жидкости (см.

VI, § 6).

Наконец, остановимся на законе сохранения момента импульса в кинетическом уравнении.

Строгий закон сохранения должен иметь место лишь для полного момента газа, складывающегося из орбитального момента молекул в их поступательном движении и их собственных вращательных моментов M ; плотность полного момента дается суммой двух интегралов

$$\int [\mathbf{r} \mathbf{p}] f d\Gamma + \int M f d\Gamma$$

Но эти два члена имеют различный порядок величины.

Орбитальный момент относительного движения двух молекул, находящихся на среднем расстоянии \bar{r} друг от друга, порядка величины $m \bar{v}$; собственный же момент молекулы $M \sim m \bar{v} d$, т.

е.

мал по сравнению с орбитальным моментом (поскольку всегда $d \ll \bar{r}$).

Естественно поэтому, что кинетическое уравнение Больцмана, отвечающее первому неисчезающему приближению по малой ве-

личине d/r , не может учесть малых изменений орбитального момента, связанных с обменом между двумя частями полного момента (5,13).

С этим связано то обстоятельство, что уравнение Больцмана сохраняет полный орбитальный момент газа: из равенства $\int \mathbf{p} \text{St} f d\Gamma = 0$, выражающего сохранение импульса, автоматически следует, что и

$$\int [\mathbf{r}\mathbf{p}] \text{St} f d\Gamma = \left[\mathbf{r} \int \mathbf{p} \text{St} f d\Gamma \right] = 0$$

Происхождение этого свойства очевидно: поскольку в уравнении Больцмана столкновения рассматриваются как происходящие в одной точке, то вместе с суммой импульсов сталкивающихся молекул сохраняется также и сумма их орбитальных моментов.

Чтобы получить уравнение, описывающее изменение орбитального момента, надо было бы учесть члены следующего порядка по d/r , связанные с тем, что в момент соударения молекулы находятся на конечном расстоянии друг от друга.

В то же время, однако, самый процесс обмена моментом между поступательными и вращательными степенями свободы

может быть описан в рамках уравнения Больцмана соотношением вида

$$\frac{d\mathfrak{M}}{dt} = \int M \text{St} f d\Gamma$$

где \mathfrak{M} - плотность собственного момента вращения молекул.

Поскольку при столкновении молекул сумма их собственных моментов не обязана сохраняться,

интеграл в правой стороне (5,15) вообще говоря,

отличен от нуля и определяет скорость изменения величины \mathfrak{M} .

Если в газе каким-либо искусственным способом создана отличная от нуля плотность момента, то его дальнейшая релаксация будет определяться уравнением (5, 15).

примеры

4.3.3 Симметрия кинетических коэффициентов и принцип Онсагера

Обсудим подробно симметрию кинетических коэффициентов.

обзор принципа Онсагера симметрии кинетических коэффициентов в кинетике теории

Коэффициенты теплопроводности и вязкости относятся к категории величин, определяющих процессы релаксации слабо неравновесных систем.

Эти величины - кинетические коэффициенты - удовлетворяют принципу симметрии (принцип Онсагера), который может быть установлен в общем виде, без рассмотрения конкретных релаксационных механизмов.

Но при конкретном вычислении кинетических коэффициентов с помощью кинетических уравнений принцип симметрии не дает каких-либо условий, которые должны были бы дополнительно налагаться на решение уравнений.

При таком вычислении требования этого принципа удовлетворяются, разумеется, автоматически.

Полезно проследить за тем, каким образом это происходит.

Напомним, что в общей формулировке из статистической физики принципа Онсагера фигурирует набор величин x_a , характеризующих неравновесность системы, и набор «термодинамически сопряженных» с ними величин через энтропию S системы: $X_a = -\partial S / \partial x_a$.

Процесс релаксации слабо неравновесной системы описывается уравнениями, определяющими скорости изменения величин x_a в виде линейных функций величин X_a :

$$\dot{x}_a = - \sum_b \gamma_{ab} X_b$$

где γ_{ab} – кинетические коэффициенты.

Согласно принципу Онсагера, если x_a и x_b одинаково ведут себя при обращении времени, то

$$\gamma_{ab} = \gamma_{ba}.$$

При этом скорость изменения энтропии дается квадратичной формой

$$\dot{S} = - \sum_a X_a \dot{x}_a = \sum_{a,b} \gamma_{ab} X_a X_b$$

Первым из этих выражений часто бывает удобным пользоваться для установления соответствия между величинами \dot{x}_a и X_a .

принцип Онсагера в случае теплопроводности

В случае теплопроводности в качестве «скоростей» \dot{x}_a рассматриваем компоненты q'_α вектора диссипативного теплового потока (в каждой заданной точке среды);

индекс a совпадает при этом с векторным индексом α .

Соответствующими величинами X_a будут тогда производные $T^{-2} \partial T / \partial x_\alpha$.

Роль уравнений (4.3.3) играют равенства $q'_\alpha = -\varkappa_{\alpha\beta} \partial T / \partial x_\beta$, так что кинетическими коэффициентами γ_{ab} являются величины $T^2 \varkappa_{\alpha\beta}$.

Согласно принципу Онсагера должно быть

$$\varkappa_{\alpha\beta} = \varkappa_{\beta\alpha}.$$

принцип Онсагера в случае вязкой жидкости

Аналогичным образом, в случае вязкости в качестве величин \dot{x}_a рассматриваем компоненты тензора вязкого потока импульса $\sigma'_{\alpha\beta}$, а соответствующими X_a являются $-V_{\alpha\beta}/T$ (индексу a отвечает при этом пара тензорных индексов $\alpha\beta$).

Роль уравнения (4.3.3) играют соотношения $\tilde{\sigma}'_{\alpha\beta} = \eta_{\alpha\beta\gamma\delta} V_{\gamma\delta}$, а кинетическими коэффициентами являются величины $T \eta_{\alpha\beta\gamma\delta}$.

Согласно принципу Онсагера должно быть

$$\eta_{\alpha\beta\gamma\delta} = \eta_{\gamma\delta\alpha\beta}.$$

симметрия коэффициентов может быть следствием кинетических уравнений, а не изотропией среды

(? почему кст так, теорема Нетер тут что ли дает симметрию уравнений из изотропии среды мб?)

В рассмотренных в предыдущих параграфах задачах о теплопроводности и вязкости газов указанная симметрия тензоров $x_{\alpha\beta}$ и $\eta_{\alpha\beta\gamma\delta}$ возникала автоматически уже как следствие изотропии среды, безотносительно к решению кинетического уравнения.

Покажем, однако, что эта симметрия возникла бы и в результате решения кинетического уравнения, безотносительно к изотропии газа.

Схема решения задач о теплопроводности и вязкости в слабо неоднородном газе состояла в том, что поправка к равновесной функции распределения ищется в виде

$$\chi = \sum_a g_a(\Gamma) X_a$$

и для функций g_a получаются уравнения вида

$$L_a = I(g_a).$$

Величинами L_a являются в случае теплопроводности компоненты вектора

$$T[\varepsilon(\Gamma) - c_p T] v_\alpha,$$

или в случае вязкости, тензора

$$-T \left[m v_\alpha v_\beta - \frac{\varepsilon(\Gamma)}{c_v} \delta_{\alpha\beta} \right].$$

Решения уравнений (4.3.3) должны удовлетворять дополнительным условиям

$$\int f_0 g_a d\Gamma = 0, \quad \int f_0 g_a \varepsilon d\Gamma = 0, \quad \int f_0 g_a \mathbf{p} d\Gamma = 0$$

С учетом этих условий кинетические коэффициенты $\gamma_{\alpha\beta}$ могут быть записаны в виде интегралов

$$T^2 \gamma_{ab} = - \int f_0 L_a g_b d\Gamma$$

Доказательство симметрии $\gamma_{ab} = \gamma_{ba}$ сводится, таким образом, к доказательству равенства интегралов

$$\int f_0 L_a g_b d\Gamma = \int f_0 L_b g_a d\Gamma$$

Оно основано на свойстве «самосопряженности» линеаризованного оператора I , к которому можно прийти следующим образом.

Рассмотрим интеграл

$$\int f_0 \varphi I(\psi) d\Gamma = \int f_0 f_{01} w' \varphi (\psi' + \psi'_1 - \psi - \psi_1) d^4\Gamma$$

где $\psi(\Gamma), \varphi(\Gamma)$ - любые две функции переменных Γ .

Поскольку интегрирование производится по всем переменным $\Gamma, \Gamma_1, \Gamma', \Gamma'_1$ можно, не меняя интеграла, произвести любое их переобозначение.

Произведем переобозначение $\Gamma, \Gamma' \leftrightarrow \Gamma_1, \Gamma'_1$, а затем в каждом из двух получающихся таким образом форм интеграла - еще переобозначение $\Gamma, \Gamma_1 \leftrightarrow \Gamma', \Gamma'_1$.

Взяв сумму всех четырех выражений, имеем

$$\int f_0 \varphi I(\psi) d\Gamma = \frac{1}{4} \int f_0 f_{01} [w'(\varphi + \varphi_1) - w(\varphi' + \varphi'_1)] [(\psi' + \psi'_1) - (\psi + \psi_1)] d^4\Gamma$$

(обозначения w и w' из (3.5)).

Рассмотрим теперь такой же интеграл, в котором функции $\psi(\Gamma)$ и $\varphi(\Gamma)$ заменены соответственно на $\varphi(\Gamma^T)$ и $\psi(\Gamma^T)$ (не меняя при этом переменных в w и w' !).

Произведя в этом интеграле переобозначение $\Gamma^T, \Gamma_1^T, \dots \rightarrow \Gamma, \Gamma_1, \dots$ и воспользовавшись принципом детального равновесия (2.3), получим

$$\int f_0 \psi^T I(\varphi^T) d\Gamma = \frac{1}{4} \int f_0 f_{01} [w(\psi + \psi_1) - w'(\psi' + \psi'_1)] [(\varphi' + \varphi'_1) - (\varphi + \varphi_1)] d^4\Gamma$$

(учтено также, что $f_0(\Gamma^T) = f_0(\Gamma)$).

Раскрыв в (9.8) и (9.9) квадратные скобки и сравнив их почленно, убедимся, что оба интеграла равны друг другу.

При сравнении надо учесть соотношение унитарности (2.9), в силу которого имеем, например,

$$\int f_0 f_{01} w(\psi + \psi_1)(\varphi + \varphi_1) d^4\Gamma = \int f_0 f_{01} w'(\psi + \psi_1)(\varphi + \varphi_1) d^4\Gamma$$

(соотношение (2.9) применено здесь к интегрированию по переменным Γ', Γ'_1 , от которых в подынтегральном выражении зависят только w и w').

Таким образом, приходим к равенству

$$\int f_0 \varphi I(\psi) d\Gamma = \int f_0 \psi^T I(\varphi^T) d\Gamma$$

Отметим, что если принцип детального равновесия справедлив в своей простейшей форме (2.8), $w = w'$, то соотношение (9.10) сводится к буквальной самосопряженности оператора I :

$$\int f_0 \varphi I(\psi) d\Gamma = \int f_0 \psi I(\varphi) d\Gamma$$

где в обоих интегралах фигурируют функции φ и ψ одних и тех же переменных Γ (это сразу очевидно при $w = w'$ из выражения (9.8))

Возвращаясь к кинетическим коэффициентам, произведем в первом интеграле (9.7) переобозначение $\Gamma \rightarrow \Gamma^T$ и учтем, что

$$L_a(\Gamma^T) = \pm L_a(\Gamma)$$

(верхний знак относится к случаю вязкости, нижний - теплопроводности).

Воспользуемся теперь соотношениями (4.3.3) и (9.10).

При этом в (9.10) можно производить интегрирование по Γ^T вместо Γ , значение интеграла от этого, очевидно, не изменится.

Имеем

$$\int f_0 g_b L_a d\Gamma = \pm \int f_0 g_b^T I(g_a) d\Gamma^T = \pm \int f_0 g_a^T I(g_b) d\Gamma^T = \pm \int f_0 g_a^T L_b(\Gamma) d\Gamma^T.$$

Теперь достаточно переобозначить в правой части равенства $\Gamma^T \rightarrow \Gamma$, и с учетом (9.12) мы получим требуемый результат равенства нужных интегралов.

(??) диагональные кинетические коэффициенты положительны, это следует из закона возрастания энтропии

Кинетические коэффициенты должны удовлетворять также и условиям, следующим из закона возрастания энтропии;

в частности, должны быть положительны «диагональные» коэффициенты γ_{aa} .

Поскольку кинетическое уравнение обеспечивает возрастание энтропии, то естественно, что при вычислении с его помощью кинетических коэффициентов эти условия удовлетворяются автоматически.

Возрастание энтропии выражается неравенством

$$-\int \ln f \cdot \text{St} f d\Gamma > 0$$

(до этого соберу эту теорию!!!)

Подставив сюда

$$f = f_0 \left(1 + \frac{\chi}{T}\right), \quad \text{St } f = \frac{f_0}{T} I(\chi),$$

имеем

$$- \int \ln f_0 \text{St } f d\Gamma - \frac{1}{T} \int f_0 \ln \left(1 + \frac{\chi}{T}\right) I(\chi) d\Gamma > 0$$

Первый интеграл обращается в нуль тождественно, а во втором пишем, ввиду малости χ , $\ln(1 + \chi/T) \approx \chi/T$ и находим

$$- \int f_0 \chi I(\chi) d\Gamma > 0$$

Этим неравенством и обеспечиваются необходимые свойства кинетических коэффициентов. В частности, при $\chi = g_a$ оно выражает собой положительность γ_{aa}

пример принципа симметрии: следствие принципа Онсагера из уравнения Больцмана

Покажем на примере тензора $\eta_{ik\alpha\beta}$, каким образом принцип симметрии кинетических коэффициентов Онсагера непосредственно следует из уравнения Больцмана.

Если справедлив принцип детального равновесия $w = w'$, то оператор Ω является самосопряженным:

$$\langle \chi_{\alpha\beta} \Omega \chi_{ik} \rangle = \langle \chi_{ik} \Omega \chi_{\alpha\beta} \rangle$$

поэтому

$$\eta_{ik\alpha\beta} = \eta_{\alpha\beta ik}$$

что является содержанием принципа Онсагера.

(???)

Вследствие H -теоремы Больцмана диагональные элементы оператора Ω неотрицательны:

$$\eta_{ikik} \geq 0$$

Это условие означает, что диагональные кинетические коэффициенты всегда неотрицательны.

Заметим, что положительность кинетических коэффициентов в термодинамике доказывается из постулата возрастания энтропии, а в кинетической теории и закон возрастания энтропии, и положительность кинетических коэффициентов являются следствиями уравнения Больцмана и закона унитарности столкновений.

Итак, задача вычисления любого кинетического коэффициента x сводится к решению уравнения

$$\hat{\Omega}\chi + N = 0$$

причем с точностью до множителя $x = \langle \chi, \Omega \chi \rangle$.

Интегрирование этого уравнения может быть точно проведено в простейших модельных случаях.

В общем случае оно решается приближенно, и наиболее употребительным приближенным методом решения является так называемый метод моментов, или метод Чепмена-Энскога.

обоснование метода моментов

(оно какое-то есть, пока мне не актуально оно)

Обоснование этого метода проводится с помощью вариационного принципа.

Домножим уравнение (1.59) на $f^0\chi$ и проинтегрируем по Γ :

$$\langle \chi, \Omega \chi \rangle + \langle N, \chi \rangle = 0$$

Рассмотрим класс функций, определенных условием

$$\langle \varphi, \Omega \varphi \rangle + \langle N, \varphi \rangle = 0$$

Легко проверить, что таких функций бесконечно много, поскольку любая функция

$$-\psi \frac{\langle N \psi \rangle}{\langle \psi, \Omega \psi \rangle}$$

удовлетворяет этому уравнению:

$$\frac{\langle N \psi \rangle^2}{\langle \psi, \Omega \psi \rangle^2} \langle \psi, \Omega \psi \rangle - \frac{\langle N \psi \rangle^2}{\langle \psi, \Omega \psi \rangle} = 0$$

Покажем, что из всех функций, удовлетворяющих условию (1.60), максимальное значение для функционала $\langle \varphi, \Omega \varphi \rangle$ даст точное решение кинетического уравнения (1.59). В самом деле, из закона возрастания энтропии следует, что

$$A = \langle (\varphi - \chi), \Omega(\varphi - \chi) \rangle \geq 0$$

Раскроем это выражение, считая оператор Ω самосопряженным и учитывая соотношения (1.59) и (1.60):

$$\begin{aligned} & \langle \varphi, \Omega \varphi \rangle - \langle \varphi, \Omega \chi \rangle - \langle \chi, \Omega \varphi \rangle + \langle \chi, \Omega \chi \rangle = \\ & = \langle \varphi, \Omega \varphi \rangle + \langle \chi, \Omega \chi \rangle - 2\langle \varphi, \Omega \chi \rangle = \\ & = \langle \varphi, \Omega \varphi \rangle + \langle \chi, \Omega \chi \rangle + 2\langle \varphi, N \rangle = \\ & = \langle \chi, \Omega \chi \rangle - \langle \varphi, \Omega \varphi \rangle \geq 0 \end{aligned}$$

Знак равенства имеет место при условии $\chi = \varphi$.

Отсюда следует, что уравнение (1.59) можно представить как решение вариационной задачи на условный экстремум функционала $\langle \varphi, \Omega \varphi \rangle$ при условии (1.60).

Приближенное решение уравнения (1.59) будем искать в виде конечного разложения:

$$\varphi = \sum_{n=1}^{n=n_0} c_n \psi_n(\Gamma),$$

Покажем, что из всех функций, удовлетворяющих условию (1.60), максимальное значение для функционала $\langle \varphi, \Omega \varphi \rangle$ даст точное решение кинетического уравнения (1.59).

В самом деле, из закона возрастания энтропии следует, что

$$A = \langle (\varphi - \chi), \Omega(\varphi - \chi) \rangle \geq 0$$

Раскроем это выражение, считая оператор Ω самосопряженным и учитывая соотношения (1.59) и (1.60):

$$\begin{aligned} & \langle \varphi, \Omega \varphi \rangle - \langle \varphi, \Omega \chi \rangle - \langle \chi, \Omega \varphi \rangle + \langle \chi, \Omega \chi \rangle = \\ & = \langle \varphi, \Omega \varphi \rangle + \langle \chi, \Omega \chi \rangle - 2\langle \varphi, \Omega \chi \rangle = \\ & = \langle \varphi, \Omega \varphi \rangle + \langle \chi, \Omega \chi \rangle + 2\langle \varphi, N \rangle = \\ & = \langle \chi, \Omega \chi \rangle - \langle \varphi, \Omega \varphi \rangle \geq 0 \end{aligned}$$

Знак равенства имеет место при условии $\chi = \varphi$.

Отсюда следует, что уравнение (1.59) можно представить как решение вариационной задачи на условный экстремум функционала $\langle \varphi, \Omega \varphi \rangle$ при условии (1.60).

Приближенное решение уравнения (1.59) будем искать в виде конечного разложения:

$$\varphi = \sum_{n=1}^{n=n_0} c_n \psi_n(\Gamma),$$

Приближенное решение уравнения (1.59) будем искать в виде конечного разложения:

$$\varphi = \sum_{n=1}^{n=n_0} c_n \psi_n(\Gamma)$$

где $\{\psi_n(\Gamma)\}$ - некоторый набор линейно независимых функций.

Тогда, как следствие вариационного принципа,

наилучшим приближением функции такого вида к точному решению будет функция, коэффициенты c_n которой приводят к максимальному значению величины:

$$\langle \varphi, \Omega \varphi \rangle = \sum_{n=1}^{n=n_0} c_n c_m \Omega_{mn}$$

и удовлетворяют условию (1.60):

$$\sum_{n,m} c_n c_m \Omega_{mn} + \sum_k c_k N_k = 0$$

где $\Omega_{mn} = \langle \psi_m, \Omega \psi_n \rangle$, $N_k = \langle \psi_k, N \rangle$. Коэффициенты c_n будем искать методом неопределенных множителей Лагранжа.

Для этого составим функцию

$$\Phi = \sum_{n,m} c_n c_m \Omega_{mn} - \lambda \left\{ \sum_{n,m} c_n c_m \Omega_{mn} + \sum_k c_k N_k \right\}$$

Согласно методу Лагранжа,

$$\frac{\partial \Phi}{\partial c_n} = 2(1 - \lambda) \sum_m c_m \Omega_{mn} - \lambda N_k = 0$$

Умножим последнее выражение на c_k и просуммируем по $k = 1 \div n_0$:

$$2(1 - \lambda) \sum_{km} c_k c_m \Omega_{km} - \lambda \sum_k c_k N_k = 0$$

Используя то, что обе суммы в последнем выражении равны между собой с точностью до знака (см.

(1.61)) и не равны нулю, получаем

$$2(1 - \lambda) + \lambda = 0; \quad \lambda = 2$$

Найденное значение λ подставим в выражение (1.62).

То-гда

$$\sum_m c_m \Omega_{km} + N_k = 0$$

Таким образом, для определения n_0 коэффициентов c_k мы имеем систему линейных алгебраических неоднородных уравнений.

Если число коэффициентов n_0 стремится к бесконечности, то система уравнений (1.63) эквивалентна исходному интегральному уравнению (1.59) и определяет точное решение задачи в виде разложения по полному набору функций $\{\psi_n(\Gamma)\}$. В случае конечного числа n_0 эта система уравнений определяет приближенное решение уравнения (1.59), причем, как следует из вариационного принципа, это решение дает значение кинетического коэффициента $k_{n_0} = \langle \varphi, \Omega \varphi \rangle$, которое меньше точного значения этого коэффициента.

Вариационный принцип не дает возможности определить точность вычисления кинетического коэффициента, но гарантирует, что

$$k_1 \leq k_2 \leq \dots \leq k_{n_0} \leq \dots k_\infty$$

Приближенное решение тем ближе к точному значению (при заданном n_0), чем меньше недиагональные матричные элементы Ω_{mn} по сравнению с диагональными.

В частности, если система функций $\{\psi_n(\Gamma)\}$ совпадает с системой собственных функций оператора столкновений, т.е.

$$\hat{\Omega}\psi_n = \Omega_n\psi_n$$

то матрица Ω_{mn} диагональна и метод моментов сразу приводит к точному решению задачи:

$$c_k = -\frac{N_k}{\Omega_k}$$

Обычно решение задачи на собственные значения оператора неизвестно, и в качестве функций ψ_n выбирают набор ортогональных полиномов от скорости, причем в качестве ψ_1 берут неоднородность N , так что

$$N_k = \langle \psi_k, N \rangle = \langle N, N \rangle \delta_{k1}$$

Практика показывает, что метод моментов дает хорошее приближение уже для достаточно небольшого n_0 .

Физической причиной этого является то, что в нейтральных газах потенциал взаимодействия молекул - короткодействующий и вероятность столкновения слабо зависит от относительной скорости сталкивающихся частиц.

Обычно уже одномоментное приближение оказывается достаточно удовлетворительным, двухмоментное приближение меняет кинетические коэффициенты не более чем на 10%, а последующие приближения дают поправку не более 1%.

Исключением из этого правила является применение метода моментов к плазме.

В этом случае хороший результат получается только при $n \approx 10$.

Это связано с тем, что вероятность столкновения при кулоновском взаимодействии сильно зависит от относительной скорости сталкивающихся частиц ($\sim 1/v_{\text{отн}}^4$ - формула Резерфорда).

метод моментов а.к.а. метод Чепмена-Энскога

(????)

Одномоментное приближение

(всё тот же максимум)

Повторим решение задачи

$$\hat{\Omega}\chi + N = 0$$

в одномоментном приближении.

Ищем χ в виде $\chi = cN$. Умножим исходное уравнение на Nf^0 и проинтегрируем по всем Γ :

$$c\Omega_{NN} + \langle N, N \rangle = 0$$

Отсюда следует, что

$$c = -\frac{\langle N, N \rangle}{\Omega_{NN}}.$$

Интеграл столкновений равен

$$I_{st} = f^0 \hat{\Omega}\chi = -f^0 N = -\frac{1}{c} f^0 \chi = -\frac{1}{c} (f - f^0)$$

покуда

$$\tau = -c = \frac{\langle N, N \rangle}{S_{NN}}.$$

В этом приближении оператор Ω сводится к умножению на τ^{-1} .

Раньше мы показали, что тензор вязких напряжений равен

$$\begin{aligned} \sigma_{ik} &= \eta_{ik\alpha\beta} \{ \nabla_\beta V_\alpha \} \\ \eta_{ik\alpha\beta} &= -\frac{m^2}{T} \langle \{ u_i u_k \} \chi_{\alpha\beta} \rangle \end{aligned}$$

где $\chi_{\alpha\beta}$ удовлетворяет условию

$$\Omega_{\chi_{\alpha\beta}} + \{ u_\alpha u_\beta \} = 0$$

В τ -приближении

$$\frac{1}{\tau} \chi_{\alpha\beta} + \{ u_\alpha u_\beta \} = 0$$

Следовательно,

$$\chi_{\alpha\beta} = -\tau \{ u_\alpha u_\beta \}$$

Таким образом,

$$\begin{aligned} \eta_{ik\alpha\beta} &= \frac{m^2 \tau}{T} \langle \{ u_i u_k \}, \{ u_\alpha u_\beta \} \rangle = \\ &= \frac{m^2 \tau}{T} \int d^3 \mathbf{v} f^0 \{ u_i u_k \} \{ u_\alpha u_\beta \}. \end{aligned}$$

Для вычисления этого интеграла следует заметить,

что он обращается в нуль,

если хотя бы одна из компонент повторяется нечетное число раз.

В силу симметрии подынтегрального выражения интеграл можно представить в виде

$$\eta_{ik\alpha\beta} = A \delta_{ik} \delta_{\alpha\beta} + B \delta_{i\alpha} \delta_{k\beta} + C \delta_{i\beta} \delta_{k\alpha}$$

Поскольку

$$\{ u_i u_k \} = u_i u_k - \frac{1}{3} \delta_{ik} u^2 = 0$$

то

$$\eta_{ii\alpha\beta} = 3A \delta_{\alpha\beta} + B \delta_{\alpha\beta} + C \delta_{\alpha\beta}$$

или

$$3A + B + C = 0$$

Из явного вида интеграла следует (симметрия кинетических коэффициентов), что $\eta_{ik\alpha\beta} = \eta_{\alpha\beta ik}$; поэтому $B = C$.

Тогда получаем, что

$$B = C = -\frac{3}{2}A$$

и

$$\eta_{ik\alpha\beta} = B \left(-\frac{2}{3}\delta_{ik}\delta_{\alpha\beta} + \delta_{i\alpha}\delta_{k\beta} + \delta_{i\beta}\delta_{k\alpha} \right).$$

Упростим правую часть соотношения (1.64) по парам индексов i, α и k, β :

$$\begin{aligned} \langle \{u_i u_k\}, \{u_i u_k\} \rangle &= \left\langle \left(u_i u_k - \frac{1}{3}\delta_{ik}u^2 \right), \left(u_i u_k - \frac{1}{3}\delta_{ik}u^2 \right) \right\rangle = \\ &= \left\langle u^4 + \frac{1}{3}u^4 - \frac{2}{3}u^4 \right\rangle = \frac{2}{3}u^4 \end{aligned}$$

С другой стороны, из (1.65) следует, что $\eta_{ikik} = 10B$.

Отсюда следует, что

$$\frac{m^2\tau}{T} \int d^3\mathbf{u} f^0 \frac{2}{3}u^4 = 10B$$

Поскольку

$$\langle u^k \rangle = u_T^k (k+1)!!$$

То

$$B = \frac{m^2\tau}{T} n \left(\frac{T}{m} \right)^2 \frac{2}{30} \times 3 \times 5 = \tau T n = \tau p$$

Таким образом,

$$\begin{aligned} \eta_{ik\alpha\beta} &= \tau p \left(-\frac{2}{3}\delta_{ik}\delta_{\alpha\beta} + \delta_{i\alpha}\delta_{k\beta} + \delta_{i\beta}\delta_{k\alpha} \right) \\ \sigma_{ik} &= \tau p \left(-\frac{2}{3}\delta_{ik}\delta_{\alpha\beta} + \delta_{i\alpha}\delta_{k\beta} + \delta_{i\beta}\delta_{k\alpha} \right) \{ \nabla_\beta V_\alpha \} = \\ &= \tau p \left(-\frac{2}{3}\delta_{ik}\delta_{\alpha\beta} + \delta_{i\alpha}\delta_{k\beta} + \delta_{i\beta}\delta_{k\alpha} \right) \times \\ &\times \frac{1}{2} \left(\nabla_\beta V_\alpha + \nabla_\alpha V_\beta - \frac{2}{3}\delta_{\alpha\beta} \operatorname{div} \mathbf{V} \right) = \\ &= \eta \left(\nabla_i V_k + \nabla_k V_i - \frac{2}{3}\delta_{ik} \operatorname{div} \mathbf{V} \right) \end{aligned}$$

Обратим внимание, что выражение для коэффициента вязкости в точности совпадает с выражением, которое может быть получено из элементарных соображений.

Критерий устойчивости системы из принципа Онзагера

матрица кинетических коэффициентов должна быть положительно определенной – это гарантирует возрастание энтропии. Это первая часть теоремы Онзагера.

в термоэлектрических явлениях это полезно будет.

пока там пишу, сюда мб вернусь.

Обоснование τ -приближения

(???)

интеграл столкновений обеспечивает неубывание энтропии

Почему интеграл столкновений обеспечивает неубывание энтропии, хотя уравнение Лиувилля для системы частиц обратимо?

пример: вычисление теплопроводности методом Чепмана-Энскога

В качестве примера вычислим вкратце коэффициент теплопроводности методом Чепмена-Энскога.

Подробное решение и дополнительные соображения можно посмотреть в соответствующем разделе про газы.

Будем считать, что газ как целое покоится, а его неравновесность обусловлена исключительно неоднородным стационарным распределением температуры $T(\mathbf{R})$, то есть в газе создан градиент температуры.

В этом случае неоднородность

$$N = \left(\frac{mu^2}{2T} - \frac{5}{2} \right) u_\alpha \nabla_\alpha \frac{1}{T} \ln T$$

и линеаризованное уравнение Больцмана имеет вид

$$\Omega \chi = - \left(\frac{mu^2}{2T} - \frac{5}{2} \right) u_\alpha \frac{1}{T} \nabla_\alpha \ln T.$$

Ищем решение этого уравнения в виде

$$\chi = \chi_\alpha \nabla_\alpha \ln T.$$

Тогда

$$\Omega \chi_\alpha + \left(\frac{mu^2}{2T} - \frac{5}{2} \right) u_\alpha = 0.$$

Пусть решение уравнения (1.66) известно.

Вычислим поток энергии

$$q_\alpha = \int d\Gamma f \frac{mu^2}{2} u_\alpha = \int d\Gamma f_0 (1 + \chi) \frac{mu^2}{2} u_\alpha$$

Поскольку при локально-равновесном распределении тепловой поток отсутствует, то

$$\begin{aligned} q_\alpha &= \int d\Gamma f_0 \chi \frac{mu^2}{2} u_\alpha = \int d\Gamma f_0 \chi \left(\frac{mu^2}{2} - \frac{5}{2} T \right) u_\alpha = \\ &= \int d\Gamma f_0 \left(\frac{mu^2}{2} - \frac{5}{2} T \right) u_\alpha \chi_\beta \nabla_\beta \ln T = \\ &= \int d\Gamma f_0 \left(\frac{mu^2}{2T} - \frac{5}{2} \right) u_\alpha \chi_\beta \nabla_\beta T = \\ &= \left\langle \left(\frac{mu^2}{2T} - \frac{5}{2} \right) u_\alpha, \chi_\beta \right\rangle \nabla_\beta T = -\kappa_{\alpha\beta} \nabla_\beta T \end{aligned}$$

Здесь, добавляя в интеграл член $\frac{5}{2}T$, мы воспользовались тем, что $\langle \chi, u_\alpha \rangle = 0$.

Поэтому коэффициент теплопроводности

$$\kappa_{\alpha\beta} = - \left\langle \left(\frac{mu^2}{2T} - \frac{5}{2} \right) u_\alpha, \chi_\beta \right\rangle.$$

В τ -приближении уравнение (1.67) переписывается как

$$\frac{1}{\tau} \chi_\alpha + \left(\frac{mu^2}{2T} - \frac{5}{2} \right) u_\alpha = 0$$

и имеет решение

$$\chi_\alpha = \tau \left(\frac{mu^2}{2T} - \frac{5}{2} \right) u_\alpha.$$

Вычисление интеграла производится элементарно

$$\kappa_{\alpha\beta} = \tau \int d\Gamma f_0 \left(\frac{mu^2}{2T} - \frac{5}{2} \right)^2 u_\alpha u_\beta = A \delta_{\alpha\beta}$$

След тензора

$$\begin{aligned} \kappa_{\alpha\alpha} &= 3A = \tau \int d\Gamma f_0 \left(\frac{mu^2}{2T} - \frac{5}{2} \right)^2 u^2 = \\ &= \tau n \left\{ \left(\frac{m}{2T} \right)^2 \frac{1}{n} \int d\Gamma f_0 u^6 - 2 \frac{m}{T} \frac{5}{2} \frac{1}{n} \int d\Gamma f_0 u^4 + \frac{25}{4} \frac{1}{n} \int d\Gamma f_0 u^2 \right\} = \\ &= \tau n \left\{ \frac{1}{4} \left(\frac{m}{T} \right)^2 \left(\frac{T}{m} \right)^3 7!! + \frac{5}{2} \left(\frac{m}{T} \right) \left(\frac{T}{M} \right)^2 5!! + \frac{25}{4} \left(\frac{T}{M} \right) 3!! \right\} = \frac{p\tau}{m} \frac{15}{2}. \end{aligned}$$

Поэтому

$$A = \frac{p\tau}{m} \frac{5}{2} = \frac{p\tau c_p}{m}$$

Следовательно,

$$\kappa_{\alpha\beta} = \kappa \delta_{\alpha\beta}, \quad \kappa = \frac{p\tau c_p}{m}$$

Так как далее в каждой кинетической задаче

обобщение на квантовый случай

4.4 Основы квантовой кинетики

(все, с чего оптом стартовать будем)

4.5 Другие уравнения

4.5.1 уравнение баланса энтропии и законы сохранения

Посмотрим на них и на их пользу

уравнение баланса энтропии: суть

уравнение баланса энтропии: примеры

для термоэлектрических явлений оно имеет вид:

$$\frac{\partial S(r, t)}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{J}_S = \mathbf{J}_Q \cdot \nabla \left[\frac{1}{T(r, t)} \right] + \mathbf{J}_e \frac{\epsilon}{T(r, t)}$$

закон сохранения энергии

Потом у Щелкачева с 3 лекции спишу.

$$\frac{\partial}{\partial t} E(r, t) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \cdot \mathbf{j}_E - \mathbf{F}_{ext}(r, t) \cdot \mathbf{j} = 0$$

действительно:

$$\begin{aligned} E(\mathbf{r}, t) &= \sum_i \varepsilon(p_i(t)) \delta(r - r_i(t)) = \int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} \varepsilon(\mathbf{p}) f(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t), \\ \frac{\partial}{\partial t} E(\mathbf{r}, t) &= \sum_i v(p_i(t)) \left(\frac{\partial}{\partial t} p_i(t) \right) \delta(r - r_i(t)) - \sum_i \varepsilon(p_i) \left(\frac{\partial}{\partial t} r_i(t) \right) \frac{\partial}{\partial r} \delta(r - r_i(t)) = \\ &= \sum_i v(p_i(t)) F_i \delta(r - r_i(t)) - \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \left[\sum_i \varepsilon(\mathbf{p}_i) \mathbf{v}_i(t) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i(t)) \right] = \sum_i v(p_i(t)) F_i \delta(r - r_i(t)) - \text{div } \mathbf{J}_E \\ \mathbf{J}_E &= \sum_i \varepsilon(\mathbf{p}_i) \mathbf{v}_i(t) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i(t)) = \int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} \varepsilon(\mathbf{p}) \mathbf{v}(\mathbf{p}) f(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t) \end{aligned}$$

закон сохранения числа частиц

Кинетическое уравнение с любым интегралом столкновений, локальным в координатном пространстве, сохраняет число частиц

$$\frac{\partial n(\vec{r}, t)}{\partial t} + \text{div } \mathbf{J} = 0, \quad \mathbf{J} = \int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} f(\vec{r}, \vec{p}, t) \vec{v}(\vec{p})$$

4.5.2 уравнения для кинетики тепла

обзор главных формул

$$\begin{aligned} \frac{\partial Q(r, t)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \cdot \mathbf{j}_Q &= \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{j}_e \\ \mathbf{j}_Q &= \mathbf{j}_E - \frac{\mu(r, t)}{e} \mathbf{j}_e \\ \boldsymbol{\varepsilon} &= E_{ext} - \nabla \mu / e \end{aligned}$$

Закон сохранения тепла

$$\begin{aligned} dE(r, t) &= T(r, t) dS(r, t) + \mu(r, t) dn(r, t) \\ T(r, t) \frac{\partial S(r, t)}{\partial t} &= \frac{\partial Q(r, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} E(r, t) - \mu(r, t) \frac{\partial}{\partial t} n(r, t). \end{aligned}$$

уравнение теплопроводности

$$\rho_{CP} \frac{\partial T(r, t)}{\partial t} - \text{div } \kappa \nabla T = \dot{q}_V$$

поток тепла и квантовый оператор

хз

5 Диффузионное приближение и модели

Обсудим диффузионное приближение, решим многие модельные примеры и также приведем избранные его применения. Большая часть примеров будет находиться в соответствующих разделах про приложение кинетики к тем или иным явлениям.

5.1 Диффузия и броуновское движение

5.1.1 суть теории диффузии

главные формулы (??!!)

уравнения диффузии??

например,

$$\kappa \partial_x^2 n = \partial_t n$$

связь со случайными процессами (??)

очень актуально!!

5.1.2 Параметры броуновского движения

задача 12 дз, Щелкачев семинар 9!!!.

обзор свойств

В двумерной жидкости нет к-та самодиффузии:

$$D = \int_0^\infty \langle \mathbf{v}(t) \mathbf{v}(0) + \mathbf{v}(0) \mathbf{v}(t) \rangle dt.$$

$\int \frac{1}{t^{d/2}} dt$ расходится на верхнем пределе, при $d < 3$.

среднеквадратичное отклонение броуновской частицы

Найдем среднеквадратичное отклонение броуновской частицы, исходя из уравнения Ланжевена.

Уравнение Ланжевена описывает броуновское движение тяжелой частицы массы M в газе легких частиц с учетом случайной силы $\mathbf{F}^{(rd)}$, действующей на тяжелую частицу со стороны молекул газа:

$$M \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \mathbf{F}^{(rd)}(t) + \mathbf{F}(t)$$

где $\mathbf{F}(t)$ - регулярная внешняя сила, которая также может действовать на частицу. В частности, $\mathbf{F}^{(rd)}(t)$ ответственна за трение.

Усредним это уравнение (по времени или по ансамблю), так что

$$M \frac{d\langle \mathbf{v} \rangle}{dt} = \langle \mathbf{F}^{(cp)}(t) \rangle + \mathbf{F}(t)$$

Мы знаем, что если $\mathbf{F} = \text{const}$, то и $\langle \mathbf{v} \rangle = \text{const}$, причем $\langle \mathbf{v} \rangle = b\mathbf{F}$, где b - подвижность тяжелой частицы. Из гидродинамики известно, что в гидродинамическом режиме для плотных газов и жидкостей (?????)

$$b = 1/(6\pi\eta R),$$

где η - вязкость газа и R - радиус тяжелой частицы, а в свободно-молекулярном режиме для разреженных газов

$$b = 1/(m\nu_{эфф}),$$

где эффективная частота столкновений тяжелой частицы с легкими частицами

$$\nu_{эфф} = \langle v_a^2 \nu(v_a) \rangle / \langle v_a^2 \rangle,$$

и где частота столкновений $\nu(v_a) = n_{\text{газа}} v_a \sigma_t$, а v_a и m - скорость и масса легких частиц).

Но если $\langle \mathbf{v} \rangle = \text{const}$, то суммарная средняя сила должна занулиться:

$$\langle \mathbf{F}^{(\text{сл})}(t) \rangle + \mathbf{F}(t) = 0,$$

то есть должно быть $\langle \mathbf{F}^{(\text{сл})}(t) \rangle = -\mathbf{F}(t) = -\langle \mathbf{v} \rangle / b$. По этой причине запишем случайную силу в виде

$$\mathbf{F}^{(\text{сл})}(t) = -\frac{\mathbf{v}(t)}{b} + \mathbf{f}^{(\text{сл})}(t)$$

тогда по определению $\langle \mathbf{f}^{(\text{сл})}(t) \rangle \equiv 0$, причем это должно быть верно и для общего случая $\mathbf{F}(t) \neq \text{const}$, поскольку $\mathbf{F}^{(\text{сл})}(t)$ не должна зависеть от того, какова регулярная сила $\mathbf{F}(t)$, по крайней мере пока $\langle \mathbf{v} \rangle \ll v_T^{(a)}$ - тепловой скорости легких частиц.

Таким образом, мы получаем следующее уравнение движения тяжелой частицы в газе:

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\gamma \mathbf{v} + \frac{1}{M} \{ \mathbf{f}^{(\text{сл})}(t) + \mathbf{F}(t) \},$$

где $\gamma = 1/(bM) = \frac{m}{M} \nu_{\text{эфф}}$ - коэффициент трения (для случая тяжелой частицы в разреженном газе).

Пусть $\tau_{\text{ст}}$ - характерное время самого столкновения, и пусть $\tau_{\text{ст}} \ll \ll 1/\nu_{\text{эфф}}$, где $1/\nu_{\text{эфф}}$ - характерное время между двумя соседними столкновениями. В таком случае естественно считать столкновения статистически независимыми. Тогда корреляция значений случайной силы $\mathbf{f}^{(\text{сл})}(t)$ должна иметь место только на временах порядка $\tau_{\text{ст}}$.

Однако такие масштабы времен недоступны для нашего статистического описания движения тяжелой частицы, так что этот масштаб времен можно считать нулевым, и тогда естественно считать случайную силу δ -коррелированной, то есть считать, что коррелятор случайной силы имеет вид

$$\langle f_i^{(\text{сл})}(t) f_k^{(\text{сл})}(t') \rangle = \kappa \delta_{ik} \delta(t - t'),$$

где κ - коэффициент, который нам нужно будет ещё определить. Физически эта запись и означает, что корреляция случайной силы имеет место только во время самого столкновения, масштаб которого мы считаем бесконечно малым по отношению ко времени между двумя соседними столкновениями.

Будем далее считать, что сила $\mathbf{F}(t)$ носит осциллирующий характер, так что при усреднении по времени $\langle \mathbf{F}(t) \rangle = 0$, и обозначим полную суммарную силу, действующую на частицу, как $\mathbf{f}^{(\text{полн})}(t) = \mathbf{f}^{(\text{сл})}(t) + \mathbf{F}(t)$, так что

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\gamma \mathbf{v} + \frac{1}{M} \mathbf{f}^{(\text{полн})}(t).$$

Решение этого уравнения имеет очевидный вид

$$\mathbf{v}(t) = \mathbf{v}_0 e^{-\gamma(t-t_0)} + \frac{1}{M} e^{-\gamma t} \int_{t_0}^t e^{\gamma t'} \mathbf{f}^{(\text{полн})}(t') dt'$$

где $\mathbf{v}_0 = \mathbf{v}(t_0)$, причем видно, что при $(t - t_0) \rightarrow +\infty$ влияние начальной скорости \mathbf{v}_0 полностью исчезает, так что при временах $t - t_0 \gg 1/\gamma$ можно считать, что

$$\mathbf{v}(t) = \frac{1}{M} e^{-\gamma t} \int_{-\infty}^t e^{\gamma t'} \mathbf{f}^{(\text{полн})}(t') dt'.$$

Подставим скорость и силу в форме интеграла Фурье, $\mathbf{v}(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathbf{v}_\omega e^{-i\omega t} \frac{d\omega}{2\pi}$, $\mathbf{f}^{(\text{полн})}(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathbf{f}_\omega^{(\text{полн})} e^{-i\omega t} \frac{d\omega}{2\pi}$:

$$\mathbf{v}_\omega e^{-i\omega t} = \frac{e^{-\gamma t}}{M} \int_{-\infty}^t e^{\gamma t'} \mathbf{f}_\omega^{(\text{полн})} e^{-i\omega t'} dt' = \frac{e^{-\gamma t}}{M} \mathbf{f}_\omega^{(\text{полн})} \frac{e^{\gamma t - i\omega t}}{\gamma - i\omega} \equiv \frac{e^{-i\omega t}}{M(\gamma - i\omega)} \mathbf{f}_\omega^{(\text{полн})}$$

Мы здесь пренебрегаем начальным временем, записывая его в виде $-\infty$. На самом деле правильнее считать, что $t_0 = 0$, тогда получится то же самое, разве что нужно подразумевать, что все члены с t_0 очень малы, поэтому мы их отбрасываем.

Откуда

$$\mathbf{v}_\omega = \frac{\mathbf{f}_\omega^{(\text{полн})}}{M(\gamma - i\omega)},$$

и так как $r = \int v(t) dt$, то после интегрирования $\mathbf{r}(t) = \int d\omega \mathbf{r}_\omega e^{-i\omega t} = \int d\omega \int_{-\infty}^t \mathbf{v}_\omega e^{-i\omega t} = \int \frac{\mathbf{v}_\omega}{-i\omega} \frac{d\omega}{2\pi}$. Когда $t_0 \rightarrow -\infty$ подставляем, у нас добавляется еще один член, который по смыслу - начальная координата, а так как мы из нуля начинаем двигаться, то она по итогу интеграла по ω обнуляется (???? именно по этому ведь?) Получаем:

$$\mathbf{r}_\omega = \frac{\mathbf{v}_\omega}{-i\omega} = -\frac{\mathbf{f}_\omega^{(\text{полн})}}{i\omega M(\gamma - i\omega)} \equiv \chi(\omega) \mathbf{f}_\omega^{(\text{полн})},$$

где

$$\chi(\omega) := -\frac{1}{i\omega M(\gamma - i\omega)} \equiv \frac{-1 + i\gamma/\omega}{M(\gamma^2 + \omega^2)}$$

Здесь мы ввели смещение тяжелой частицы согласно $\mathbf{v}(t) = \dot{\mathbf{r}}(t)$.

Для фурье-компонент имеется соотношение:

$$\mathbf{v}(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathbf{v}_\omega e^{-i\omega t} \frac{d\omega}{2\pi} = \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathbf{r}_\omega e^{-i\omega t} \frac{d\omega}{2\pi} = \int_{-\infty}^{+\infty} (-i\omega) \mathbf{r}_\omega e^{-i\omega t} \frac{d\omega}{2\pi},$$

тут учтено, что $\mathbf{v}_0 = 0$.

Если мы усредним соотношение $\mathbf{r}_\omega = \chi(\omega) \mathbf{f}_\omega^{(\text{полн})}$ (при наличии сторонней силы), то оно будет выражать связь между фурье-компонентой сторонней силы и фурье-компонентой средней скорости (или смещения) под действием этой силы, причем $\chi(\omega)$ играет роль динамического отклика (динамической восприимчивости) системы (тяжелой частицы на эту силу. С другой стороны, если нет сторонней силы, то возникающее движение частицы под действием случайной силы есть не что иное, как тепловые флуктуации координат частицы, и в этом случае $\chi(\omega)$ выражает связь между спектральной характеристикой флуктуаций координат (или скорости) и спектром случайной силы. Поскольку в обоих случаях фигурирует одна и та же величина $\chi(\omega)$, то это означает наличие тесной связи между линейным откликом системы на внешнюю силу и спектром тепловых флуктуаций.

Для выяснения этой связи рассмотрим какую-то одну случайную величину

$$x(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} x_\omega e^{-i\omega t} \frac{d\omega}{2\pi}.$$

Тогда

$$\langle x(t)x(t') \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \langle x_\omega x_{\omega'} \rangle e^{-i\omega t - i\omega' t'} \frac{d\omega d\omega'}{(2\pi)^2}.$$

Для того, чтобы коррелятор в условиях однородности времени зависел бы только от разности времен $t - t'$, необходимо, чтобы в интеграле было бы $\omega' = -\omega$, и это может быть достигнуто только, лишь если

$$\langle x_\omega x_{\omega'} \rangle = 2\pi (x^2)_\omega \delta(\omega + \omega') \sim \delta(\omega + \omega').$$

Тогда

$$\langle x(t)x(t') \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} 2\pi (x^2)_\omega \delta(\omega + \omega') e^{-i\omega t - i\omega' t'} \frac{d\omega d\omega'}{(2\pi)^2} = \int_{-\infty}^{+\infty} (x^2)_\omega e^{-i\omega(t-t')} \frac{d\omega}{2\pi}.$$

Это соотношение выражает собой теорему Винера-Хинчина (???? напишу в оптике, действительно ли все так просто?), причем для вещественной величины $x(t)$ естественно должно быть

$$(x^2)_\omega = (x^2)_{-\omega}.$$

Посмотрим частные случаи.

При $t = t'$ получаем, что $\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} (x^2)_\omega \frac{d\omega}{2\pi}$.

Если $(x^2)_\omega = \text{const} = A$, то $\langle x(t)x(t') \rangle = A \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega(t-t')} \frac{d\omega}{2\pi} = A\delta(t-t')$. Последнее условие верно и в обратную сторону.

Случайная величина с такой δ -функциональной функцией корреляции и с такой постоянной спектральной плотностью $(x^2)_\omega$ определяет так называемый белый шум.

Обобщение этих формул на случай нескольких случайных величин очевидно.

Флуктуации скорости тяжелой частицы и действующей случайной силы

Опишем флуктуации скорости тяжелой частицы и случайной силы, действующей на броуновскую частицу, движение которой описывается уравнением Ланжевена.

Если мы рассматриваем движение только под действием случайной силы, то

$$(v_i v_k)_\omega = -i\omega\chi(\omega) \cdot i\omega\chi(-\omega) (f_i^{(\text{сл})} f_k^{(\text{сл})})_\omega = \omega^2 \chi(\omega) \chi^*(\omega) (f_i^{(\text{сл})} f_k^{(\text{сл})})_\omega \equiv \omega^2 |\chi(\omega)|^2 (f_i^{(\text{сл})} f_k^{(\text{сл})})_\omega$$

тогда

$$\langle v_i(t) v_k(t) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} (v_i v_k)_\omega \frac{d\omega}{2\pi} = \int_{-\infty}^{+\infty} \omega^2 |\chi(\omega)|^2 (f_i^{(\text{сл})} f_k^{(\text{сл})})_\omega \frac{d\omega}{2\pi}$$

Учитывая, что для равновесного теплового движения тяжелой частицы (???? почему??)

$$\langle v_i(t) v_k(t) \rangle = (T/M) \delta_{ik},$$

и что для δ -коррелированной случайной силы должно быть

$$(f_i^{(\text{сл})} f_k^{(\text{сл})})_\omega = \kappa \delta_{ik}$$

получим, что

$$\begin{aligned} \frac{T}{M} \delta_{ik} &= \kappa \delta_{ik} \int_{-\infty}^{+\infty} \omega^2 |\chi(\omega)|^2 \frac{d\omega}{2\pi} \\ \frac{T}{M} &= \kappa \int_{-\infty}^{+\infty} \omega^2 \frac{1 + \gamma^2/\omega^2}{M^2 (\gamma^2 + \omega^2)^2} \frac{d\omega}{2\pi} = \frac{\kappa}{2\pi M^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{\gamma^2 + \omega^2} = \frac{\kappa}{2\pi M^2} \cdot \frac{\pi}{\gamma} = \frac{\kappa}{2\gamma M^2}. \end{aligned}$$

Поэтому должно выполняться соотношение

$$\kappa = 2\gamma MT.$$

Таким образом, видим временной коррелятор случайной силы:

$$\langle f_i^{(\text{сл})}(t) f_k^{(\text{сл})}(t') \rangle = 2\gamma MT \delta_{ik} \delta(t-t') = \frac{2T}{b} \delta_{ik} \delta(t-t') = 2T m \nu_{\text{эфф}} \delta_{ik} \delta(t-t').$$

Для спектральных плотностей флуктуаций скоростей и координат теперь можно написать, что

$$\begin{aligned} (v_i v_k)_\omega &= \omega^2 |\chi(\omega)|^2 \cdot 2\gamma MT \delta_{ik}, \\ (x_i x_k)_\omega &= |\chi(\omega)|^2 \cdot 2\gamma MT \delta_{ik}, \end{aligned}$$

причем

$$|\chi|^2 = \frac{1}{[M^2\omega^2(\gamma^2 + \omega^2)]}, \quad \text{Im } \chi = \frac{\gamma}{[M\omega(\gamma^2 + \omega^2)]},$$

так что

$$|\chi|^2 = \frac{\text{Im } \chi}{M\omega\gamma}.$$

Заметим, что выполняется соотношение:

$$(v_i v_k)_\omega = 2T\omega \text{Im } \chi(\omega) \cdot \delta_{ik},$$

или что то же самое, $(x_i x_k)_\omega = \frac{2T}{\omega} \text{Im } \chi(\omega) \cdot \delta_{ik}$. Эта формула составляет содержание флуктуационно-диссипативной теоремы (ФДТ) в применении к данному случаю. (???? а в общем случае я еще не понял, что это такое????)

Временной коррелятор скоростей и смещений

Временной же коррелятор скоростей броуновской частицы есть

$$\langle v_i(t) v_k(t') \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} (v_i v_k)_\omega e^{-i\omega(t-t')} \frac{d\omega}{2\pi} = \delta_{ik} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{2T\gamma e^{-i\omega(t-t')}}{M(\gamma^2 + \omega^2)} \frac{d\omega}{2\pi} = \delta_{ik} \frac{T}{M} e^{-\gamma|t-t'|}$$

причем

$$\int_{t'}^{+\infty} \langle v_i(t) v_k(t') \rangle dt = \delta_{ik} T / (M\gamma) = \delta_{ik} T b \equiv D \delta_{ik}$$

Теперь рассмотрим смещение частицы за время t , именно, $\Delta \mathbf{r}(t) = \mathbf{r}(t_0 + t) - \mathbf{r}(t_0)$, где t_0 - произвольно выбранный начальный момент времени.

Для квадрата смещения имеем, что

$$(\Delta \mathbf{r}(t))^2 = (\mathbf{r}(t_0 + t) - \mathbf{r}(t_0))^2 = \mathbf{r}^2(t_0 + t) + \mathbf{r}^2(t_0) - 2(\mathbf{r}(t_0 + t) \cdot \mathbf{r}(t_0)),$$

откуда (????? это не очень понял, но не особо думал про это. откуда вторая строчка????)

$$\begin{aligned} \langle (\Delta \mathbf{r}(t))^2 \rangle &= \langle \mathbf{r}^2(t_0 + t) \rangle + \langle \mathbf{r}^2(t_0) \rangle - 2 \langle (\mathbf{r}(t_0 + t) \cdot \mathbf{r}(t_0)) \rangle = \\ &= 2 \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} (1 - e^{-i\omega t}) (\mathbf{r}^2)_\omega = \\ &= 2 \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} (1 - e^{-i\omega t}) \frac{6T}{\omega} \text{Im } \chi(\omega) = \\ &= \frac{6T\gamma}{M\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega (1 - e^{-i\omega t})}{\omega^2(\omega + i\gamma)(\omega - i\gamma)} = \\ &= \frac{6T\gamma}{M\pi} \cdot (2\pi i) \cdot (-1) \left\{ \frac{1 - e^{-\gamma t}}{(-\gamma^2)(-2i\gamma)} + \frac{1}{2} \cdot \frac{it}{\gamma^2} \right\} = \\ &= \frac{6Tt}{M\gamma} \left(1 - \frac{1 - e^{-\gamma t}}{\gamma t} \right). \end{aligned}$$

При вычислении этого интеграла мы замкнули контур интегрирования в нижней полуплоскости и учли полный вычет при $\omega = -i\gamma$ и полувычет при $\omega = 0$.

Вспоминая, что $\gamma = 1/(bM)$, находим, что $1/(M\gamma) = b$.

И поскольку $bT = D$, окончательно получаем, что

$$\langle (\Delta \mathbf{r}(t))^2 \rangle = 6Dt \left(1 - \frac{1 - e^{-\gamma t}}{\gamma t} \right).$$

В случае $\gamma t \ll 1$ получаем, что $\langle (\Delta \mathbf{r}(t))^2 \rangle \approx 6Dt \cdot (\gamma t)/2 = 6bT/(bM) \cdot t^2/2 = (3T/M)t^2 = \langle v^2 \rangle t^2$.

Это есть случай свободного движения частицы с тепловой средней скоростью.

В обратном случае $\gamma t \gg 1$ очевидно, что $\langle (\Delta \mathbf{r}(t))^2 \rangle \approx 6Dt$.

Очевидно, что $\langle \Delta x_\alpha(t) \Delta x_\beta(t) \rangle \approx 2Dt \delta_{\alpha\beta}$.

Это есть случай диффузионного движения.

временной коррелятор скоростей в гидродинамике

Найдем временной коррелятор скоростей броуновской частицы.

Покажем, что он имеет именно универсальную степенную асимптотику на больших временах: $\propto 1/t^{d/2}$, где d - это размерность пространства.

Рассмотрим флуктуации скорости течения жидкости в гидродинамике, и для этого выпишем первые два гидродинамических уравнения - уравнение непрерывности и уравнение Навье-Стокса (без внешней силы):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(\rho \mathbf{u}) = 0,$$

$$\rho \frac{d\mathbf{u}}{dt} \equiv \rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\nabla P + \eta \Delta \mathbf{u} + \left(\zeta + \frac{\eta}{3} \right) \text{grad div } \mathbf{u}.$$

Нас будут интересовать здесь небольшие отклонения от равновесия (при $\mathbf{u}_{\text{равн.}} \equiv 0$), и поэтому линеаризуем эти уравнения, записав их в виде

$$\frac{\partial \delta \rho}{\partial t} + \rho \text{div } \mathbf{u} = 0, \quad \rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = -\nabla P + \eta \Delta \mathbf{u} + \left(\zeta + \frac{\eta}{3} \right) \text{grad div } \mathbf{u}$$

Разделим скорость на продольную и поперечную части, согласно определению $\mathbf{u} = \mathbf{u}^{(l)} + \mathbf{u}^{(t)}$, так что $\text{div } \mathbf{u}^{(t)} = 0$, $\text{rot } \mathbf{u}^{(l)} = 0$.

Тогда получаем, что $\frac{\partial \delta \rho}{\partial t} + \rho \text{div } \mathbf{u}^{(l)} = 0$,

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}^{(l)}}{\partial t} = -\nabla P + \eta \Delta \mathbf{u}^{(l)} + \left(\zeta + \frac{\eta}{3} \right) \text{grad div } \mathbf{u}^{(l)},$$

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}^{(t)}}{\partial t} = \eta \Delta \mathbf{u}^{(t)}.$$

Уравнение для поперечных компонент оказалось независимым от остальных и совпадающим с уравнением диффузии.

Только его мы и рассмотрим, обозначив $\nu = \eta/\rho$.

Для корреляционной функции флуктуаций поперечной скорости имеем уравнение

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle u_i^{(t)}(\mathbf{r}, t) u_k^{(t)}(0, 0) \rangle - \nu \Delta \langle u_i^{(t)}(\mathbf{r}, t) u_k^{(t)}(0, 0) \rangle = 0$$

Умножив его на $e^{i\omega t}$ и проинтегрировав по t от 0 до $+\infty$ (одностороннее преобразование Фурье!) получим уравнение

$$-i\omega \langle u_i^{(t)}(\mathbf{r}) u_k^{(t)}(0) \rangle_\omega - \nu \Delta \langle u_i^{(t)}(\mathbf{r}) u_k^{(t)}(0) \rangle_\omega = \langle u_i^{(t)}(\mathbf{r}) u_k^{(t)}(0) \rangle$$

где справа стоит одновременная корреляционная функция.

После преобразования Фурье по координатам очевидно получим, что

$$\langle u_i^{(t)} u_k^{(t)} \rangle_{\omega \mathbf{k}} = \frac{\langle u_i^{(t)} u_k^{(t)} \rangle_{\mathbf{k}}}{\nu k^2 - i\omega}$$

$$\langle u_i^{(t)} u_k^{(t)} \rangle_{\omega \mathbf{k}} = \langle u_i^{(t)} u_k^{(t)} \rangle_{\omega \mathbf{k}} + \langle u_i^{(t)} u_k^{(t)} \rangle_{-\omega \mathbf{k}} = \frac{2\nu k^2 \langle u_i^{(t)} u_k^{(t)} \rangle_{\mathbf{k}}}{\nu^2 k^4 + \omega^2}.$$

Поскольку $\langle u_i(\mathbf{r}) u_k(0) \rangle = \delta_{ik} \frac{TV}{mN} \delta(\mathbf{r}) \equiv \frac{T}{\rho} \delta_{ik} \delta(\mathbf{r})$, то её фурье-образ $\langle u_i u_k \rangle_{\mathbf{k}} = \frac{T}{\rho} \delta_{ik}$ и, соответственно,

$$\langle u_i^{(t)} u_k^{(t)} \rangle_{\mathbf{k}} = \frac{T}{\rho} (\delta_{ik} - k_i k_k / k^2).$$

Окончательно получим, что (при $t > 0$)

$$\begin{aligned} \langle u_i^{(t)} u_k^{(t)} \rangle_{\omega \mathbf{k}} &= \frac{2T}{\rho} \left(\delta_{ik} - \frac{k_i k_k}{k^2} \right) \frac{\nu k^2}{\nu^2 k^4 + \omega^2} \\ \langle u_i^{(t)}(\mathbf{r}, t) u_k^{(t)}(0, 0) \rangle &= \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{2T}{\rho} \left(\delta_{ik} - \frac{k_i k_k}{k^2} \right) \frac{\nu k^2 e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - i\omega t}}{\nu^2 k^4 + \omega^2} = \\ &= \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{T}{\rho} \left(\delta_{ik} - \frac{k_i k_k}{k^2} \right) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \nu k^2 t} \end{aligned}$$

Получаем итоговое выражение с помощью обратного преобразования Фурье

$$\begin{aligned} \langle u_i^{(t)}(0, t) u_k^{(t)}(0, 0) \rangle &= \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{T}{\rho} \left(\delta_{ik} - \frac{k_i k_k}{k^2} \right) e^{-\nu k^2 t} = \\ &= \frac{T}{\rho} \delta_{ik} \left(1 - \frac{1}{d} \right) \frac{(\sqrt{\pi})^d}{(2\pi)^d (\sqrt{\nu t})^d} = \\ &= \frac{(d-1)T}{d\rho} \frac{\delta_{ik}}{(4\pi\nu t)^{d/2}} \sim \frac{1}{t^{d/2}}. \end{aligned}$$

Здесь d - размерность пространства (важны лишь значения $d = 3$ и $d = 2$).

итоги модели

В двумерном случае коррелятор ведет себя как $\sim 1/t$, и интеграл от него логарифмически расходится на больших временах.

Уравнение Фоккера-Планка для броуновского движения

Рассмотрим в качестве фоккер-планковской переменной координату частицы \mathbf{r} , которая мало меняется в процессе одного столкновения с легким газом, а в качестве функции распределения по координате возьмем плотность частиц $n(\mathbf{r}, t)$.

Тогда, согласно общему принципу написания уравнения Фоккера-Планка, его вид в этом конкретном случае должен быть таким:

$$\frac{\partial n(t, \mathbf{r})}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left\{ \tilde{A}_\alpha n + \frac{\partial (B_{\alpha\beta} n)}{\partial x_\beta} \right\},$$

где

$$B_{\alpha\beta} = \frac{\sum_{\delta t} x_\alpha x_\beta}{2\delta t} = D\delta_{\alpha\beta},$$

$$j_\alpha^{(0)} = -\tilde{A}_\alpha n^{(0)} - \frac{\partial (B_{\alpha\beta} n^{(0)})}{\partial x_\beta} = \left(-\tilde{A}_\alpha - \frac{\partial B_{\alpha\beta}}{\partial x_\beta} \right) n^{(0)} - B_{\alpha\beta} \frac{\partial n^{(0)}}{\partial x_\beta} = 0,$$

если $n^{(0)}(\mathbf{r}, t) = n_0 e^{-U(\mathbf{r})/T}$ равновесное распределение плотности частиц в потенциальном поле.

Поэтому

$$\tilde{A}_\alpha = (B_{\alpha\beta}/T) \nabla_\beta U(\mathbf{r}) = (D/T) \nabla_\alpha U(\mathbf{r}) = b \nabla_\alpha U(\mathbf{r}),$$

и мы опять получаем уравнение Смолуховского

$$\frac{\partial n}{\partial t} - \operatorname{div}(bn \nabla U) - D \Delta n = 0,$$

которое играет в этом случае роль уравнения Фоккера-Планка.

коэффициент самодиффузии интегрально выражается через временной коррелятор скорости частиц

Показать, что в жидкости коэффициент самодиффузии в общем случае интегрально выражается через временной коррелятор скорости частиц.

коэффициента самодиффузии в двумерной однокомпонентной жидкости нет

Можно ли определить коэффициент самодиффузии в двумерной однокомпонентной жидкости?

нет, см семинары шелкачева.

5.1.3 Уравнение Фоккера—Планка (!!!)

Суть

(??? копия того, что также в 1 части)

Уравнение Фоккера-Планка имеет вид:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial p_\alpha} \left\{ \tilde{A}_\alpha f + \frac{\partial}{\partial p_\beta} (B_{\alpha\beta} f) \right\},$$

где

$$\tilde{A}_\alpha = \int q_\alpha w(\mathbf{p}, \mathbf{q}) d^3 q, \quad B_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} \int q_\alpha q_\beta w(\mathbf{p}, \mathbf{q}) d^3 q$$

обзор применений уравнения Фоккера-Планка

введение по Ландау

Значительную категорию кинетических явлений составляют процессы, в которых средние изменения величин (от которых зависит функция распределения) в каждом элементарном акте малы по сравнению с их характерными значениями.

Времена релаксации таких процессов велики по сравнению с временами элементарных актов, составляющих их микроскопический механизм; в этом смысле такие процессы можно назвать медленными. Типичный пример такого рода дает задача о релаксации по импульсам небольшой примеси тяжелого газа в легком (который сам по себе предполагается находящимся в равновесии).

Ввиду малой концентрации тяжелых частиц, их столкновениями друг с другом можно пренебречь и рассматривать их столкновения лишь с частицами основного (легкого) газа. Но при столкновении тяжелой частицы с легкими ее импульс испытывает лишь относительно малое изменение. Будем для определенности говорить именно об этом примере и выведем кинетическое уравнение, которому удовлетворяет в таком случае функция распределения частиц примеси по импульсам, $f(t)$.

вывод уравнения Фоккера-Планка из уравнения Больцмана (???)

Обозначим через $w(\mathbf{p}, \mathbf{q})d^3q$ отнесенную к единице времени вероятность изменения импульса $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} - \mathbf{q}$ тяжелой частицы при элементарном акте - ее столкновении с легкой частицей.

Тогда кинетическое уравнение для функции $f(t, \mathbf{p})$ запишется в виде

$$\frac{\partial f(t, \mathbf{p})}{\partial t} = \int \{w(\mathbf{p} + \mathbf{q}, \mathbf{q})f(t, \mathbf{p} + \mathbf{q}) - w(\mathbf{p}, \mathbf{q})f(t, \mathbf{p})\}d^3q$$

где справа стоит разность между числом частиц,

поступающих (в 1 с) в заданный элемент импульс пространства d^3p и покидающих его за то же время.

Согласно сделанным предположениям, функция $w(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ быстро убывает с увеличением \mathbf{q} ,

так что основную роль в интеграле играют значения \mathbf{q} , малые по сравнению со средним импульсом частиц.

Это обстоятельство позволяет произвести в подынтегральном выражении разложение

$$w(\mathbf{p} + \mathbf{q}, \mathbf{q})f(t, \mathbf{p} + \mathbf{q}) \approx w(\mathbf{p}, \mathbf{q})f(t, \mathbf{p}) + \mathbf{q} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} w(\mathbf{p}, \mathbf{q})f(t, \mathbf{p}) + \frac{1}{2} q_\alpha q_\beta \frac{\partial^2}{\partial p_\alpha \partial p_\beta} w(\mathbf{p}, \mathbf{q})f(t, \mathbf{p})$$

В результате кинетическое уравнение примет вид

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial p_\alpha} \left\{ \tilde{A}_\alpha f + \frac{\partial}{\partial p_\beta} (B_{\alpha\beta} f) \right\},$$

где (кст, почему такие обозначения, что тильда?)

$$\tilde{A}_\alpha = \int q_\alpha w(\mathbf{p}, \mathbf{q})d^3q, \quad B_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} \int q_\alpha q_\beta w(\mathbf{p}, \mathbf{q})d^3q$$

Таким образом, кинетическое уравнение из интегро-дифференциального становится дифференциальным.

Величины \tilde{A}_α и $B_{\alpha\beta}$ можно записать в символическом виде, более ясно выражающем их смысл:

$$\tilde{A}_\alpha = \frac{\sum q_\alpha}{\delta t}, \quad B_{\alpha\beta} = \frac{\sum q_\alpha q_\beta}{2\delta t}$$

где знак \sum означает суммирование по (большому) числу столкновений, происходящих за время δt .

(?????) Выражение в правой части (21.2) имеет вид дивергенции в импульсном пространстве,

$$-\partial s_\alpha / \partial p_\alpha,$$

от вектора

$$s_\alpha = -\tilde{A}_\alpha f - \frac{\partial}{\partial p_\beta} (B_{\alpha\beta} f) = -A_\alpha f - B_{\alpha\beta} \frac{\partial f}{\partial p_\beta}, \quad A_\alpha = \tilde{A}_\alpha + \frac{\partial B_{\alpha\beta}}{\partial p_\beta}.$$

Другими словами, (21.2) имеет, как и следовало,

вид уравнения непрерывности в импульсном пространстве; тем самым автоматически соблюдается сохранение числа частиц при процессе.

Вектор же s является плотностью потока частиц в импульсном пространстве.

Согласно формулам (21.4) коэффициенты в кинетическом уравнении выражаются через средние характеристики столкновений, и в этом смысле их вычисление представляет собой механическую задачу.

Фактически, однако, нет необходимости в отдельном вычислении коэффициентов A_α и $B_{\alpha\beta}$; они могут быть выражены друг через друга из условия обращения потока в нуль в статистическом равновесии.

В данном случае равновесная функция распределения есть

$$f = \text{const} \cdot \exp\left(-\frac{\mathbf{p}^2}{2MT}\right)$$

где M - масса частиц тяжелого газа, а T - температура основного (легкого) газа.

Подстановка этого выражения в уравнение $s = 0$ дает:

$$MTA_\alpha = B_{\alpha\beta}p_\beta$$

Таким образом, кинетическое уравнение принимает вид

$$\frac{\partial f(t, \mathbf{p})}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial p_\alpha} \left[B_{\alpha\beta} \left(\frac{p_\beta}{MT} f + \frac{\partial f}{\partial p_\beta} \right) \right].$$

Отметим, что коэффициенты в двух первых членах разложения интеграла столкновений оказываются одинакового порядка величины; это связано с тем, что усреднение первых степеней знакопеременных величин q_α в (21.4) связано с бобльшим погашением, чем при усреднении квадратичных выражений.

Дальнейшие же члены разложения будут уже все малы по сравнению с двумя первыми.

Единственный вектор, от которого могут зависеть коэффициенты $B_{\alpha\beta}$, - импульс тяжелых частиц \mathbf{p} .

Но если скорости этих частиц, \mathbf{p}/M , в среднем малы по сравнению со скоростями легких частиц, то при столкновениях их можно считать неподвижными; в этом приближении величины $B_{\alpha\beta}$ не будут зависеть от \mathbf{p} .

Другими словами, тензор $B_{\alpha\beta}$ сведется к постоянному скаляру B :

$$B_{\alpha\beta} = B\delta_{\alpha\beta}, \quad B = \frac{1}{6} \int q^2 w(0, \mathbf{q}) d^3q$$

а уравнение (21.7) примет вид

$$\frac{\partial f}{\partial t} = B \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \left(\frac{\mathbf{p}}{MT} f + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} \right)$$

Обратим внимание на формальное сходство уравнения (21.7) с уравнением диффузии во внешнем поле, в особенности наглядное в записи (21.9).

Напомним, что уравнение диффузии имеет вид

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \text{div}(D\nabla c - bc\mathbf{F})$$

где c - концентрация примеси, \mathbf{F} - сила, действующая на частицу примеси со стороны внешнего поля, D - коэффициент диффузии, b - подвижность.

Описываемые уравнением (21.9) процессы можно назвать диффузией в импульсном пространстве, причем B играет роль коэффициента диффузии; связь между коэффициентами при обоих членах в правой части (21.9) аналогична известному соотношению Эйнштейна между коэффициентом диффузии и подвижностью: $D = bT$.

Кинетическое уравнение вида (21.2), в котором коэффициенты определены через усредненные характеристики элементарных актов, согласно (21.4), называют уравнением Фоккера-Планка (A.D).

Fokker, 1914; М.

Planck, 1917).

Специфические свойства

переменных p_α как импульсов частиц в изложенном выводе не играли роли.

Ясно поэтому, что уравнение такого же типа будет справедливо и для функций распределения f по другим переменным, если только выполнены условия, лежащие в основе вывода: относительная малость изменения величин в элементарных актах и линейность по f интегрального оператора, выражающего изменение функции благодаря этим актам.

Упомянем, для примера, еще случай, когда легкий газ составляет небольшую примесь к тяжелому газу.

При столкновениях с тяжелыми частицами импульс легкой частицы сильно меняется по направлению, но лишь незначительно по абсолютной величине.

Хотя для функции распределения частиц примесного газа По вектору импульса p уравнение (21.7) в этих условиях будет уже неприменимо, аналогичное уравнение можно установить для распределения по одной лишь абсолютной величине p .

Если функция распределения по-прежнему отнесена к элементу импульсного пространства d^3p (так что число частиц с величиной p в интервале dp есть $f(t, p) \cdot 4\pi p^2 dp$), то уравнение Фоккера-Планка будет иметь место для функции $4\pi p^2 f$, отнесенной к элементу dp :

$$\frac{\partial f p^2}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial p} \left\{ f p^2 A + B \frac{\partial}{\partial p} f p^2 \right\}$$

или

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{1}{p^2} \frac{\partial}{\partial p} p^2 \left\{ f A + \frac{B}{p^2} \frac{\partial}{\partial p} f p^2 \right\}$$

Где

$$B = \frac{1}{2} \frac{\sum (\delta p)^2}{\delta t}$$

переменных p_α как импульсов частиц в изложенном выводе не играли роли.

Ясно поэтому,

что уравнение такого же типа будет справедливо и для функций распределения f по другим переменным,

если только выполнены условия,

лежащие в основе вывода: относительная малость изменения величин в элементарных актах и линейность по f интегрального оператора,

выражающего изменение функции благодаря этим актам.

Упомянем,

для примера,

еще случай,

когда легкий газ составляет небольшую примесь к тяжелому газу.

При столкновениях с тяжелыми частицами импульс легкой частицы сильно меняется по направлению,

но лишь незначительно по абсолютной величине.

Хотя для функции распределения частиц примесного газа По вектору импульса p уравнение (21.7) в этих условиях будет уже неприменимо,

аналогичное уравнение можно установить для распределения по одной лишь абсолютной величине p .

Если функция распределения по-прежнему отнесена к элементу импульсного пространства d^3p (так что число частиц с величиной p в интервале dp есть $f(t, p) \cdot 4\pi p^2 dp$),

то уравнение Фоккера-Планка будет иметь место для функции $4\pi p^2 f$, отнесенной к элементу dp :

$$\frac{\partial f p^2}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial p} \left\{ f p^2 A + B \frac{\partial}{\partial p} f p^2 \right\}$$

или

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{1}{p^2} \frac{\partial}{\partial p} p^2 \left\{ f A + \frac{B}{p^2} \frac{\partial}{\partial p} f p^2 \right\}$$

где

$$B = \frac{1}{2} \frac{\sum (\delta p)^2}{\delta t}$$

Выражение в фигурных скобках представляет собой радиальный поток s в импульсном пространстве.

Он должен обращаться в нуль равновесным распределением

$$f = \text{const} \cdot \exp \left(-\frac{p^2}{2mT} \right)$$

(где m - масса легкой частицы,
а T - температура основного,
тяжелого газа).

Это условие связывает величины A и B ,

и в результате кинетическое уравнение (21.10) принимает вид

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{1}{p^2} \frac{\partial p^2 s}{\partial p}, \quad s = -B \left(\frac{p}{mT} f + \frac{\partial f}{\partial p} \right)$$

Вывод уравнения Фоккера-Планка по Белану из каких-то матем преобразований (????)

Плотность распределения координаты частицы равна

$$n(\vec{r}; t) \equiv \langle \delta(\vec{r} - \vec{r}(t)) \rangle$$

где $\vec{r}(t)$ - решение уравнения Ланжевена (17) для заданной реализации белого шума $\vec{\xi}(t)$. Рассмотрим приращение

$$\begin{aligned} n(\vec{r}; t + \Delta t) - n(\vec{r}; t) &= \langle \delta(\vec{r} - \vec{r}(t + \Delta t)) \rangle - \langle \delta(\vec{r} - \vec{r}(t)) \rangle = \\ &= \langle \delta(\vec{r} - \vec{r}(t) - \Delta \vec{r}(t)) \rangle - \langle \delta(\vec{r} - \vec{r}(t)) \rangle = \\ &= \langle \Delta r_i(t) \partial_{r_i} \delta(\vec{r} - \vec{r}(t)) \rangle + \frac{1}{2} \langle \Delta r_i(t) \Delta r_j(t) \partial_{r_i} \partial_{r_j} \delta(\vec{r} - \vec{r}(t)) \rangle + \dots \\ &= \partial_{r_i} \langle \Delta r_i(t) \delta(\vec{r} - \vec{r}(t)) \rangle + \frac{1}{2} \partial_{r_i} \partial_{r_j} \langle \Delta r_i(t) \Delta r_j(t) \delta(\vec{r} - \vec{r}(t)) \rangle + \dots \end{aligned}$$

где $\Delta \vec{r}(t) \equiv \vec{r}(t + \Delta t) - \vec{r}(t) = \mu \vec{f}(\vec{r}(t), t) \Delta t + \int_t^{t+\Delta t} d\tau \vec{\xi}(\tau) + o(\Delta t)$. Рассмотрим средние значения вида $\langle \Delta r_{i_1}(t) \Delta r_{i_2}(t) \dots \Delta r_{i_k}(t) \delta(\vec{r} - \vec{r}(t)) \rangle$, стоящие в правой части Ур. (49).

$$\begin{aligned} \langle \Delta r_i(t) \delta(\vec{r} - \vec{r}(t)) \rangle &= \left\langle \left(\mu f_i(\vec{r}(t), t) \Delta t + \int_t^{t+\Delta t} d\tau \xi_i(\tau) \right) \delta(\vec{r} - \vec{r}(t)) \right\rangle + o(\Delta t) = (50) \\ &= \mu \Delta t \langle f_i(\vec{r}(t), t) \delta(\vec{r} - \vec{r}(t)) \rangle + \left\langle \int_t^{t+\Delta t} d\tau \xi_i(\tau) \delta(\vec{r} - \vec{r}(t)) \right\rangle + o(\Delta t) = \\ &= \mu \Delta t \langle f_i(\vec{r}, t) \delta(\vec{r} - \vec{r}(t)) \rangle + \left\langle \int_t^{t+\Delta t} d\tau \xi_i(\tau) \right\rangle \langle \delta(\vec{r} - \vec{r}(t)) \rangle + o(\Delta t) = \\ &= \mu \Delta t f_i(\vec{r}, t) \langle \delta(\vec{r} - \vec{r}(t)) \rangle + o(\Delta t) = \mu \Delta t f_i(\vec{r}, t) n(\vec{r}; t) + o(\Delta t) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \langle \Delta r_i(t) \Delta r_j(t) \delta(\vec{r} - \vec{r}(t)) \rangle = \\
& = \left\langle \left(\mu f_i(\vec{r}(t), t) \Delta t + \int_t^{t+\Delta t} d\tau \xi_i(\tau) \right) \left(\mu f_j(\vec{r}(t), t) \Delta t + \int_t^{t+\Delta t} d\tau \xi_j(\tau) \right) \delta(\vec{r} - \vec{r}(t)) \right\rangle + o(\Delta t) \\
& = \left\langle \delta(\vec{r} - \vec{r}(t)) \int_t^{t+\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} d\tau d\tau' \xi_i(\tau) \xi_j(\tau') \right\rangle + \mu \Delta t \left\langle f_i(\vec{r}(t), t) \delta(\vec{r} - \vec{r}(t)) \int_t^{t+\Delta t} d\tau \xi_j(\tau) \right\rangle + \\
& + \mu \Delta t \left\langle f_j(\vec{r}(t), t) \delta(\vec{r} - \vec{r}(t)) \int_t^{t+\Delta t} d\tau \xi_i(\tau) \right\rangle + o(\Delta t) = \\
& = \langle \delta(\vec{r} - \vec{r}(t)) \rangle \int_t^{t+\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} d\tau d\tau' \langle \xi_i(\tau) \xi_j(\tau') \rangle + \mu \Delta t \langle f_i(\vec{r}(t), t) \delta(\vec{r} - \vec{r}(t)) \rangle \int_t^{t+\Delta t} d\tau \langle \xi_j(\tau) \rangle + \\
& + \mu \Delta t \langle f_j(\vec{r}(t), t) \delta(\vec{r} - \vec{r}(t)) \rangle \int_t^{t+\Delta t} d\tau \langle \xi_i(\tau) \rangle + o(\Delta t) = \\
& = 2D \delta_{ij} \langle \delta(\vec{r} - \vec{r}(t)) \rangle \int_t^{t+\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} d\tau d\tau' \delta(\tau' - \tau) + o(\Delta t) = 2D \delta_{ij} n(\vec{r}; t) \Delta t + o(\Delta t).
\end{aligned}$$

Средние значения при пространственных производных более высокого порядка в (49) оказываются нелинейны по Δt . Поделив Ур. (49) на $\Delta t \rightarrow +0$, с учетом (53) и (60) приходим к уравнению Фоккера-Планка (39).

примеры частных случаев уравнения Фоккера-Планка

(пока что выписки, позже создам их наборчик как примеров, также отсылки тут)

Тогда уравнение (5.45) приобретает вид

$$\dot{\theta}_i = \omega_i - Kr \sin \theta_i + \xi_i$$

где $\omega_i = \Omega_i - \Omega_0$ Введем функцию распределения осцилляторов по фазе и расстройке частоты

$$\rho(\theta, \omega, t) = \langle \delta(\theta - \theta_\omega(t)) \rangle_\xi$$

где $\theta_\omega(t)$ - решение уравнения (5.46) для осциллятора с собственной частотой ω при конкретной реализации случайного процесса ξ .

Эволюция данной функции описывается уравнением Фоккера-Планка

$$\partial_t \rho = -\partial_\theta [(\omega - Kr \sin \theta) \rho] + D \partial_\theta^2 \rho$$

Стационарное решение этого уравнения, удовлетворяющее периодическому граничному условию $\rho(\theta, \omega) = \rho(\theta + 2\pi, \omega)$, имеет вид

$$\rho(\theta, \omega) = \rho(0, \omega) \exp \left(\frac{-Kr + \omega\theta + Kr \cos \theta}{D} \right) \left(1 + \frac{(\exp(-\frac{2\pi\omega}{D}) - 1) \int_0^\theta \exp(\frac{-\omega\varphi - Kr \cos \varphi}{D}) d\varphi}{\int_0^{2\pi} \exp(\frac{-\omega\varphi - Kr \cos \varphi}{D}) d\varphi} \right)$$

где $\rho(0, \omega)$ определяется условием нормировки

$$\int_0^{2\pi} \rho(\theta, \omega) d\theta = 1$$

соответствие между уравнением Ланжевена и Фоккера-Планка

5.1.4 Кинетическое уравнение для слабо неоднородного газа

Теория

Для того чтобы включить в рассмотрение диссипативные процессы (теплопроводность и вязкость) в слабо неоднородном газе, надо обратиться к следующему (после рассмотренного в предыдущем параграфе) приближению.

Учтем теперь небольшое отличие f от равновесной f_0 , т. е. напомним f в виде

$$f = f_0 + \delta f, \quad \delta f = -\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \chi(\Gamma) = \frac{1}{T} f_0 \chi$$

где δf - малая поправка ($\delta f \ll f_0$).

Последнюю целесообразно представлять в написанном здесь виде, вынеся из нее множитель $-\partial f_0/\partial \varepsilon$; для распределения Больцмана эта производная отличается лишь множителем $1/T$ от самой функции f_0 .

Поправка δf должна в принципе определяться путем решения линеаризованного по отношению к ней кинетического уравнения.

Помимо самого кинетического уравнения, функция χ должна удовлетворять еще и определенным дополнительным условиям, отвечающая заданным (в рассматриваемом элементе объема) плотностям числа частиц, энергии и импульса газа, т. е. заданным значениям интегралов

$$\int f_0 d\Gamma, \quad \int \varepsilon f_0 d\Gamma, \quad \int \mathbf{p} f_0 d\Gamma$$

Неравновесная функция распределения (6,1) должна приводить к тем же значениям этих величин, т. е. интегралы с f и f_0 должны быть одинаковыми.

Это значит, другими словами, что функция χ должна удовлетворять условиям

$$\int f_0 \chi d\Gamma = 0, \quad \int f_0 \chi \varepsilon d\Gamma = 0, \quad \int f_0 \chi \mathbf{p} d\Gamma = 0$$

Подчеркнем, что само понятие температуры в неравновесном газе становится определенным лишь в результате приписывания интегралам (6,2) определенных значений.

Это понятие имеет безусловный характер лишь в полностью равновесном состоянии газа в целом; для определения же температуры в неравновесном газе требуется дополнительное условие, каковым и служит задание указанных значений.

Интеграл столкновений после подстановки вше Преобразуем, прежде всего, интеграл столкновений в кинетическом уравнении (3,8).

При подстановке в него функций в виде (6,1) члены, не содержащие малой поправки χ , взаимно сокращаются, поскольку равновесная функция распределения обращает интеграл столкновений в нуль.

Члены первого порядка дают

$$\text{St} f = \frac{f_0}{T} I(\chi)$$

где $I(\chi)$ обозначает линейный интегральный оператор

$$I(\chi) = \int w' f_{01} (\chi' + \chi'_1 - \chi - \chi_1) d\Gamma_1 d\Gamma' d\Gamma'_1$$

Здесь использовано равенство $f_0 f_{01} = f'_0 f'_{01}$; множитель f_0 может быть вынесен из-под знака интеграла, поскольку по $d\Gamma$ не производится интегрирования.

Обратим внимание на то, что интеграл (6,5) тождественно обращается в нуль для функций

$$\chi = \text{const}, \quad \chi = \text{const} \cdot \varepsilon, \quad \chi = \mathbf{p} \delta \mathbf{V}$$

(где $\delta \mathbf{V}$ -постоянный вектор); обращение в нуль для второй и третьей из этих функций связано с сохранением энергии и импульса в каждом столкновении.

Будучи независимыми от времени и координат, функции (6,6) удовлетворяют, следовательно, и всему кинетическому уравнению.

Эти решения имеют простое происхождение.

Кинетическому уравнению тождественно удовлетворяет равновесная функция распределения с любыми (постоянными) плотностью частиц и температурой.

Поэтому ему автоматически удовлетворяет и малая поправка

$$\delta f = \frac{\partial f_0}{\partial N} \delta N = f_0 \frac{\delta N}{N}$$

возникающая при изменении плотности на δN ; отсюда возникает первое из решений (6,6).

Аналогичным образом удовлетворяет уравнению и добавка

$$\delta f = \frac{\partial f_0}{\partial T} \delta T$$

возникающая в результате изменения T на малую постоянную величину δT . Производная же $\partial f_0 / \partial T$ складывается из члена вида $\text{const} \cdot f_0$ (происходящего от дифференцирования нормировочного множителя в f_0) и из члена, пропорционального εf_0 отсюда и возникает второе из решений (6,6).

Третье же из этих решений возникает как выражение галилеевского принципа относительности: равновесная функция распределения должна удовлетворять кинетическому уравнению также и после перехода к любой другой инерциальной системе отсчета.

Переход в другую систему При переходе к системе, движущейся относительно первоначальной с малой постоянной скоростью $\delta \mathbf{V}$, скорости молекул \mathbf{v} заменяются на $\mathbf{v} + \delta \mathbf{V}$ так что функция распределения получает приращение

$$\delta f = \frac{\partial f_0}{\partial v} \delta \mathbf{V} = -\frac{f_0}{T} \mathbf{p} \delta \mathbf{V}$$

чему и отвечает третье из решений (6,6).

(??) «Паразитные» решения (6,6) исключаются наложением трех условий (6,3)

Преобразование левой стороны кинетического уравнения произведем сразу в общем виде, охватывающем как задачу о теплопроводности, так и задачу о вязкости.

Другими словами, допускаем существование градиентов всех макроскопических характеристик газа, в том числе его макроскопической скорости V .

Функция распределения в однородном газе (???) Равновесная функция распределения B в неподвижном ($V = 0$) газе есть распределение Больцмана, которое напомним в виде

$$f_0 = \exp \left(\frac{\mu - \varepsilon(\mathbf{F})}{T} \right)$$

где μ -химический потенциал газа.

Распределение же в движущемся газе отличается от (6,7) (как уже было отмечено в § 5) лишь галилеевским преобразованием скорости.

Для того, чтобы написать эту функцию в явном виде, выделим из полной энергии из полной энергии молекулы $\varepsilon(\Gamma)$ кинетическую энергию ее поступательного движения:

$$\varepsilon(\Gamma) = \frac{mv^2}{2} + \varepsilon_{\text{вн}};$$

здесь внутренняя энергия $\varepsilon_{\text{вн}}$ включает в себя энергию вращения молекулы и колебательную энергию.

Заменив \mathbf{v} на $\mathbf{v} - \mathbf{V}$, получим распределение Больцмана в движущемся газе:

$$f_0 = \exp\left(\frac{\mu - \varepsilon_{\text{вн}}}{T}\right) \exp\left(-\frac{m(\mathbf{v} - \mathbf{V})^2}{2T}\right)$$

Уравнение на функцию распределения в слабо неоднородном газе В слабо неоднородном газе f_0 зависит от координат и времени, причем эта зависимость возникает за счет меняющихся вдоль газа (и со временем) его макроскопических характеристик - скорости \mathbf{V} , температуры T и давления P (а с ними и μ).

Поскольку градиенты этих величин предполагаются малыми, в левой стороне кинетического уравнения достаточно (в рассматриваемом приближении) подставить f_0 вместо f .

Вычисления можно несколько упростить, учтя очевидную независимость интересующих нас в конечном счете кинетических коэффициентов от скорости \mathbf{V} .

Поэтому достаточно рассмотреть какую-либо одну точку в газе и выбрать в качестве таковой ту, в которой скорость \mathbf{V} (но, конечно, не ее производные) равна нулю.

Продифференцировав выражение (6,9) по времени и положив затем $\mathbf{V} = 0$, получим

$$\frac{T}{f_0} \frac{\partial f_0}{\partial t} = \left[\left(\frac{\partial \mu}{\partial T} \right)_P - \frac{\mu - \varepsilon(\Gamma)}{T} \right] \frac{\partial T}{\partial t} + \left(\frac{\partial \mu}{\partial P} \right)_T \frac{\partial P}{\partial t} + m\mathbf{v} \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial t}$$

Подставим согласно известным термодинамическим формулам $\left(\frac{\partial \mu}{\partial T} \right)_P = -s$, $\left(\frac{\partial \mu}{\partial P} \right)_T = \frac{1}{N}$, $\mu = w - Ts$, где w , s и $1/N$ -тепловая функция, энтропия и объем, отнесенные к одной частице газа.

Поэтому

$$\frac{T}{f_0} \frac{\partial f_0}{\partial t} = \frac{\varepsilon(\Gamma) - w}{T} \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{1}{N} \frac{\partial P}{\partial t} + m\mathbf{v} \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial t}$$

Аналогичным образом найдем

$$\frac{T}{f_0} \mathbf{v} \nabla f_0 = \frac{\varepsilon(\Gamma) - w}{T} \mathbf{v} \nabla T + \frac{1}{N} \mathbf{v} \nabla P + m v_\alpha v_\beta V_{\alpha\beta}$$

где для краткости введено обозначение

$$V_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial V_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{\partial V_\beta}{\partial x_\alpha} \right), \quad V_{\alpha\alpha} = \text{div } \mathbf{V}$$

в последнем члене в (6,11) произведена тождественная замена

$$v_\alpha v_\beta \frac{\partial V_\beta}{\partial x_\alpha} = v_\alpha v_\beta V_{\alpha\beta}$$

Левая сторона кинетического уравнения получается сложением выражений 6.10), 6.11).

При этом все производные по времени от макроскопических величин могут быть выражены через их пространственные градиенты согласно гидродинамическим уравнениям идеальной (т. е. невязкой и нетеплопроводящей) среды; учет диссипативных членов здесь привел бы к величинам высшего порядка малости.

Гидродинамические уравнения В точке, в которой $V = 0$, уравнение Эйлера дает

$$\frac{\partial \mathbf{V}}{\partial t} = -\frac{1}{\rho} \nabla P = -\frac{1}{Nm} \nabla P$$

В той же точке из уравнения непрерывности имеем $\partial N / \partial t = -N \operatorname{div} \mathbf{V}$, или

$$\frac{1}{N} \frac{\partial N}{\partial t} = \frac{1}{P} \frac{\partial P}{\partial t} - \frac{1}{T} \frac{\partial T}{\partial t} = -\operatorname{div} \mathbf{V}$$

(использовано уравнение состояния идеального газа $N = P/T$).

Уравнение сохранения энтропии Наконец, уравнение сохранения энтропии, $\partial s / \partial t + \mathbf{V} \nabla s = 0$, дает $\partial s / \partial t = 0$, или

$$\frac{c_p \partial T}{T} \frac{\partial T}{\partial t} - \frac{1}{P} \frac{\partial P}{\partial t} = 0$$

где использованы термодинамические формулы

$$\left(\frac{\partial s}{\partial T} \right)_P = \frac{c_p}{T}, \quad \left(\frac{\partial s}{\partial P} \right)_T = -\frac{1}{P}$$

(c -теплоемкость, тоже отнесенная к одной молекуле); вторая из этих формул относится к идеальному газу.

Напомним, что уже из закона возрастания энтропии следует, что градиент движения (в отсутствие градиентов температуры и скорости) не приводит к возникновению диссипативных процессов (ср. VI, § 49).

Итог уравнений выше (????) Из равенств F.14), (6, 14 – 15) находим

$$\frac{1}{T} \frac{\partial T}{\partial t} = -\frac{1}{c_v} \operatorname{div} \mathbf{V}, \quad \frac{1}{P} \frac{\partial P}{\partial t} = -\frac{c_p}{c_v} \operatorname{div} \mathbf{V}$$

(учтено, что для идеального газа $c_p - c_v = 1$).

Простое вычисление приводит теперь к результату

$$\frac{\partial f_0}{\partial t} + \mathbf{v} \nabla f_0 = \frac{f_0}{T} \left\{ \frac{\varepsilon(\Gamma) - w}{T} \mathbf{v} \nabla T + m v_\alpha v_\beta V_{\alpha\beta} + \frac{w - T c_p - \varepsilon(\Gamma)}{c_v} \operatorname{div} \mathbf{V} \right\}$$

Подчеркнем, что до сих пор не делалось никаких специфических предположений о характере температурной зависимости термодинамических величин; использовалось лишь общее уравнение состояния идеального газа.

Случай вращения молекул Для газа же с классическим вращением молекул и невозбужденными колебаниями теплоемкость не зависит от температуры и тепловая функция

$$w = c_p T$$

Тогда последний член в (6,17) упрощается; приравняв (6,17) и (6,4), напишем окончательно кинетическое уравнение в виде

$$\frac{\varepsilon(\Gamma) - c_p T}{T} \mathbf{v} \nabla T + \left[m v_\alpha v_\beta - \delta_{\alpha\beta} \frac{\varepsilon(\Gamma)}{c_v} \right] V_{\alpha\beta} = I(\chi)$$

5.1.5 Основы описания броуновского движения

мб это самое первое, с чего хорошо бы начинать кинетику изучать

мотивация и определение

тип движение, когда много соударений за выбранный малый интервал времени.

если соударений мало - это просто хаотическое движение газа, и там другие параметры.

коротко о свойствах броуновского движения

итоговые важные формулы и свойства.

теория

обзор приложений

у броуновского движения много приложений, они же и будут освещены в части про приложения, тут просто укажем на них.

5.1.6 Случайное блуждание частицы: прыжковая диффузия

обзор теории

равновероятное блуждание на прямой

.

Асимптотическое поведение на больших временах, связь с уравнением диффузии

Обобщение на случай произвольной размерности пространства

Уравнение управления вероятностями или “master equation”

сохранение полной вероятности

.

Переход от блуждания на прямой к блужданию на кольце

Дискретное преобразование Фурье и решение “master equation ”

.

Обратное преобразование Фурье, переход от суммирования к интегрированию по первой зоне Бриллюэ

.

Асимптотическое поведение на больших временах

.

Обобщение решения задачи на случай произвольной размерности пространства

.

Функция Грина уравнения диффузии

теория

???

функция распределения при прыжковой диффузии

Рассмотрим движение частицы на прямой, когда она может находиться только в узлах, которые будем нумеровать целым n .

Частица с вероятностью λ в единицу времени прыгает на правый соседний узел, а с вероятностью μ - на левый соседний.

Найти поведение функции распределения $p(n)$ на временах $t \gg 1/(\lambda + \mu)$, если в начальный момент времени частица находилась в узле $n = 0$. ука- зание: возможно рассмотреть технически более простой, но также показательный частный случай $\mu = \lambda$.

5.1.7 типичное броуновское движение

Броуновское движение в двух словах

Суть броуновского движения в том, что??? средний квадрат смещения x линейно растет со временем τ , и коэффициент пропорциональности D - это коэффициент диффузии:

$$\langle x^2 \rangle = 2D\tau$$

(само уравнение????)

Формула Эйнштейна для коэффициента диффузии D сферических броуновских частиц:

$$D = \frac{RT}{6N_A\pi a\xi}$$

в которой R - универсальная газовая постоянная, T - абсолютная температура, N_A - постоянная Авогадро, a - радиус частиц, ξ - динамическая вязкость.

(тут место про то, как ее применять)

При выводе закона Эйнштейна предполагается, что смещения частицы в любом направлении равновероятны и что можно пренебречь инерцией броуновской частицы по сравнению с влиянием сил трения (это допустимо для достаточно больших времён).

Формула для коэффициента D основана на применении закона Стокса для гидродинамического сопротивления движению сферы радиусом a в вязкой жидкости.

О случае вращения Среднеквадратичный угол поворота броуновской частицы φ (относительно произвольной фиксированной оси) также пропорционален времени наблюдения:

$$\langle \varphi^2 \rangle = 2D_r\tau$$

Здесь D_r - вращательный коэффициент диффузии, который для сферической броуновской частицы равен

$$D_r = \frac{RT}{8N_A\pi a^3\xi}$$

Среднеквадратичное смещение в классическом и квантовом пределе**Соотношение Эйнштейна****5.1.8 Различные темы Колоколова (???)**

(мб буду их разбирать, но мб и удалю. скорее всего потом впишу методы на эти темы, хорошо их иметь собранными.)

Одномерное уравнение диффузии**Одномерное уравнение диффузии на бесконечной прямой****Функция Грина для уравнения диффузии****Асимптотический по времени вид функции распределения**

Обобщение на многомерный случай.

Диффузия в ограниченной области.

Возможные граничные условия для уравнения диффузии и их физическая интерпретация.

Отражающие граничные условия.

Блуждание частицы, на полупрямой.

Построение функции Грина методом изображений.

Блуждание частицы, на отрезке с отражающими краями.

Разделение переменных в уравнении диффузии и построение функции Грина.

Блуждание частицы внутри поглощающего шара.

Сведение трехмерной задачи к одномерной.

Асимптотическое поведение в пределе больших времен, роль различных гармоник.

Блуждание частицы внутри поглощающей полусферы.

Колоколов.з.3

Частица совершает броуновское движение на отрезке $[0, L]$ с поглощающими краями. Изначально частица была расположена в точке $x = a$, принадлежащей отрезку. Вычислите функцию распределения $P(x, t)$ в произвольный момент времени.

Колоколов.з.? асимптотический закон зависимости числа броуновских частиц от времени в шаре

В шаре радиуса R в очень вязкой жидкости находятся N броуновских частиц. Стенки шара являются для частиц поглощающими (частица, попав на них обратно в объём не возвращается).

Найти асимптотический закон зависимости числа броуновских частиц от времени и распределение их плотности на больших времена, если коэффициент диффузии этих частиц D . Решите аналогичную задачу для случая поглощающей полусферы.

(??? вроде по гауссу будут распределены, нет? интересно подумать про это.)

Колоколов.з.? частица рядом с поглощающей сферой

Пусть броуновская частица в начальный момент времени находилась на расстоянии l от поверхности абсолютно поглощающей сферы, радиус которой a .

Определим вероятность того, что частица не поглотилась сферой в пределе больших времен.

Сравнить результаты с результатами для одномерной задачи: когда броуновская частица в начальный момент времени находилась на расстоянии l от поглощающей стенки.

Граничное условие, задающее постоянную пристеночную концентрацию.
????

5.1.9 Другое про уравнение Фоккера-Планка (?)

(там куча статей про это написано, так что точно на раздел хватит информации.)

УФП для условной вероятности (???)

УФП справедливо для условной плотности вероятности: $f(x, t) = p(x, t | x_0, t_0)$, (то есть значение функции $f(x, t)$ вероятностно попадает в плоскость, образованную пространственной осью x и временной осью t , в интервалы $x - x_0$ и $t - t_0$ соответственно) при любом начальном значении x_0 и t_0 и начальном условии $p(x, t_0 | x_0, t_0) = \delta(x - x_0)$, где $\delta(x - x_0)$ - функция Дирака.

Это условие гласит, что в один и тот же момент времени t_0 функция претерпевает скачок.

Если пространственные координаты равны, то функция устремляется в бесконечность.

Поэтому, в силу ограниченности функции, необходимо использовать определение

$$p(x, t) = \int p(x, t; x_0, t_0) dx_0 = \int p(x, t | x_0, t_0) p(x_0, t_0) dx_0.$$

Тогда, УФП справедливо для вероятности $p(x, t)$ с начальным условием $p(x, t)|_{t=t_0} = p(x, t_0)$, которое менее сингулярно, чем $p(x, t_0 | x_0, t_0) = \delta(x - x_0)$.

эквивалентность процесса УФП и ОДУ Ито (????)

Стохастический процесс, описываемый условной вероятностью, удовлетворяющий УФП, эквивалентен ОДУ Ито

$$dx(t) = A(x(t), t)dt + \sqrt{B(x(t), t)}dW(t)$$

и что эти два описания должны рассматриваться как взаимно дополняющие друг друга.
а хз вообще, тупо заготовка в будущем подумать, пока вообще не актуально.

5.1.10 Соотношение Эйнштейна и формула Смүловского из формулы Фоккера-Планка

задача 10 из дз.

соотношение Эйнштейна: вывод

Пусть в газе находятся тяжелые сферические частицы с достаточно малой концентрацией n .

Если их концентрация неоднородная, то в результате хаотического теплового (диффузионного) движения возникнет поток этих частиц равный $\dot{n} = -D\nabla n$, где D называется коэффициентом диффузии.

Предположим теперь, что на частицы действует некоторая внешняя сила F (к примеру, электрическая сила, если частицы заряжены).

Под действием такой силы частицы также будут двигаться, но в силу сопротивления движению со стороны частиц газа это движение будет не ускоренным, а движением с

постоянной средней скоростью $u = b F$, где коэффициент b называется подвижностью частиц.

В результате возникнет поток частиц, равный $nb F$.

Суммарный поток частиц за счет внешней силы и диффузионного движения будет равен

$$i = -D \nabla n + nb F$$

Предположим, что у нас имеется потенциальное внешнее поле, действующее на частицы, так что $\mathbf{F} = -\nabla U$, и установилось равновесие между диффузионным движением и движением во внешнем поле.

Тогда, во-первых, концентрация должна следовать барометрической формуле $n = n_0 e^{-U/T}$, и, во-вторых, суммарный поток частиц должен быть равен нулю:

$$i = 0 = -D \nabla n + nb \mathbf{F} = (D n_0 / T) \nabla U e^{-U/T} - n_0 b \nabla U e^{-U/T}.$$

Отсюда получаем условие $D = bT$, которое называется соотношением Эйнштейна.

Это открывает путь определения коэффициента диффузии через вычисление коэффициента подвижности.

определение коэффициентов подвижности и диффузии

По сути для вывода коэффициентов нужно найти силу сопротивления, а далее приравнять ее к внешней силе, выраженной через подвижность.

Рассмотрим сначала случай свободно-молекулярного (кнудсеновского режима) $R \ll \ell$, когда длина пробега частиц газа ℓ (за счет собственных столкновений) много больше радиуса тяжелой частицы ($Kn = \ell/R \gg 1$).

Вводим внешнюю силу F , под действием которой частица движется в газе с постоянной скоростью $\mathbf{u} = b\mathbf{F}$.

Движение с постоянной скоростью означает, что внешняя сила \mathbf{F} компенсируется силой сопротивления со стороны частиц газа равной $\mathbf{F}_{\text{сопр.}}$, так что суммарная сила, действующая на тяжелую частицу равна нулю: $\mathbf{F} + \mathbf{F}_{\text{сопр.}} = 0$.

Вычислим эту силу сопротивления.

Функция распределения легких частиц газа (a) нормированная по импульсам имеет вид равновесной функции $f_a^{(0)}(\mathbf{v}) = \frac{n_a}{(2\pi mT)^{3/2}} e^{-m\mathbf{v}^2/(2T)}$.

Перейдем в систему отсчета, движущуюся со скоростью тяжелой частицы \mathbf{u} .

В этой системе отсчета функция распределения легких частиц газа $f_a(\mathbf{v})$, где \mathbf{v} - скорость частиц в новой системе отсчета, имеет вид

$$f_a(\mathbf{v}) = f_a^{(0)}(\mathbf{v} + \mathbf{u}) = \frac{n_a}{(2\pi mT)^{3/2}} e^{-m(\mathbf{v}+\mathbf{u})^2/(2T)} \approx f_a^{(0)}(\mathbf{v}) \left(1 - \frac{m(\mathbf{v} \cdot \mathbf{u})}{T} \right)$$

(при условии, что приобретенная скорость тяжелой частицы мала, $u \ll v_{Ta}$, где $v_{Ta} \sim \sqrt{T/m}$ - тепловая скорость молекул легкого газа).

Сила сопротивления со стороны частиц газа равна импульсу, передаваемому тяжелой частице со стороны легких частиц в единицу времени.

Тяжелую частицу считаем неподвижной во время столкновения с легкими частицами.

Пусть \mathbf{v} - скорость налетающей легкой частицы до столкновения, а \mathbf{v}' - скорость частицы после столкновения, причем пусть угол между векторами \mathbf{v} и \mathbf{v}' равен θ (угол рассеяния).

В силу упругости соударения $|\mathbf{v}| = |\mathbf{v}'|$.

Передаваемый импульс в среднем равен

$$\begin{aligned}\Delta p &= \overline{m(\mathbf{v} - \mathbf{v}')} = m(\mathbf{v} - \mathbf{v}'_{\parallel} - \mathbf{v}'_{\perp}) = \\ &= m(\mathbf{v} - \mathbf{v}'_{\parallel}) = m(\mathbf{v} - \mathbf{v} \cos \theta) = m\mathbf{v}(1 - \cos \theta) \quad (5.1)\end{aligned}$$

Здесь продольность и поперечность подразумеваются по отношению к направлению скорости \mathbf{v} , и очевидно, что при усреднении по многим столкновениям $\overline{\mathbf{v}'_{\perp}} = 0$.

Умножая передаваемый импульс на плотность потока легких частиц со скоростью \mathbf{v} и на сечение $d\sigma(\theta)$ такого столкновения и интегрируя, получим

$$\begin{aligned}\mathbf{F}_{\text{сопр.}} &= \int d^3p f_a(\mathbf{v}) \mathbf{v} \cdot m\mathbf{v}(1 - \cos \theta) \cdot d\sigma(\theta) = \\ &= \int d^3p f_a^{(0)}(\mathbf{v} + \mathbf{u}) \mathbf{v} \cdot m\mathbf{v} \sigma_t(v) = \\ &= m \int f_a^{(0)}(\mathbf{v}) \left(1 - \frac{m(\mathbf{v} \cdot \mathbf{u})}{T}\right) \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} \sigma_t(v) d^3p = -\frac{m^2}{T} \int f_a^{(0)}(\mathbf{v}) (\mathbf{v} \cdot \mathbf{u}) \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} \sigma_t(v) d^3p = \\ &= -\frac{m^2}{3T} \int f_a^{(0)}(\mathbf{v}) \mathbf{u} v^3 \sigma_t(v) d^3p = \\ &= -\frac{n_a m^2 \langle v^3 \sigma_t(v) \rangle}{3T} \mathbf{u}\end{aligned}$$

где введены обозначения $\sigma_t(v) = \int (1 - \cos \theta) d\sigma(\theta)$, $\langle v^3 \sigma_t(v) \rangle = \frac{\int f_a^{(0)}(\mathbf{v}) v^3 \sigma_t(v) d^3p}{\int f_a^{(0)}(\mathbf{v}) d^3p}$.

Записывая теперь

$$\mathbf{F}_{\text{сопр.}} + \mathbf{F} = -\frac{n_a m^2 \langle v^3 \sigma_t(v) \rangle}{3T} \mathbf{u} + \frac{\mathbf{u}}{b} = 0,$$

получим подвижность b тяжелой частицы и её коэффициент диффузии в виде

$$b = \frac{3T}{n_a m^2 \langle v^3 \sigma_t(v) \rangle}, \quad D = bT = \frac{3T^2}{n_a m^2 \langle v^3 \sigma_t(v) \rangle} \underbrace{=}_{\sigma_t = \text{const}} \frac{3\lambda}{8} \sqrt{\frac{\pi T}{2m}}.$$

По порядку величины

$$D \sim \frac{(mv_T^2)^2}{m^2 n_a v_T^3 \sigma} = \frac{v_T}{n_a \sigma} \sim \frac{v_T}{n_a R^2} \sim v_T \lambda,$$

где $\lambda = 1/(n_a \sigma)$ - длина свободного пробега тяжелых частиц относительно их столкновений с легким газом.

Введя частоту столкновений $\nu(v) = n_a v \sigma_t$ и учитывая, что $\langle v^2 \rangle = 3T/m$, выражение для подвижности можно представить в виде

$$b = \{m \langle v^2 \nu(v) \rangle / \langle v^2 \rangle\}^{-1} \equiv (m \nu_{\text{эфф}})^{-1},$$

где $\nu_{\text{эфф}} = \langle v^2 \nu(v) \rangle / \langle v^2 \rangle$ - эффективная частота столкновений.

Теперь рассмотрим обратный предельный случай $R \gg \ell$, соответствующий гидродинамическому режиму ($\text{Kn} \ll 1$).

В этом случае надо решать задачу о силе сопротивления шарика, движущемуся в вязком газе, решая соответствующие гидродинамические уравнения.

Эту задачу точно решил Стокс в девятнадцатом веке, и ответ следующий:

$$\mathbf{F}_{\text{сопр.}} = -6\pi\eta R \mathbf{u},$$

где η - вязкость газа.

Мы не будем разбирать решение этой задачи, тем более что нужен нам лишь численный коэффициент 6π .

Буквенный ответ может быть легко получен из соображений размерности, поскольку $\eta = nT\tau \sim \frac{nmv_T^2}{nv_T\sigma_a} \sim mv_T/\sigma_a$, где здесь σ_a - сечение столкновений частиц легкого газа между собой, и поэтому $[\eta] = \text{Г}/(\text{см} \cdot \text{сек}^2)$.

Сила должна быть пропорциональна скорости тяжелой частицы u и вязкости газа, которая линейно входит в уравнение Навье Стокса, которые в свою очередь нужно решать с граничным условием обращения скорости потока газа в ноль на поверхности тяжелой частицы.

Это есть существенное отличие от свободно-молекулярного режима, при котором наличие тяжелой частицы не влияет на функцию распределения частиц газа.

Поскольку $[F] = \text{Г} \cdot \text{см}/\text{сек}^2$, то единственно возможная зависимость от радиуса частицы - линейная.

Поэтому

$$b = (6\pi\eta R)^{-1},$$

и

$$D = bT = T/(6\pi\eta R)$$

Фоккер-планковские процессы и диффузия в фазовом пространстве

Обсудим очень важную категорию кинетических процессов, которые описываются единой методикой с помощью так называемого кинетического уравнения Фоккера-Планка.

Речь будет идти о той значительной категории кинетических явлений, в которых в процессе одного элементарного акта столкновений (в процессе одного столкновения) какие-то переменные, от которых зависит функция распределения, меняются слабо по сравнению с их характерными значениями.

Типичный пример такого рода дает задача о релаксации по импульсам небольшой примеси тяжелого газа в легком (который сам по себе предполагается находящимся в равновесии).

Ввиду малой концентрации тяжелого газа столкновения тяжелых частиц между собой маловероятны, и надо рассматривать только столкновения тяжелых частиц с легкими.

Но при столкновении с легкой частицей импульс тяжелой частицы меняется очень мало ($\Delta p \ll p$), и в этом смысле процесс изменения импульса тяжелой частицы при столкновении с легкой представляет собой типичный фоккер-планковский процесс.

Точно таким же процессом, кстати, является и изменение координаты тяжелой частицы с точки зрения легких частиц, тепловые скорости которых велики по сравнению с тепловыми скоростями тяжелых частиц.

В нулевом приближении последние можно считать как бы неподвижными, а изменение координат тяжелых частиц при столкновениях с легкими являются малыми по сравнению с любыми другими характерными расстояниями и, таким образом, диффузию по координате тоже можно отнести к процессам такого типа.

Есть много и других примеров таких процессов.

Общий вывод уравнения Фоккера-Планка

Перейдем к выводу уравнения Фоккера-Планка, описывающего такие процессы, но при этом для конкретности будем иметь в виду именно случай небольшой тяжелой примеси в газе легких частиц и искать уравнение для функции распределения тяжелых

частиц по импульсам $f(t, \mathbf{p})$ (сначала в пространственно-однородном случае и в отсутствие внешних сил - обобщение на пространственно-неоднородный случай и присутствие внешних сил тривиально и содержится только в изменении левой части уравнения).

Отметим, что вывод и вид полученного нами уравнения отнюдь не будет ограничен только этим конкретным примером.

Итак, рассматриваем примесные тяжелые частицы в газе из легких и ищем их функцию распределения $f(t, \mathbf{p})$.

Нам важно написать столкновительную часть (правую часть) кинетического уравнения.

Обозначим через $w(\mathbf{p}, \mathbf{q})d^3q$ отнесенную к единице времени вероятность изменения импульса тяжелой частицы $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} - \mathbf{q}$ (из начального состояния в конечное) при элементарном акте её столкновения с легкой частицей.

Тогда очень легко записать (подобно уравнению Чепмена-Колмогорова или кинетическому уравнению Паули) кинетическое уравнение (для простоты пока в однородном случае без внешних сил) для функции распределения $f(t, \mathbf{p})$:

$$\frac{\partial f(t, \mathbf{p})}{\partial t} = \int d^3q \left\{ \underbrace{w(\mathbf{p} + \mathbf{q}, \mathbf{q})f(t, \mathbf{p} + \mathbf{q})}_{\text{член прихода: } \mathbf{p} + \mathbf{q} \rightarrow \mathbf{p}} - \underbrace{w(\mathbf{p}, \mathbf{q})f(t, \mathbf{p})}_{\text{член ухода: } \mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} - \mathbf{q}} \right\}$$

причём здесь предполагается, что функция $w(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ уже учитывает все необходимые δ -функции, связанные с законами сохранения энергии и импульса при столкновениях.

Это уравнение линейно по f , но только в силу того, что столкновения идут в основном с равновесными легкими частицами.

Согласно сделанным предположениям о малости изменения импульса в процессе одного столкновения, характерные значения величины \mathbf{q} в интеграле по \mathbf{q} малы по сравнению со средним импульсом частиц \mathbf{p} .

Поэтому мы можем провести разложение в подынтегральном выражении по малым \mathbf{q} :

$$w(\mathbf{p} + \mathbf{q}, \mathbf{q})f(t, \mathbf{p} + \mathbf{q}) \approx w(\mathbf{p}, \mathbf{q})f(t, \mathbf{p}) + \mathbf{q} \frac{\partial (w(\mathbf{p}, \mathbf{q})f(t, \mathbf{p}))}{\partial \mathbf{p}} + \frac{q_\alpha q_\beta}{2} \frac{\partial^2 (w(\mathbf{p}, \mathbf{q})f(t, \mathbf{p}))}{\partial p_\alpha \partial p_\beta}$$

Тогда после подстановки получим уравнение

$$\frac{\partial f(t, \mathbf{p})}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial p_\alpha} \left\{ \tilde{A}_\alpha f + \frac{\partial (B_{\alpha\beta} f)}{\partial p_\beta} \right\} \equiv \int d^3q \left\{ \mathbf{q} \frac{\partial (w(\mathbf{p}, \mathbf{q})f(t, \mathbf{p}))}{\partial \mathbf{p}} + \frac{q_\alpha q_\beta}{2} \frac{\partial^2 (w(\mathbf{p}, \mathbf{q})f(t, \mathbf{p}))}{\partial p_\alpha \partial p_\beta} \right\}$$

где введены обозначения

$$\tilde{A}_\alpha = \int d^3q q_\alpha w(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \frac{\sum_{\delta t} q_\alpha}{\delta t}, \quad B_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} \int d^3q q_\alpha q_\beta w(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \frac{\sum_{\delta t} q_\alpha q_\beta}{2\delta t}$$

в которых во вторых выражениях знак суммы просто означает суммирование по большому числу столкновений за время δt . В этой форме записи явно выражается физический смысл величин \tilde{A}_α и $B_{\alpha\beta}$, и именно в такой форме наше полученное уравнение для функции распределения $f(t, \mathbf{p})$ фактически приобретает общий вид, не зависящий от конкретного выбора задачи (важна линейность правой части по f).

Отсюда ясно и то, почему в разложении произведения wf мы учли только два члена разложения - линейный и квадратичный - по малой величине q_α .

Казалось бы, что член первого порядка по q_α больше члена второго порядка, и только членом первого порядка и можно было бы ограничиться, но нет.

Ведь величина q_α знакопеременна и при суммировании по большому числу столкновений произойдет значительная компенсация положительных и отрицательных

слагаемых в линейном члене, поэтому и нужно учесть члены второго порядка (а среди них есть и знакопостоянные, где нет знаковой компенсации).

Полученное уравнение, в котором столкновительный член (правая часть кинетического уравнения) имеет не интегральный, а дифференциальный вид, и носит название уравнения Фоккера-Планка.

Эта правая часть имеет вид дивергенции по импульсным, в данном случае, переменным p_α :

$$\partial f / \partial t = -\partial s_\alpha / \partial p_\alpha,$$

где

$$s_\alpha = -\tilde{A}_\alpha f - \frac{\partial (B_{\alpha\beta} f)}{\partial p_\beta} = \left(-\tilde{A}_\alpha - \frac{\partial B_{\alpha\beta}}{\partial p_\beta} \right) f - B_{\alpha\beta} \frac{\partial f}{\partial p_\beta} = -A_\alpha f - B_{\alpha\beta} \frac{\partial f}{\partial p_\beta}$$

и где $A_\alpha = \tilde{A}_\alpha + \partial B_{\alpha\beta} / \partial p_\beta$, а s_α имеет смысл вектора плотности потока частиц в импульсном пространстве.

Это уравнение можно записать также в виде $\partial f / \partial t + \text{div}_{\mathbf{p}} \mathbf{s} = 0$, откуда непосредственно видно, что оно имеет вид уравнения непрерывности в пространстве переменных p_α (в импульсном пространстве).

Обобщение на пространственно-неоднородный случай в присутствии внешней силы очевидно:

$$\partial f / \partial t + \mathbf{v} \cdot \partial f / \partial \mathbf{r} + \mathbf{F} \cdot \partial f / \partial \mathbf{p} + \text{div}_{\mathbf{p}} \mathbf{s} = 0$$

Коэффициенты \tilde{A}_α и $B_{\alpha\beta}$ выражаются через средние характеристики столкновений и их вычисление представляет собой уже механическую задачу (свою для каждого случая).

В принципе однако нет необходимости вычислять оба коэффициента по отдельности.

Они всегда могут быть выражены друг через друга из условия, что поток \mathbf{s} должен обращаться в нуль в полном статистическом равновесии (без внешних сил), то есть при подстановке $f(t, \mathbf{p}) \rightarrow f^{(0)}(\mathbf{p})$ должно быть

$$s_\alpha^{(0)} = -A_\alpha f^{(0)} - B_{\alpha\beta} \partial f^{(0)} / \partial p_\beta = 0$$

что и дает связь между A_α и $B_{\alpha\beta}$.

Фактически всегда проще вычислять величины $B_{\alpha\beta}$, в которых нет дополнительных сокращений из-за знакопеременности, как в \tilde{A}_α .

Уравнение Фоккера-Планка для тяжелых частиц в газе из легких

Вот теперь в нашем конкретном случае тяжелых примесных частиц в легком газе равновесное распределение $f^{(0)}(\mathbf{p}) = \text{const} \cdot \exp \{-p^2 / (2MT)\}$, где M - масса частиц тяжелого газа, T - температура основного (легкого) газа, который сам по себе находится в равновесии.

Подстановка этого выражения в условие $s^{(0)} = 0$ дает $A_\alpha = B_{\alpha\beta} p_\beta / (MT)$, откуда и видно, что оба члена в потоке \mathbf{s} одного порядка.

Таким образом, для конкретного случая тяжелых частиц в легком газе кинетическое уравнение Фоккера-Планка принимает вид

$$\frac{\partial f(t, \mathbf{p})}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial p_\alpha} \left\{ B_{\alpha\beta} \left(\frac{p_\beta f}{MT} + \frac{\partial f}{\partial p_\beta} \right) \right\}$$

Единственный вектор, от которого могут зависеть коэффициенты $B_{\alpha\beta}$, это вектор импульса \mathbf{p} тяжелой частицы.

Но поскольку скорости этих частиц $\mathbf{v} = \mathbf{p}/M$ в среднем малы по сравнению со скоростями легких частиц, то при столкновениях их можно в нулевом приближении

считать неподвижными, и в этом приближении $B_{\alpha\beta}$ от импульса \mathbf{p} не зависят, то есть тогда это просто числа.

Кроме того, тогда же в силу изотропии пространства $B_{\alpha\beta} = \frac{\sum_{\delta t} q_{\alpha} q_{\beta}}{2\delta t} = B\delta_{\alpha\beta}$, где $B = \frac{1}{6} \sum_{\delta t} q^2 / \delta t$, и уравнение приобретает вид

$$\frac{\partial f}{\partial t} = B \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \left(\frac{\mathbf{p}f}{MT} + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} \right) \equiv B \operatorname{div}_{\mathbf{p}} \left(\frac{\mathbf{p}f}{MT} + \nabla_{\mathbf{p}} f \right)$$

Если сравнить это уравнение с уравнением диффузии тяжелых частиц в обычном пространстве с внешней силой (такое уравнение обычно называют уравнением Смолуховского) $\partial n / \partial t = \operatorname{div}(D \nabla n - bn\mathbf{F})$, где D - коэффициент диффузии, b - подвижность ($D = bT$), \mathbf{F} - внешняя сила, n - концентрация, то видно, что уравнение Фоккера-Планка описывает диффузию в импульсном пространстве, а величина B играет роль коэффициента диффузии в импульсном пространстве.

Соотношение же между коэффициентами A_{α} и $B_{\alpha\beta}$ аналогично соотношению Эйнштейна $D = bT$ между обычным коэффициентом диффузии и подвижностью.

Теперь нам осталось сделать только одно: определить сам коэффициент B .

Изменение импульса тяжелой (b) частицы $\mathbf{q} \equiv \Delta \mathbf{p}_b = \mathbf{p}_b - \mathbf{p}'_b = \mathbf{p}'_a - \mathbf{p}_a$ совпадает с точно- стью до знака с изменением импульса легкой (a) частицы, причём при вычислении изменения импульса легкой частицы можно считать тяжелую частицу неподвижной и пренебречь её отдачей при столкновении.

То есть можно считать для легких частиц, что $\mathbf{p}_a = \mathbf{p}'_a$, и тогда $q^2 = p_a^2 + p_a'^2 - 2\mathbf{p}_a \cdot \mathbf{p}'_a = 2p_a^2(1 - \cos \theta)$, где \mathbf{p}_a - импульс легкой частицы, θ - угол её рассеяния (поскольку мы работаем фактически в системе центра масс).

Тогда очевидно что, поскольку $v_{ab} \approx v_a$, то

$$B = \frac{1}{6} \frac{\sum_{\delta t} q^2}{\delta t} = \frac{1}{6} \int 2p_a^2(1 - \cos \theta) \underbrace{f_a^{(0)}(\mathbf{p}_a) v_a d\sigma d^3 p_a}_{\text{число ст. в ед. вр. в } d\Omega} = \frac{1}{3m} \int p_a^3 \sigma_t(v_a) f_a^{(0)}(\mathbf{p}_a) d^3 p_a,$$

и суммирование по столкновениям за время δt эффективно сводится к усреднению по импульсам налетающей легкой частицы, где $f^{(0)}(\mathbf{p}_a)$ - равновесная функция распределения легких частиц по их импульсам.

Если ввести концентрацию $n_a = \int f_a^{(0)} d^3 p_a$ легких частиц, то можно написать, что

$$B = \frac{n_a}{3m} \langle p_a^3 \sigma_t \rangle \equiv \frac{m^2 n_a}{3} \langle v_a^3 \sigma_t \rangle,$$

где m - масса легкой частицы, σ_t - транспортное сечение рассеяния легких частиц на тяжелых, и усреднение подразумевается по равновесному распределению частиц легкого газа.

Подвижность и коэффициент диффузии тяжелых частиц

Коэффициент диффузии в импульсном пространстве B можно связать с коэффициентом диффузии D в обычном координатном пространстве.

В общем случае левая часть уравнения должна иметь стандартный вид с заменой $\partial f / \partial t \rightarrow \partial f / \partial t + \mathbf{v} \cdot \partial f / \partial \mathbf{r} + \mathbf{F} \cdot \partial f / \partial \mathbf{p}$.

Введя внешнюю однородную силу \mathbf{F} , уравнение Фоккера Планка в пространственно-однородном случае примет вид

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{F} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = B \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \left(\frac{\mathbf{p}f}{MT} + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} \right) \rightarrow \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \left\{ \underbrace{\left(\mathbf{F} - \frac{B\mathbf{p}}{MT} \right) f - B \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}}}_{\mathbf{s}} \right\} = 0.$$

В стационарном случае при $\partial f / \partial t = 0$, то есть в динамическом равновесии в присутствии внешней силы \mathbf{F} , должно быть $\mathbf{s}(\mathbf{p}) = \text{const}$, но const должна ещё конечно и занулиться, поскольку $\lim_{p \rightarrow \infty} f(\mathbf{p}) = 0$, так что имеем условие

$$\left(\mathbf{F} - \frac{B\mathbf{p}}{MT} \right) f - B \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = 0 \rightarrow f \sim \exp \left(-\frac{(\mathbf{p} - \mathbf{F}MT/B)^2}{2MT} \right) \equiv \exp \left(-\frac{(\mathbf{p} - M\mathbf{u})^2}{2MT} \right)$$

откуда для средней дрейфовой скорости тяжелых частиц под действием силы \mathbf{F} имеем сразу выражение $\mathbf{u} = \mathbf{F}T/B$.

Тогда для подвижности немедленно получаем $b = T/B \rightarrow D = bT = T^2/B$.

Учитывая значение $B = \frac{n_a}{3m} \langle p_a^3 \sigma_t \rangle$, получим, что

$$D = \frac{3mT^2}{n_a \langle p_a^3 \sigma_t \rangle} = \frac{3T^2}{n_a m^2 \langle v_a^3 \sigma_t \rangle}.$$

Это выражение совпадает с тем, что получилось ранее.

Вывод уравнения Смолуховского из уравнения Фоккера–Планка

Запишем уравнение Фоккера–Планка в общем виде (с подстановкой $\mathbf{v} = \mathbf{p}/M$), и потом проинтегрируем его по всем импульсам (результат очевиден): $\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{M} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{F} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \left(\frac{B\mathbf{p}}{MT} f + B \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} \right) \rightarrow \frac{\partial}{\partial t} \int f d^3p + \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \cdot \int \frac{\mathbf{p}}{M} f d^3p = 0$ Так как $\int f d^3p = n(\mathbf{r}, t)$ – концентрация частиц, и обозначая $\mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = \int \frac{\mathbf{p}}{M} f d^3p \equiv \int \mathbf{v} f d^3p$, запишем это уравнение в виде $\frac{\partial n}{\partial t} + \text{div } \mathbf{J} = 0$ (это уравнение непрерывности).

Чтобы определить вектор \mathbf{J} , умножим уравнение Фоккера–Планка на \mathbf{p}/M и опять проинтегрируем по всем импульсам: $\frac{\partial}{\partial t} \int \frac{\mathbf{p}}{M} f d^3p + \frac{\partial}{\partial x_\beta} \int \frac{p_\alpha p_\beta}{M^2} f d^3p + \int d^3p \frac{p_\alpha}{M} F_\beta \frac{\partial f}{\partial p_\beta} = \int d^3p \frac{p_\alpha}{M} \frac{\partial}{\partial p_\beta} \left(\frac{B p_\beta}{MT} f + B \frac{\partial f}{\partial p_\beta} \right)$. Путем интегрирования по частям последние два интеграла преобразуются так (учитываем, что величина $B = \text{const}$):

$$\begin{aligned} \int d^3p \frac{p_\alpha}{M} \frac{\partial}{\partial p_\beta} \left(\frac{B p_\beta}{MT} f + B \frac{\partial f}{\partial p_\beta} \right) &= \int d^3p \frac{\partial}{\partial p_\beta} \left(\frac{p_\alpha}{M} \left(\frac{B p_\beta}{MT} f + B \frac{\partial f}{\partial p_\beta} \right) \right) - \\ &- \int d^3p \frac{\delta_{\alpha\beta}}{M} \left(\frac{B p_\beta}{MT} f + B \frac{\partial f}{\partial p_\beta} \right) = -\frac{B}{MT} \int d^3p \frac{p_\alpha}{M} f = -\frac{B}{MT} J_\alpha \\ \int d^3p \frac{p_\alpha}{M} F_\beta \frac{\partial f}{\partial p_\beta} &= \int d^3p \frac{\partial}{\partial p_\beta} \left(\frac{p_\alpha}{M} F_\beta f \right) - \int d^3p \frac{\delta_{\alpha\beta}}{M} F_\beta f = -\frac{n}{M} F_\alpha \end{aligned}$$

Второй же интеграл вычисляем приближенно, используя равновесную функцию распределения $f^{(0)} \sim e^{-p^2/(2mT)}$:

$$\int \frac{p_\alpha p_\beta}{M^2} f d^3p \approx \int \frac{p_\alpha p_\beta}{M^2} f^{(0)} d^3p = \frac{1}{3} \delta_{\alpha\beta} \int \frac{p^2}{M^2} f^{(0)} d^3p = \delta_{\alpha\beta} \frac{nT}{M}$$

Используя эти результаты, получаем уравнение

$$\frac{\partial J_\alpha}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\frac{nT}{M} \right) + \frac{n}{M} F_\alpha - \frac{B}{MT} J_\alpha$$

откуда, в силу медленности изменения концентрации n тяжелых частиц следует, что на больших временах $t \gg MT/B$ асимптотически имеем $\mathbf{J} = -\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \left(\frac{nT^2}{B} \right) + \frac{nT}{B} \mathbf{F} \equiv -\nabla(nD) + nb\mathbf{F}$, где мы использовали уже известные нам соотношения для подвижности и коэффициента диффузии $b = T/B$ и $D = T^2/B$.

Подставляя этот результат в уравнение непрерывности $\frac{\partial n}{\partial t} + \text{div } \mathbf{J} = 0$, получим уравнение Смолуховского:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -\text{div}(-\nabla(nD) + nb\mathbf{F}) = \text{div}(D\nabla n - nb\mathbf{F})$$

где мы использовали постоянство коэффициента D .

второй вариант изложения лол

(тут разные куски теории, которые пока не встроены в единую картину, ну и вряд ли скоро станут)

коэффициент диффузии тяжелого газа в легком Вычислить коэффициент диффузии тяжелого газа в легком.

(тут без УФП делаем всё)

соотношение Эйнштейна Получим соотношение Эйнштейна между подвижностью и коэффициентом диффузии.

Подвижность b связана с коэффициентом диффузии D простым соотношением.

Для его вывода напишем диффузионный поток \mathbf{i} , который содержит наряду с обычным членом $-\rho D \nabla c$, связанным с градиентом концентрации (температуру предполагаем постоянной), также и член, связанный со скоростью, приобретаемой частицей под влиянием внешних сил.

Этот последний член равен $\rho c \mathbf{v} = \rho c b \mathbf{f}$.

Таким образом ¹⁾,

$$\mathbf{i} = -\rho D \nabla c + \rho c b \mathbf{f}$$

Перепишем это выражение в виде

$$\mathbf{i} = -\frac{\rho D}{(\partial \mu / \partial c)_{T,p}} \nabla \mu + \rho c b \mathbf{f}$$

где μ - химический потенциал взвешенных частиц (играющих роль растворенного вещества).

Зависимость этого потенциала от концентрации (в слабом растворе) дается выражением

$$\mu = T \ln c + \psi(p, T)$$

см пар 87 так что

$$\mathbf{i} = -\frac{\rho D c}{T} \nabla \mu + \rho c b \mathbf{f}$$

В состоянии термодинамического равновесия диффузия отсутствует и поток \mathbf{i} должен обращаться в нуль.

С другой стороны, при наличии внешнего поля условие равновесия требует постоянства вдоль раствора суммы $\mu + U$, где U - потенциальная энергия взвешенной частицы в этом поле.

Тогда $\nabla \mu = -\nabla U = -\mathbf{f}$ и из равенства $\mathbf{i} = 0$ получим $D = T b$.

Подвижность есть, по определению, коэффициент пропорциональности между средней скоростью \mathbf{V} , приобретаемой частицей газа во внешнем поле, и действующей на частицу со стороны поля силой \mathbf{f} :

$$\mathbf{V} = b \mathbf{f}$$

Скорость же \mathbf{V} определяется в данном случае из условия взаимной компенсации силы \mathbf{f} и силы сопротивления \mathbf{f}_r , испытываемой движущейся тяжелой частицей со стороны легких (столкновениями тяжелых частиц друг с другом можно пренебречь ввиду их относительной редкости).

Функция распределения легких частиц является при этом максвелловской:

$$f_0 = \frac{N_i}{(2\pi m_1 T)^{3/2}} \exp\left(-\frac{m_1 v^2}{2T}\right)$$

где m_1 -масса легкой частицы.

Рассмотрим какую-нибудь одну определенную тяжелую частицу; пусть ее скорость есть V .

Перейдем теперь к системе координат, движущейся вместе с этой частицей, и пусть \mathbf{v} обозначает скорости легких частиц в этой новой системе.

Функция распределения легких частиц в этой системе координат есть $f_0(\mathbf{v} + \mathbf{V})$.

Предполагая скорость $V_{\text{малой}}$, можем написать

$$f_0(\mathbf{v} + \mathbf{V}) \approx f_0(v) \left(1 - \frac{m_1 \mathbf{v} \mathbf{V}}{T} \right)$$

Искомую силу сопротивления \mathbf{f}_r можно вычислить как полный импульс, передаваемый тяжелой частице легкими, которые сталкиваются с нею в единицу времени.

Тяжелая частица остается при столкновении неподвижной.

Легкая же частица приносит с собой импульс $m_1 \mathbf{v}$; после столкновения, при котором ее импульс поворачивается на угол α , она уносит с собой импульс, равный в среднем $m_1 v \cos \alpha$.

Поэтому импульс, передаваемый при таком столкновении тяжелой частице, равен в среднем $m_1 v (1 - \cos \alpha)$.

Умножая его на плотность потока легких частиц со скоростью \mathbf{v} где опять введено обозначение (11,4).

При подстановке сюда $f_0(\mathbf{v} + \mathbf{V})$ в виде (12,3) первый член обращается в нуль (интегрированием по направлениям скорости \mathbf{v}), так что остается

$$\mathbf{f}_r = -\frac{m_1^2}{T} \int f_0(v) (\mathbf{V} \mathbf{v}) \mathbf{v} v \sigma_t d^3 p$$

или, усредняя по направлениям \mathbf{v}

$$\mathbf{f}_r = -\frac{m_1^2}{3T} \mathbf{V} \int f_0(v) \sigma_t v^3 d^3 p = -N_i \frac{m_1^2}{3T} \mathbf{V} \langle \sigma_t v^3 \rangle$$

где угловые скобки снова обозначают усреднение по обычному максвелловскому распределению.

Наконец, имея в виду, что в рассматриваемом случае $N_1 \gg N_2$, пишем $N_1 \approx N = P/T$, так что

$$\mathbf{f}_r = -\frac{m_1^2 P}{3T^2} \langle \sigma_t v^3 \rangle \mathbf{V}$$

Приравняв нулю сумму силы сопротивления \mathbf{f}_r и внешней силы \mathbf{f} , получим согласно (12,2) подвижность b , а затем и искомый коэффициент диффузии

$$D = bT = \frac{3T^3}{m_1^2 P \langle \sigma_t v^3 \rangle}$$

коэффициент диффузии для примеси тяжелого газа в легком Определим коэффициент диффузии в импульсном пространстве для частицы тяжелого газа в легком, предполагая скорости тяжелых частиц малыми по сравнению со скоростями легких.

При вычислении передачи импульса можно считать тяжелую частицу неподвижной и пренебречь изменением ее энергии при столкновении.

Изменение импульса тяжелой частицы вычисляется тогда как (совпадающее с ним) изменение импульса легкой частицы: $(\Delta \mathbf{p})^2 = 2p'^2(1 - \cos \alpha)$, где p' - величина импульса легкой частицы, а α - угол его поворота при рассеянии.

Отсюда

$$\sum (\Delta \mathbf{p})^2 = \delta t \int 2p'^2 (1 - \cos \alpha) N v' d\sigma$$

(где N - плотность числа частиц легкого газа) и окончательно

$$B = \frac{N}{3m} \langle p'^3 \sigma_t \rangle$$

где $\sigma_t = \int (1 - \cos \alpha) d\sigma$ - транспортное сечение, а усреднение производится по распределению частиц легкого газа.

подвижность тяжелой частицы в легком газе С помощью уравнения Фоккера-Планка определить подвижность тяжелой частицы в легком газе.

Подвижность b есть коэффициент в равенстве

$$\bar{\mathbf{v}} \equiv \int \delta f \cdot \mathbf{v} d^3 p = b \mathbf{F}.$$

Необходимо найти δf . Для этого запишем кинетическое уравнение при наличии внешнего поля, которое имеет вид

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{F} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = B \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \left(\frac{\mathbf{p}}{MT} f + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} \right),$$

то есть добавляется член, содержащий силу \mathbf{F} , действующая на частицу.

Предполагая ее малой, ищем стационарное решение уравнения в виде $f' = f_0 + \delta f$, где f_0 это максвелловское распределение, а $\delta f \ll f_0$.

Для δf находим уравнение

$$B \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \left(\frac{\partial \delta f}{\partial \mathbf{p}} + \frac{\mathbf{p}}{MT} \delta f \right) = \mathbf{F} \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{p}}$$

Отсюда

$$B \left(\frac{\partial \delta f}{\partial \mathbf{p}} + \frac{\mathbf{p}}{MT} \delta f \right) = \mathbf{F} f_0$$

и затем $\delta f = f_0 \mathbf{F} \mathbf{p} / B$.

Вычисление интеграла дает

$$b = \frac{T}{B} = \frac{3mT}{N \langle \sigma_t p^3 \rangle}$$

в согласии с коэффициентом диффузии, вычисленным без уравнения Фоккера-Планка где-то у меня выше

$$D = bT = \frac{3T^3}{m_1^2 P \langle \sigma_t v^3 \rangle}.$$

связь уравнения со столкновительным членом типа Фоккера-Планка в импульсном пространстве и уравнение диффузии Свести кинетическое уравнение со столкновительным членом типа Фоккера-Планка в импульсном пространстве к уравнению диффузии (Смолуховского) в реальном пространстве и обсудить соотношения Эйнштейна

5.1.11 Гидродинамический предел УФП

(колоколов, подвивлов, образцовский 6.2, задание ссылается на нее)

теория

Предположим, что начальное неравновесное распределение является слабо неоднородным в пространстве (характерная длина L , на которой меняется f много больше длины свободного пробега λ) и характерное время T изменения f много больше времени затухания $1/\gamma$.

Плотность числа частиц в окрестности точки \vec{r} находится как

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

В уравнении Фоккера - Планка

$$\partial_t f = -\frac{\vec{p}}{m} \partial_{\vec{r}} f + \partial_{\vec{p}} (\gamma \vec{p} + \vec{\nabla} U) + \frac{1}{2} \partial_{\vec{p}} (D \partial_{\vec{p}} f)$$

проинтегрируем по импульсам и получим

$$\partial_t n(\vec{r}, t) = -\frac{\partial}{\partial r_\beta} \int \frac{p_\beta}{m} f d^3 p - \int \partial_{\vec{p}} \vec{j}_{\vec{p}} d^3 p = -\frac{\partial}{\partial r_\beta} J_\beta$$

поскольку последний интеграл равен нулю, в чем легко убедиться интегрированием по частям, и мы ввели обозначение

$$J_\beta = \int \frac{p_\beta}{m} f d^3 p$$

Найдем уравнение для J_α , умножая уравнение Фоккера - Планка на p_α/m и интегрируя по импульсам:

$$\partial_t J_\alpha = -\frac{\partial}{\partial r_\beta} \int \frac{p_\alpha p_\beta}{m^2} f d^3 p + \int \frac{p_\alpha}{m} \partial_{\vec{p}} [(\gamma \vec{p} + \vec{\nabla} U) f] d^3 p + \int \frac{p_\alpha}{m} \frac{D}{2} \partial_{\vec{p}}^2 f d^3 p.$$

Последний интеграл в этом выражении равен нулю после двух интегрирований по частям.

Находим первый интеграл, используя равновесную функцию $f \sim e^{-p^2/2mT}$:

$$\int \frac{p_\alpha p_\beta}{m^2} f d^3 p = \frac{1}{3} \delta_{\alpha\beta} \int \frac{p^2}{m^2} f d^3 p = \delta_{\alpha\beta} \frac{T}{m} n(\vec{r}, t)$$

Второй интеграл равен

$$\int \frac{p_\alpha}{m} \frac{\partial}{\partial p_\beta} [\gamma p_\beta f] d^3 p = -\frac{\gamma}{m} \int p_\beta f \delta_{\alpha\beta} d^3 p = -\gamma J_\alpha.$$

Третий интеграл

$$\int \frac{p_\alpha}{m} \frac{\partial}{\partial p_\beta} [\nabla_\beta U f] d^3 p = -\nabla_\beta U \int \frac{1}{m} f \delta_{\alpha\beta} d^3 p = -\frac{n(\vec{r})}{m} \nabla_\alpha U.$$

Таким образом, мы получили уравнение

$$\partial_t J_\alpha = -\frac{\partial}{\partial r_\alpha} \left(\frac{T}{m} n(\vec{r}) \right) - \gamma J_\alpha - \frac{n(\vec{r})}{m} \nabla_\alpha U \equiv -\gamma J_\alpha(t) + B_\alpha(t)$$

где $B_\alpha(t)$ меняется очень медленно на временах $\sim 1/\gamma$, поскольку зависит от медленно меняющейся плотности числа частиц.

Получаем

$$J_\alpha(t) = J_\alpha(0)e^{-\gamma t} + \int_0^t B_\alpha(t') e^{-\gamma(t-t')} dt' \approx$$

$$\approx J_\alpha(0)e^{-\gamma t} + B_\alpha(t) \frac{1 - e^{-\gamma t}}{\gamma} \rightarrow \frac{B_\alpha(t)}{\gamma}$$

для $t \gg 1/\gamma$.

Подставляя это выражение в уравнение для плотности числа частиц, имеем:

$$\partial_t n(\vec{r}, t) = \frac{T}{m\gamma} \Delta n(\vec{r}, t) + \frac{1}{m\gamma} \vec{\nabla} (n(\vec{r}, t) \vec{\nabla} U).$$

Вводя обозначение $\kappa \equiv T/(m\gamma)$ для коэффициента диффузии в координатном пространстве, получим уравнение Смолуховского:

$$\partial_t n(\vec{r}, t) = \kappa \vec{\nabla} \left(\vec{\nabla} n(\vec{r}, t) + n(\vec{r}, t) \frac{\vec{\nabla} U}{T} \right)$$

Другой вывод этого уравнения основан на исключении быстро меняющейся импульсной переменной $\vec{p}(t)$ непосредственно с помощью уравнения Ланжевена

$$\dot{\vec{p}} = -\gamma \vec{p} - \vec{\nabla} U + \vec{\xi}(t), \quad \dot{\vec{r}} = \frac{\vec{p}}{m}$$

с корреляторами случайной силы $\langle \vec{\xi}(t) \rangle = 0$, $\langle \vec{\xi}_i(t) \vec{\xi}_j(t') \rangle = D \delta_{ij} \delta(t - t')$ Решение уравнения для $t \gg 1/\gamma$ есть

$$\vec{p}(t) = -\frac{1}{\gamma} \vec{\nabla} U + \frac{1}{\gamma} \vec{\xi}(t)$$

так что

$$\dot{\vec{r}} = -\frac{1}{m\gamma} \vec{\nabla} U + \frac{1}{m\gamma} \vec{\xi}(t)$$

Тогда для плотности числа частиц $n(\vec{r}, t) = \langle \delta(\vec{r} - \vec{r}(t)) \rangle$ получим уравнение

$$\partial_t n(\vec{r}, t) = \left\langle - \int \frac{d\vec{\mu}}{(2\pi)^d} i\vec{\mu} \cdot \dot{\vec{r}}(t) e^{i(\vec{r} - \vec{r}(t)) \cdot \vec{\mu}} \right\rangle =$$

$$= \left\langle \int \frac{d\vec{\mu}}{(2\pi)^d} \frac{i\vec{\mu} \cdot \vec{\nabla} U}{m\gamma} e^{i(\vec{r} - \vec{r}(t)) \cdot \vec{\mu}} \right\rangle - \left\langle \int \frac{d\vec{\mu}}{(2\pi)^d} \frac{i\vec{\mu} \cdot \vec{\xi}(t)}{m\gamma} e^{i(\vec{r} - \vec{r}(t)) \cdot \vec{\mu}} \right\rangle =$$

$$= \frac{1}{m\gamma} \vec{\nabla} (n(\vec{r}, t) \vec{\nabla} U) + \frac{T}{m\gamma} \vec{\nabla}^2 n(\vec{r}, t)$$

где было использовано

$$\vec{r}(t) = \vec{r}(t - \delta t) + \frac{1}{m\gamma} \int_{t-\delta t}^t \vec{\xi}(t') dt' - \delta t \frac{1}{m\gamma} \vec{\nabla} U$$

$$e^{i(\vec{r} - \vec{r}(t)) \cdot \vec{\mu}} \approx e^{i(\vec{r} - \vec{r}(t-\delta t)) \cdot \vec{\mu}} \left(1 - \int_{t-\delta t}^t \frac{i\vec{\mu} \cdot \vec{\xi}(t')}{m\gamma} dt' \right)$$

$$\left\langle \int \frac{d\vec{\mu}}{(2\pi)^d} \frac{i\mu_\alpha \xi_\alpha(t)}{m\gamma} e^{i(\vec{r} - \vec{r}(t-\delta t)) \cdot \vec{\mu}} \int_{t-\delta t}^t \frac{i\mu_\beta \xi_\beta(t')}{m\gamma} dt' \right\rangle_{\delta t \rightarrow 0} =$$

$$= \frac{\partial}{\partial r_\alpha} \frac{\partial}{\partial r_\beta} \frac{(m\gamma T) \delta_{\alpha\beta} n(\vec{r})}{m^2 \gamma^2} = \frac{T}{m\gamma} \Delta n(\vec{r})$$

5.1.12 О кинетике макромолекул по Белану (?)

(потом мб в другое место напишу, но очень важно в теории это и добавить.)

5.1.13 Слабо ионизированный газ в электрическом поле

(какая-то модель)

описание модели

Рассмотрим ионизованный газ, находящийся в однородном электрическом поле E .

Поле нарушает равновесное распределение свободных электронов в газе и создает в нем электрический ток.

Выведем кинетическое уравнение, определяющее электронное распределение.

Слабость ионизации означает, что концентрация электронов (и ионов) в газе мала.

Поэтому основную роль играют столкновения электронов лишь с нейтральными молекулами; столкновениями же электронов друг с другом (и с ионами) можно пренебречь.

Будем предполагать также, что средняя энергия, приобретаемая электронами в электрическом поле (даже если поле сильное; см. ниже), недостаточна для возбуждения или ионизации молекул.

Тогда столкновения электронов с молекулами можно считать упругими.

Ввиду большой разницы в массах электронов m и молекул M , средняя скорость электронов велика по сравнению со средней скоростью молекул.

По той же причине импульс электрона при столкновении меняется сильно по направлению, но лишь слабо по абсолютной величине.

В этих условиях интеграл столкновений в кинетическом уравнении разбивается в сумму двух частей, представляющих изменения числа частиц в заданном элементе импульсного пространства соответственно от изменения величины и от изменения направления импульса;

первая из этих частей может быть представлена в фоккер-планковском дифференциальном виде.

Ввиду симметрии вокруг направления поля, функция распределения зависит (помимо времени) только от двух переменных: от абсолютной величины импульса p и от угла θ между $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$ и направлением \mathbf{E} (которое выберем в качестве оси z).

сама модель слабо ионизированного газа в электрическом поле

Кинетическое уравнение для функции $f(t, p, \theta)$ имеет вид:

$$\frac{\partial f}{\partial t} - e\mathbf{E} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = -\frac{1}{p^2} \frac{\partial}{\partial p} p^2 s + Nv \int [f(t, p, \theta') - f(t, p, \theta)] d\sigma$$

где (???)

$$s = -B \left(\frac{v}{T} f + \frac{\partial f}{\partial p} \right), \quad B = \frac{\sum (\Delta p)^2}{2\delta t}.$$

Первый член в правой части (22).

1) отвечает правой части уравнения Фоккера-Планка (21).
12).

Второй же член есть интеграл столкновений по отношению к изменению направления импульса.

В этом интеграле молекулы можно считать неподвижными (N - плотность их числа); тогда число столкновений, испытываемых электроном в единицу времени и меняющих направление импульса от $\hat{\theta}$ и θ' (или от θ^7 и θ), есть $Nvd\sigma$, где $d\sigma$ - сечение рассеяния электрона на неподвижной молекуле, зависящее от p и от угла α между \mathbf{p} и \mathbf{p}' (предполагается, что сечение уже усреднено по ориентациям молекул).

Ниже будет рассматриваться стационарное состояние с независимой от времени функцией распределения, соответственно чему член $\partial f'/\partial t$ в уравнении (22.

1) будет опущен.

Для вычисления величины B воспользуемся равенством

$$(\mathbf{v} - \mathbf{V})^2 = (\mathbf{v}' - \mathbf{V}')^2,$$

выражающим неизменность величины относительной скорости двух частиц при упругом столкновении $(\mathbf{v}, \mathbf{V}$.

и \mathbf{v}', \mathbf{V}' - начальные и конечные скорости электрона и молекулы).

Изменение скорости молекулы мало по сравнению с изменением скорости электрона: $\Delta \mathbf{V} = -m\Delta \mathbf{v}/M$; поэтому после раскрытия написанного равенства можно положить в нем $\mathbf{V} = \mathbf{V}'$.

Тогда

$$2\mathbf{V}(\mathbf{v} - \mathbf{v}') = v^2 - v'^2 \approx 2v\Delta v$$

где $\Delta v = v - v'$ - малая величина.

Таким образом,

$$(\Delta p)^2 = m^2(\Delta v)^2 = \frac{m^2}{v^2} [(\mathbf{V}\mathbf{v})^2 + (\mathbf{V}\mathbf{v}')^2 - 2(\mathbf{V}\mathbf{v})(\mathbf{V}\mathbf{v}')]]$$

Усреднение этого выражения осуществляется в два этапа.

Прежде всего, усредняем по распределению (максвелловскому) скоростей молекул \mathbf{V} .

Ввиду изотропии этого распределения имеем $\langle V_\alpha V_\beta \rangle = \delta_{\alpha\beta} \langle V^2 \rangle / 3$, а средний квадрат $\langle V^2 \rangle = 3T/M$. Поэтому получаем

$$(\Delta p)^2 = \frac{m^2 T}{M v^2} (v^2 + v'^2 - 2\mathbf{v}\mathbf{v}') \approx \frac{2m^2 T}{M} (1 - \cos \alpha).$$

Теперь надо усреднить по столкновениям, испытываемым электроном в единицу времени; это осуществляется интегрированием по $N v d\sigma$.

В результате получим

$$B = \frac{N m^2 v \sigma_t T}{M} = \frac{p m T}{M l}$$

где $\sigma_t = \int (1 - \cos \alpha) d\sigma$ - транспортное сечение, а l - длина свободного пробега, определенная как

$$l = (N \sigma_t)^{-1}.$$

(в общем случае l - функция p).

Таким образом, фигурирующий в (22. 1) поток

$$s = -\frac{m p}{M l} \left(v f + T \frac{\partial f}{\partial p} \right)$$

Обратим внимание на то, что согласно (22.

2) изменение энергии электрона при столкновении $\Delta \varepsilon \sim \bar{v} \Delta p \sim T(m/M)^{1/2} \sim \sim \bar{\varepsilon}(m/M)^{1/2}$.

Поэтому заметное изменение этой энергии происходит лишь в результате $\sim M/m$ столкновений, между тем как направление импульса электрона существенно меняется уже в одном столкновении.

Другими словами, время релаксации по энергиям электронов $\tau_\varepsilon \sim \tau_p M/m$, где $\tau_p \sim l/\bar{v}$ - время релаксации по направлениям импульса.

Левую часть уравнения (22.

1) тоже надо преобразовать к переменным p и θ :

$$e\mathbf{E} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = eE \frac{\partial f}{\partial p_z} = eE \left[\cos \theta \frac{\partial f}{\partial p} + \frac{\sin^2 \theta}{p} \frac{\partial f}{\partial \cos \theta} \right]$$

Решение составленного таким образом кинетического уравнения можно искать в виде разложения по полиномам Лежандра:

$$f(p, \theta) = \sum_{n=0}^{\infty} f_n(p) P_n(\cos \theta)$$

Мы увидим ниже, что последовательные члены этого разложения быстро убывают по порядку величины.

Поэтому фактически достаточно ограничиться двумя первыми членами разложения:

$$f(p, \theta) = f_0(p) + f_1(p) \cos \theta.$$

Интеграл в (22.

1) при подстановке (22.

8) дает

$$\int [f(p, \theta') - f(p, \theta)] d\sigma = -f_1 \sigma_t \cos \theta$$

(ср.

преобразование такого же интеграла в (11.

1)), после чего кинетическое уравнение принимает вид

$$-eE \left[f'_0 \cos \theta + f'_1 \cos^2 \theta + \frac{f_1}{p} \sin^2 \theta \right] + \frac{1}{p^2} (s_0 p^2)' + \frac{v}{l} f_1 \cos \theta = 0$$

где штрих означает дифференцирование по p ; здесь опущен член $p^{-2} (s_1 p^2)' \cos \theta$, заведомо малый (в отношении $\sim m/M$) по сравнению с членом $(v f_1/l) \cos \theta(s_0)$.

и s_1 - выражения (22.

5) с f_0 или f_1 вместо f).

Умножив это уравнение на $P_0 = 1$ или на $P_1 = \cos \theta$ и проинтегрировав его по $\bar{d} \cos \theta$, получим два уравнения:

$$\frac{1}{p^2} (p^2 S)' = 0, \quad S = -\frac{1}{lM} (p^2 f_0 + mpT f'_0) - \frac{eE}{3} f_1$$

$$f_1 = \frac{eEl}{v} f'_0$$

Выражение S представляет собой плотность потока частиц в импульсном пространстве, измененного электрическим полем.

Из (22.

9) следует, что $S = \text{const} / p^2$. Но поток S должен быть конечен при всех значениях p ; поэтому $\text{const} = 0$. Подставив теперь f_1 из (22.

10) в уравнение $S = 0$, найдем уравнение, определяющее функцию $f_0(p)$:

$$\left[pT + \frac{(eEl)^2 M}{3p} \right] f'_0 + \frac{p^2}{m} f_0 = 0$$

До сих пор мы не делали никаких предположений о виде функции $l(p)$, а интеграл уравнения первого порядка (22.

11) может быть написан с произвольной функцией $l(p)$. С целью получения более конкретных результатов предположим $l = \text{const}$, что эквивалентно предположению о независимости сечения σ_t от импульса).

Тогда интегрирование уравнения (22.11) дает

$$f_0(p) = \text{const} \cdot \left(\frac{\varepsilon}{T} + \frac{\gamma^2}{6} \right)^{\gamma^2/6} e^{-\varepsilon/T}$$

где

$$\gamma = \frac{eEl}{T} \sqrt{\frac{M}{m}}$$

Для функции же $f_1(p)$ из (22.10) и (22.12) имеем

$$f_1 = -f_0 \sqrt{\frac{m}{M}} \frac{\gamma \varepsilon / T}{\varepsilon / T + \gamma^2 / 6}.$$

Величина γ является тем параметром, который характеризует степень воздействия поля на распределение электронов.

Пре-дельный случай слабых полей отвечает неравенству $\gamma \ll 1$. В первом приближении $f_0(p)$ сводится тогда к невозмущенному максвелловскому распределению ($f_0 \sim e^{-\varepsilon/T}$, $\bar{\varepsilon} = 3T/2$), а

$$f_1 = -\frac{eEl}{T} f_0, \quad \gamma \ll 1$$

Возникающий в газе электрический ток определяется подвижностью электронов

$$b = \frac{\bar{v}_z}{-eE} = \frac{1}{-eEN_e} \int v \cos \theta \cdot f d^3p = -\frac{1}{3eEN_e} \int v f_1 d^3p$$

N_e - плотность числа электронов.

Простое вычисление с f из (22. 15) дает для подвижности в слабом поле

$$b_0 = \frac{2^{3/2} l}{3\pi^{1/2} (mT)^{1/2}}$$

Как и следовало, это выражение удовлетворяет соотношению Эйнштейна $D = bT$, где D - коэффициент диффузии (11.10).

Смысл неравенства $\gamma \ll 1$ как критерия слабости поля можно понять из следующих простых соображений.

Очевидно, что влияние поля на распределение электронов будет слабым до тех пор, пока энергия, набираемая электроном за время его свободного пробега, будет мала по сравнению с энергией, отдаваемой им атому при столкновении.

Первая из них есть eEl , а вторая -

$$\delta \varepsilon \sim V \delta P \sim V p \sim \sqrt{\frac{T}{M}} \sqrt{Tm}$$

(P и V - импульс и скорость атома; изменение δP порядка величины импульса электрона).

Сравнение обоих выражений и приводит к требуемому критерию.

В обратном случае сильных полей ($\gamma \gg 1$) находим ¹⁾

$$f_0(p) = A \exp \left(-\frac{3\varepsilon^2}{\gamma^2 T^2} \right), \quad A = \frac{3^{3/4} N_e}{2^{3/2} \pi \Gamma(3/4) (m\gamma T)^{3/2}}$$

$$f_1 = -6 \sqrt{\frac{m}{M}} \frac{\varepsilon}{T\gamma} f_0$$

Средняя энергия электронов:

$$\bar{\varepsilon} = \frac{2}{\pi} \sqrt{\frac{2M}{3m}} \Gamma^2 \left(\frac{5}{4} \right) eEl = 0,43 eEl \sqrt{\frac{M}{m}}$$

а их подвижность

$$b = \frac{4\Gamma(5/4)l^{1/2}}{3^{3/4}\pi^{1/2}(mM)^{1/4}(eE)^{1/2}}$$

Остается выяснить критерий сходимости разложения (22.7).

Для этого замечаем, что его последовательные члены связаны, По порядку величины, соотношением

$$\frac{eE}{mv}f_{n-1} \sim \frac{v}{l}f_n$$

(после подстановки (22.7), умножения на $P_n(\cos\theta)$ и интегрирования по $d\cos\theta$ в левой части кинетического уравнения остается член с f_{n-1} , а в интеграле столкновений - лишь cf_n).

При $\gamma \ll 1$ средняя энергия электрона $\bar{\varepsilon} \sim T$, и из (22.22) имеем

$$\frac{f_n}{f_{n-1}} \sim \frac{eEl}{T} \ll \left(\frac{m}{M}\right)^{1/2} \ll 1.$$

В случае же больших полей, когда $\gamma \gg 1$, средняя энергия $\bar{\varepsilon} \sim e_{El}(M/m)^{1/2}$, так что снова

$$f_n/f_{n-1} \sim (m/M)^{1/2} \ll 1$$

Таким образом, сходимость разложения обеспечивается малостью отношения m/M .

5.1.14 Флуктуации в слабо ионизованном неравновесном газе (-)

пока не интересно.

мотивация

теория

5.1.15 (!!) Рекомбинация и ионизация

суть рекомбинации

Установление равновесной степени ионизации в частично ионизованном газе осуществляется путем различных элементарных актов столкновительной ионизации и обратной рекомбинации сталкивающихся заряженных частиц.

В простейшем случае, когда в газе имеется помимо электронов лишь один сорт ионов, процесс установления ионизационного равновесия описывается уравнением вида

$$\frac{dN_e}{dt} = \beta - \alpha N_e N_i$$

Первый член... (???) столкновениях нейтральных атомов или путем ионизации атомов фотонами);

это число не зависит от наличных плотностей электронов N_e и ионов N_i .

Второй же член дает убыль числа электронов благодаря их рекомбинации с ионами; величину α называют коэффициентом рекомбинации.

Процесс рекомбинации обычно весьма медлен по сравнению с остальными процессами установления равновесия в плазме.

Дело в том, что образование нейтрального атома при столкновении иона с электроном требует уноса освобождающейся энергии (энергии связи электрона в атоме). Эта энергия может излучиться в виде фотона (радиационная рекомбинация); в таком случае медленность процесса связана с малостью квантовоэлектродинамической

вероятности излучения. Освобождающаяся энергия может быть также передана третьей частице - нейтральному атому; в этом случае медленность процесса связана с малой вероятностью тройных столкновений. Все это приводит к тому, что рекомбинацию часто имеет смысл изучать в условиях, когда распределение всех частиц можно считать максвелловским.

В равновесии производная dN_e/dt обращается в нуль. Отсюда следует, что величины α и β в (24.1) связаны друг с другом соотношением

$$\beta = \alpha N_{0e} N_{0i}$$

где N_{0e} и N_{0i} - равновесные плотности электронов и ионов, определяющиеся соответствующими термодинамическими формулами

Коэффициент радиационной рекомбинации

Коэффициент радиационной рекомбинации вычисляется непосредственно по сечению рекомбинации $\sigma_{\text{рек}}$ при столкновении электрона с неподвижным ионом (скоростью иона можно пренебречь по сравнению со скоростью электрона):

$$\alpha = \langle v_e \sigma_{\text{рек}} \rangle$$

где усреднение производится по максвелловскому распределению скоростей электрона v_e .

случаи учета рекомбинации

Радиационная рекомбинация существенна, однако, лишь в достаточно разреженном газе, когда тройными столкновениями частиц можно вовсе пренебречь.

В менее разреженном газе основным механизмом является рекомбинация с участием третьей частицы - нейтрального атома.

Именно этот механизм мы и рассмотрим теперь подробнее.

При столкновении с атомами энергия электрона изменяется малыми порциями.

Поэтому процесс рекомбинации начинается с образования сильно возбужденного атома, а при дальнейших столкновениях этого атома происходит постепенное опускание электрона на все более низкие уровни.

диффузия по энергии

Такой характер процесса позволяет рассматривать его как «диффузию по энергии» захваченного электрона и соответственно применить к нему уравнение Фоккера-Планка (???)

Введем функцию распределения захваченных электронов по их отрицательным энергиям ε .

Основную роль будет, естественно, играть «диффузия» по области энергий $|\varepsilon| \sim T$.

Напомним в этой связи, что температуру надо во всяком случае считать здесь малой по сравнению с ионизационным потенциалом атомов I ; при $T \sim I$ газ был бы уже практически полностью ионизованным.

(та самая теория термача, которую еще не прописал, но разбирал уже)

модель через уравнение Фоккера-Планка

уравнение Фоккера-Планка:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{\partial s}{\partial \varepsilon}, \quad s = -B \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} - Af$$

Как обычно, коэффициент A можно выразить через B из условия $s = 0$ при $f = f_0$, где f_0 - равновесное распределение.

После этого поток s примет вид

$$s = -Bf_0 \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} f_0$$

«Коэффициент диффузии» $B(\varepsilon)$ определяется по общему правилу как

$$B(\varepsilon) = \frac{\sum (\Delta \varepsilon)^2}{2\delta t}$$

где $\Delta \varepsilon$ - изменение энергии возбуждения атома при его столкновении с невозбужденным атомом;

вычисление $B(\varepsilon)$ по этой формуле сводится к решению механической задачи о столкновении и последующему усреднению по скорости невозбужденного атома.

Для нахождения функции $f_0(\varepsilon)$ замечаем, что равновесное распределение по импульсам и координатам для электрона в кулоновском поле заряда ze (заряд иона) дается формулой Больцмана

$$f_0(\mathbf{p}, \mathbf{r}) = (2\pi mT)^{-3/2} e^{-\varepsilon/T}, \quad \varepsilon = \frac{p^2}{2m} - \frac{ze^2}{r}$$

(о ее нормировке см. ниже).

Движение электрона при $|\varepsilon| \sim T \ll I$ квазиклассично, что и позволяет использовать для энергии ε ее классическое выражение. Функция же распределения по ε есть, следовательно,

$$f_0(\varepsilon) d\varepsilon = (2\pi mT)^{-3/2} e^{|\varepsilon|/T} \tau(\varepsilon) d\varepsilon$$

где $\tau(\varepsilon)$ - объем фазового пространства, отвечающий интервалу $d\varepsilon$:

$$\tau(\varepsilon) = \int \delta \left(|\varepsilon| + \frac{p^2}{2m} - \frac{ze^2}{r} \right) d^3x d^3p.$$

(???) Заменив $d^3x d^3p = 4\pi r^2 dr \cdot 4\pi p^2 dp$ и произведя интегрирование, получим

$$\tau(\varepsilon) = \frac{\sqrt{2}\pi^3 (ze^2)^3 m^{3/2}}{|\varepsilon|^{5/2}}$$

Для формулировки условий, определяющих нужное нам решение уравнений (24.4), (24.5), удобно считать, что наличная плотность электронов в газе $N_e \gg N_{0e}$; тогда в (24.1) можно пренебречь скоростью ионизации β , так что убыль N_e будет определяться одной лишь рекомбинацией.

В этих условиях постоянное значение потока s в стационарном решении уравнения (24.4) прямо дает значение коэффициента рекомбинации ($s = \text{const} = -\alpha$), если только функция $f(\varepsilon)$ должным образом нормирована.

Именно, на самых верхних уровнях ($|\varepsilon| \ll T$) электроны находятся в равновесии со свободными электронами; это значит, что должно быть

$$f(\varepsilon)/f_0(\varepsilon) \rightarrow 1 \quad \text{при} \quad |\varepsilon| \rightarrow 0$$

причем нормировка $f_0(\varepsilon)$ должна отвечать одному свободному электрону в единице объема (что и выполнено в (24.7)).

Для нахождения второго граничного условия (при $\varepsilon \rightarrow -\infty$) замечаем, что распределение на глубоких уровнях возбужденного атома не возмущено наличием

свободных электронов и не зависит от их числа: оно пропорционально равновесному числу N_{0e} , а не фактическому N_e . При условии $N_e \gg N_{0e}$ эта ситуация выражается граничным условием

$$f(\varepsilon)/f_0(\varepsilon) \rightarrow 0 \quad \text{при} \quad |\varepsilon| \rightarrow \infty$$

Интегрируя уравнение $s = \text{const}$ с граничным условием (24.11), имеем

$$\frac{f}{f_0} = \text{const} \int_0^{|\varepsilon|} \frac{d|\varepsilon|}{B f_0} + 1$$

Константа будет совпадать с $-\alpha$, если определить ее так, чтобы удовлетворилось условие (24.12). Таким образом, находим окончательно

$$\frac{1}{\alpha} = \int_0^\infty \frac{d|\varepsilon|}{B f_0} = \frac{2T^{3/2}}{\pi^{3/2} (ze^2)^3} \int_0^\infty \frac{e^{-|\varepsilon|/T} |\varepsilon|^{5/2}}{B(-|\varepsilon|)} d|\varepsilon|$$

Эта формула относится к процессу, в котором роль «третьего тела» играет невозбужденный атом. Если газ уже сильно ионизован (что, однако, еще совместимо с условием $T \ll I$) и достаточно плотен, основная роль может перейти к рекомбинации с участием второго электрона в качестве третьего тела. Скорость рекомбинации становится тогда пропорциональной $N_e^2 N_i$, так что коэффициент рекомбинации, определенный по-прежнему согласно (24.1), будет сам пропорционален N_e . Поскольку релаксация по энергии при электронных соударениях происходит быстро, изложенный метод вычисления коэффициента рекомбинации в этом случае неприменим.

ЛЛ10-28.1 коэффициент радиационной рекомбинации с захватом электрона на основное состояние атома водорода при температурах $T \ll I$

(что это?)

Найти коэффициент радиационной рекомбинации с захватом электрона на основное состояние атома водорода при температурах $T \ll I$) $I = e^4 m / (2\hbar^2)$ - потенциал ионизации атома водорода).

Сечение рекомбинации медленного электрона с неподвижным протоном на основной уровень водородного атома есть

$$\sigma_{\text{рек}} = \frac{2^{10} \pi^2 (e^2 / \hbar c) a_B^2 I^2}{3(2, 71 \dots)^4 m^2 c^2 v_e^2}$$

где v_e - скорость электрона, $a_B = \frac{\hbar^2}{me^2}$ - боровский радиус (см. IV, § 56, формулы (56.13), (56.14)). Среднее значение $\langle v_e^{-1} \rangle = \left(\frac{2m}{\pi T}\right)^{1/2}$. В результате получим согласно (24.3):

$$\alpha = \frac{2^{10} \pi^{3/2}}{3(2, 71)^4} \left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^3 \frac{a_B^3 I}{\hbar} \left(\frac{I}{T}\right)^{1/2} = 35 \left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^3 \frac{a_B^3 I}{\hbar} \left(\frac{I}{T}\right)^{1/2}$$

ЛЛ10-28.1 коэффициент рекомбинации в каком-то очень упрощении

Определить коэффициент рекомбинации согласно (24.13), пренебрегая влиянием связи электрона в возбужденном атоме на процесс его столкновения с невозбужденным атомом и полагая транспортное сечение этих столкновений независимым от скорости.

"Коэффициент диффузии" $B(\varepsilon)$ вычисляется аналогично тому, как это делалось в (???) и равен

$$B(\varepsilon) = \frac{N}{3m} \langle v_{\text{ар}}^2 \rangle \langle \sigma_t p^3 \rangle$$

Здесь N - плотность атомов в газе, m - масса электрона, v_{ax} - относительная скорость возбужденного и невозбужденного атомов.

Скорости v_{ar} распределены по Максвеллу с приведенной массой ($M/2$, где M - масса атома) в качестве массы частицы; поэтому $\langle v_{ar}^2 \rangle = 6T/M$.

Далее, p в (1) есть импульс электрона в поле иона; усреднение $\sigma_t p^3$ производится по области фазового пространства электрона $\tau(\varepsilon)$, отвечающей заданному значению $|\varepsilon|$. При $\sigma_t = \text{const}$ находим

$$\langle \sigma_t p^3 \rangle = \frac{\sigma_t}{\tau(\varepsilon)} \int p^3 \delta \left(|\varepsilon| + \frac{p^2}{2m} - \frac{ze^2}{r} \right) d^3x d^3p = \frac{32\sqrt{2}}{3\pi} \sigma_t m |\varepsilon|^{3/2}$$

5.1.16 Другое про диффузию

интереснейшие модели диффузии

(другие - в теорию про диффузию в других главах)

Колоколов.з.? диффузии на прямой со случайно расположенными поглощающими центрами

На прямой случайно раскиданы ловушки. Вероятность найти ловушку на отрезке $[x, x + dx]$ есть $p \cdot dx$. Изначально на прямой были равномерно распределены броуновские частицы с плотностью n_0 . Найти $\langle n(t) \rangle$ при $t \gg 1$, где вреднее подразумевается в смысле среднего значения по всей прямой.

диффузионный алгоритм и моделирование

(нужно будет - напишу тут.)

алгоритм

C++ реализация вкратце обсудим этот код

броуновские деревья

(нужно будет - напишу тут.)

обзор

результаты модели

модель

программная реализация тут тот код, который уже есть

5.2 Гидродинамический предел

Посмотрим на гидродинамический предел кинетической теории (пока не уверен, что тут это писать нужно, но ладно, пока сойдет.)

5.2.1 гидродинамические уравнения: обзор

подготовимся по гидродинамике, посмотрим, к чему по итогу мы придем.

Закон сохранения количества вещества

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V}) = 0$$

Уравнение Навье-стокса: самая суть

$$\rho \frac{du_\alpha}{dt} + \frac{\partial P}{\partial x_\alpha} = \frac{\partial \sigma'_{\alpha\beta}}{\partial x_\beta} + nF_\alpha.$$

Здесь мы ввели плотность газа $\rho = mn$ и обозначение $d/dt = \partial/\partial t + (\mathbf{u} \cdot \nabla)$ для так называемой субстанциональной производной.

Фактически это уравнение является уравнением движения (уравнением Ньютона) в применении к элементу объема газа:

$$\rho du_\alpha/dt = f_\alpha = -(\nabla P)_\alpha + \partial \sigma'_{\alpha\beta}/\partial x_\beta + nF_\alpha$$

$$\frac{\partial(\rho V_\alpha)}{\partial t} + \frac{\partial \Pi_{\alpha\beta}}{\partial x_\beta} = 0$$

$$\frac{3}{2} \frac{dP}{dt} + \frac{5P}{2} \operatorname{div} \mathbf{u} = \sigma'_{\alpha\beta} \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} - \operatorname{div} \mathbf{q}'$$

Уравнение Эйлера для идеальной жидкости

имеет вид:

$$\frac{\partial v_i}{\partial t} = -v_k \frac{\partial v_i}{\partial x_k} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i}$$

(тут место вывода, мб позже допишу)

уравнение непрерывности

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{\partial(\rho v_k)}{\partial x_k}$$

Уравнение баланса импульса для идеальной жидкости

Уравнение баланса импульса для идеальной жидкости имеет вид:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho v_i = -\rho v_k \frac{\partial v_i}{\partial x_k} - \frac{\partial p}{\partial x_i} - v_i \frac{\partial(\rho v_k)}{\partial x_k} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_k} \rho v_i v_k$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho v_i = \rho \frac{\partial v_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho}{\partial t} v_i$$

5.2.2 гидродинамические уравнения: вывод

вывод

Рассмотрим вывод уравнений гидродинамики (фактически, вывод макроскопических законов сохранения) из кинетического уравнения Больцмана для однокомпонентного газа с функцией распределения $f(t, \mathbf{r}, \mathbf{p})$, нормированной по импульсам так, что $\int f(t, \mathbf{r}, \mathbf{p}) d^3p = n(t, \mathbf{r})$, где $n(t, \mathbf{r})$ - плотность числа частиц газа.

Классическое уравнение Больцмана для газа однотипных молекул с двойными столкновениями имеет общий вид

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{F} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = \int d^3p_1 v_{\text{отн}} d\sigma_{\mathbf{p}\mathbf{p}_1} (f' f'_1 - f f_1) \equiv I_{\text{ст}}(f)$$

где учтена внешняя сила \mathbf{F} , которая может действовать на частицу во внешнем поле (для упрощения примем, что она не зависит от скорости частиц.

Допустим, что это сила электрического поля $\mathbf{F} = -e\mathbf{E}$, действующая на заряженные частицы), и где в интеграле столкновений функции распределения имеют аргументы $f_1(t, \mathbf{r}, \mathbf{p}_1)$, $f'(t, \mathbf{r}, \mathbf{p}')$, $f'_1(t, \mathbf{r}, \mathbf{p}'_1)$, с учетом закона сохранения импульса в бинарных столкновениях

$$\mathbf{p} + \mathbf{p}_1 = \mathbf{p}' + \mathbf{p}'_1.$$

Умножив правую и левую части этого уравнения на некоторую функцию импульса $\varphi(\mathbf{p})$ и проинтегрировав по всем импульсам \mathbf{p} , получим, что

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \int d^3p f(t, \mathbf{r}, \mathbf{p}) \varphi(\mathbf{p}) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \int d^3p \mathbf{v} f(t, \mathbf{r}, \mathbf{p}) \varphi(\mathbf{p}) + \mathbf{F} \cdot \int d^3p \frac{\partial f(t, \mathbf{r}, \mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} \varphi(\mathbf{p}) = \\ &= \frac{\partial}{\partial t} \int d^3p f(t, \mathbf{r}, \mathbf{p}) \varphi(\mathbf{p}) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \int d^3p \mathbf{v} f(t, \mathbf{r}, \mathbf{p}) \varphi(\mathbf{p}) - \mathbf{F} \cdot \int d^3p f(t, \mathbf{r}, \mathbf{p}) \frac{\partial \varphi(\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} = \\ &= \iint d^3p d^3p_1 v_{\text{отн}} d\sigma_{\mathbf{p}\mathbf{p}_1} \varphi(\mathbf{p}) (f' f'_1 - f f_1) \equiv \\ &\equiv \frac{1}{4} \iint d^3p d^3p_1 v_{\text{отн}} d\sigma_{\mathbf{p}\mathbf{p}_1} \{ \varphi(\mathbf{p}) + \varphi(\mathbf{p}_1) - \varphi(\mathbf{p}') - \varphi(\mathbf{p}'_1) \} (f' f'_1 - f f_1) \end{aligned}$$

Выше мы неявно проделали процедуру симметризации правой части уравнения, и учли, что $d^3p' d^3p'_1 = d^3p d^3p_1$, $d\sigma_{\mathbf{p}'\mathbf{p}'_1} = d\sigma_{\mathbf{p}\mathbf{p}_1}$, и что модуль относительной скорости $v_{\text{отн}}$ также является инвариантным при упругих бинарных столкновениях.

Видно, что правая часть обращается в ноль, если выполняется условие "сохранения"

$$\varphi(\mathbf{p}) + \varphi(\mathbf{p}_1) = \varphi(\mathbf{p}') + \varphi(\mathbf{p}'_1).$$

Три гидродинамических уравнения (макроскопических закона сохранения) у нас получатся, если мы выберем $\varphi(\mathbf{p}) = 1$, $\varphi(\mathbf{p}) = p_\alpha$ и $\varphi(\mathbf{p}) = p^2/(2m)$, соответствующие законам сохранения числа частиц, импульса и энергии в бинарных упругих столкновениях.

Первое гидродинамическое уравнение

Первый закон сохранения мы получим, если выберем

$$\varphi(\mathbf{p}) = 1$$

или в более общем случае, $\varphi(\mathbf{p}) = \text{const}$.

Тогда правая часть обращается в ноль, и из условия равенства нулю левой части мы сразу получим уравнение

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial(n\mathbf{u})}{\partial \mathbf{r}} = 0, \quad \text{или} \quad \frac{\partial n}{\partial t} + \text{div}(n\mathbf{u}) = 0,$$

где $n(t, \mathbf{r}) = \int d^3p f(t, \mathbf{r}, \mathbf{p})$ - локальная плотность частиц газа, а

$$\mathbf{u}(t, \mathbf{r}) = \frac{\int d^3p \mathbf{v} f(t, \mathbf{r}, \mathbf{p})}{\int d^3p f(t, \mathbf{r}, \mathbf{p})} \equiv \frac{1}{n} \int d^3p \mathbf{v} f(t, \mathbf{r}, \mathbf{p}) \equiv \langle \mathbf{v} \rangle$$

есть средняя макроскопическая скорость молекул газа в точке \mathbf{r} в момент времени t .

Это есть уравнение непрерывности, являющееся следствием закона сохранения числа частиц газа в бинарных столкновениях

Второе уравнение гидродинамики как закон сохранения импульса

Второе уравнение мы получим, если выберем

$$\varphi(\mathbf{p}) = p_\alpha \equiv m v_\alpha,$$

то есть в виде отдельной компоненты импульса частицы (здесь m - масса молекулы газа).

В силу закона сохранения импульса в бинарных столкновениях правая часть опять обращается в тождественный ноль.

В итоге наше уравнение есть уравнение на левую часть, и с учетом правила усреднения $\langle A \rangle = \frac{\int A f d^3p}{\int f d^3p} \equiv \frac{1}{n} \int A f d^3p$, домножим на понятно что, получим:

$$\frac{\partial(m n u_\alpha)}{\partial t} + \frac{\partial \Pi_{\alpha\beta}}{\partial x_\beta} = n F_\alpha.$$

В этом уравнении симметричный тензор $\Pi_{\alpha\beta}$ есть тензор плотности потока импульса, он равен:

$$\begin{aligned} \Pi_{\alpha\beta} &= \int d^3p m v_\alpha v_\beta f(t, \mathbf{r}, \mathbf{p}) \equiv n m \langle v_\alpha v_\beta \rangle \equiv \\ &\equiv m n u_\alpha u_\beta + m n \langle (v_\alpha - u_\alpha)(v_\beta - u_\beta) \rangle = \\ &= m n u_\alpha u_\beta + m n \left\langle (v_\alpha - u_\alpha)(v_\beta - u_\beta) - \frac{\delta_{\alpha\beta}}{3} (\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 \right\rangle + \frac{\delta_{\alpha\beta}}{3} m n \langle (\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 \rangle = \\ &= m n u_\alpha u_\beta + P \delta_{\alpha\beta} - \sigma'_{\alpha\beta} \end{aligned}$$

Здесь мы определили давление газа как $P(t, \mathbf{r}) = m n \langle (\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 \rangle / 3$, и диссипативную часть тензора плотности потока импульса $\sigma'_{\alpha\beta}$, которая называется тензором вязких напряжений (и который имеет в нашем случае однокомпонентного газа нулевой след):

$$\sigma'_{\alpha\beta} = -m n \left\langle (v_\alpha - u_\alpha)(v_\beta - u_\beta) - \frac{\delta_{\alpha\beta}}{3} (\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 \right\rangle, \quad \sigma'_{\alpha\alpha} = 0$$

С учётом этого наше второе гидродинамическое уравнение запишется в виде

$$\frac{\partial(m n u_\alpha)}{\partial t} + \frac{\partial P}{\partial x_\alpha} + \frac{\partial(m n u_\alpha u_\beta)}{\partial x_\beta} = \frac{\partial \sigma'_{\alpha\beta}}{\partial x_\beta} + n F_\alpha$$

или, если переписать его левую часть ещё и с учетом уравнения непрерывности как

$$m n \frac{\partial u_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial P}{\partial x_\alpha} + m n u_\beta \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} + m u_\alpha \underbrace{\left(\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial(n u_\beta)}{\partial x_\beta} \right)}_{=0} \equiv m n \left(\frac{\partial u_\alpha}{\partial t} + u_\beta \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} \right) + \frac{\partial P}{\partial x_\alpha},$$

то окончательно получим это уравнение в виде

$$mn \left(\frac{\partial u_\alpha}{\partial t} + u_\beta \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} \right) + \frac{\partial P}{\partial x_\alpha} = \frac{\partial \sigma'_{\alpha\beta}}{\partial x_\beta} + nF_\alpha,$$

или

$$\rho \frac{du_\alpha}{dt} + \frac{\partial P}{\partial x_\alpha} = \frac{\partial \sigma'_{\alpha\beta}}{\partial x_\beta} + nF_\alpha.$$

Здесь мы ввели плотность газа $\rho = mn$ и обозначение $d/dt = \partial/\partial t + (\mathbf{u} \cdot \nabla)$ для так называемой субстанциональной производной.

Фактически это уравнение является уравнением движения (уравнением Ньютона) в применении к элементу объема газа:

$$\rho du_\alpha/dt = f_\alpha = -(\nabla P)_\alpha + \partial \sigma'_{\alpha\beta}/\partial x_\beta + nF_\alpha$$

Третье уравнение гидродинамики как закон сохранения энергии

Последнее, третье гидродинамическое уравнение мы получим при выборе

$$\varphi(\mathbf{p}) = \mathbf{p}^2/(2m) \equiv mv^2/2,$$

то есть в виде кинетической энергии молекулы газа.

В силу закона сохранения кинетической энергии в упругих бинарных столкновениях правая часть проинтегрированного по импульсам кинетического уравнения снова обращается в ноль.

Из условия обращения левой части в ноль мы получим следующее макроскопическое уравнение для сохранения энергии:

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \text{div } \mathbf{q} = n(\mathbf{F} \cdot \mathbf{u})$$

где $\varepsilon = n \langle mv^2/2 \rangle$ - плотность энергии газа и $\mathbf{q} = n \langle \mathbf{p}mv^2/2 \rangle$ - плотность потока энергии.

Действительно, после явного выделения средней скорости и потока газа, имеем:

$$\varepsilon = \frac{mn}{2} (\langle (\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 \rangle + \mathbf{u}^2) = \frac{3P}{2} + \frac{mn\mathbf{u}^2}{2},$$

поэтому

$$\mathbf{q} = \frac{mn}{2} \langle \{(\mathbf{v} - \mathbf{u}) + \mathbf{u}\} \{(\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 + 2\mathbf{u} \cdot (\mathbf{v} - \mathbf{u}) + \mathbf{u}^2\} \rangle$$

или в компонентах

$$\begin{aligned} q_\alpha &= \frac{mn}{2} (\langle (v - u)_\alpha (\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 \rangle + u_\alpha \langle (\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 \rangle + 2u_\beta \langle (v - u)_\alpha (v - u)_\beta \rangle + u_\alpha u^2) = \\ &= \frac{mn}{2} (\langle (v - u)_\alpha (\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 \rangle + u_\alpha u^2) + u_\beta \cdot mn \underbrace{\left\langle (v - u)_\alpha (v - u)_\beta - \frac{\delta_{\alpha\beta}}{3} (\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 \right\rangle}_{-\sigma'_{\alpha\beta}} + \\ &\quad + \frac{mn}{2} \left(\frac{5u_\alpha \langle (\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 \rangle}{3} \right) = u_\alpha \left(\frac{5P}{2} + \frac{mn\mathbf{u}^2}{2} \right) + q'_\alpha - \sigma'_{\alpha\beta} u_\beta \quad (5.2) \end{aligned}$$

где диссипативная часть потока тепловой энергии (поток тепла) определяется как

$$q'_\alpha = \frac{mn}{2} \langle (v - u)_\alpha (\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 \rangle.$$

Тогда третье гидродинамическое уравнение принимает вид

$$\frac{3}{2} \frac{\partial P}{\partial t} + \frac{1}{2} \frac{\partial (mnu^2)}{\partial t} + \operatorname{div} \left\{ \mathbf{u} \left(\frac{5P}{2} + \frac{mnu^2}{2} \right) \right\} + \operatorname{div} \mathbf{q}' = \frac{\partial (\sigma'_{\alpha\beta} u_\beta)}{\partial x_\alpha} + n(\mathbf{F} \cdot \mathbf{u}).$$

Если его переписать в развернутом виде и учесть первые два уравнения, то есть как

$$\begin{aligned} \frac{3}{2} \frac{\partial P}{\partial t} + \frac{u^2}{2} \frac{\partial (mn)}{\partial t} + \underbrace{mnu_\alpha \frac{\partial u_\alpha}{\partial t}}_{5/2 \rightarrow 3/2} + \frac{5P}{2} \operatorname{div} \mathbf{u} + \underbrace{\frac{5u_\alpha}{2} \frac{\partial P}{\partial x_\alpha}}_{5/2 \rightarrow 3/2} + \frac{mnu^2}{2} \operatorname{div} \mathbf{u} + \\ + u_\alpha \left(\frac{u^2}{2} \frac{\partial (mn)}{\partial x_\alpha} + \underbrace{mnu_\beta \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha}} \right) + \operatorname{div} \mathbf{q}' = \underbrace{u_\alpha \frac{\partial \sigma'_{\alpha\beta}}{\partial x_\beta}} + \sigma'_{\alpha\beta} \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} + \underbrace{nF_\alpha u_\alpha}, \quad (5.3) \end{aligned}$$

то это уравнение можно представить в более компактном виде:

$$\frac{3}{2} \frac{\partial P}{\partial t} + \frac{5P}{2} \operatorname{div} \mathbf{u} + \frac{3u_\alpha}{2} \frac{\partial P}{\partial x_\alpha} = \sigma'_{\alpha\beta} \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} - \operatorname{div} \mathbf{q}'$$

или

$$\frac{3}{2} \frac{dP}{dt} + \frac{5P}{2} \operatorname{div} \mathbf{u} = \sigma'_{\alpha\beta} \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} - \operatorname{div} \mathbf{q}'$$

добавление температуры

Теперь, рассматривая классический газ, введем локальную температуру $T(t, \mathbf{r})$ газа согласно определению $3T/2 = \langle m(\mathbf{v} - \mathbf{u})^2/2 \rangle$, обобщающему понятие температуры газа в равновесном случае.

Из этого определения следует, что ранее введенное давление газа $P(t, \mathbf{r}) = mn \langle (\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 \rangle / 3$ связано с температурой как $P = nT$, и это есть точное соотношение в рамках нашей модели.

Таким образом, в приближении, соответствующем малому газовому параметру $na^3 \ll 1$ и учету только парных столкновений, локально выполняется уравнение состояния идеального классического больцмановского газа в виде $P(t, \mathbf{r}) = n(t, \mathbf{r})T(t, \mathbf{r})$.

Преобразуем третье гидродинамическое уравнение, выражающее закон сохранения энергии, с учетом равенства $P = nT$.

Его левая часть после подстановки $P = nT$ преобразуется к виду

$$\frac{3}{2} \frac{d(nT)}{dt} + \frac{5nT}{2} \operatorname{div} \mathbf{u} = \frac{3n}{2} \frac{dT}{dt} + \underbrace{3T}_2 2 \frac{dn}{dt} + \underbrace{3T}_2 2n \operatorname{div} \mathbf{u} + nT \operatorname{div} \mathbf{u}.$$

С учетом уравнения непрерывности $\partial n / \partial t + \operatorname{div}(n\mathbf{u}) \equiv \partial n / \partial t + (\mathbf{u} \cdot \nabla)n + n \operatorname{div} \mathbf{u} \equiv \equiv dn/dt + n \operatorname{div} \mathbf{u} = 0$, оно приобретает вид уравнения на температуру газа

$$\frac{3n}{2} \frac{dT}{dt} + nT \operatorname{div} \mathbf{u} = \sigma'_{\alpha\beta} \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} - \operatorname{div} \mathbf{q}',$$

что эквивалентно уравнению

$$\frac{3n}{2} \left(\frac{\partial T}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla)T + \frac{2}{3}T \operatorname{div} \mathbf{u} \right) = \sigma'_{\alpha\beta} \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} - \operatorname{div} \mathbf{q}'.$$

обсуждение границ применимости

Полученные три макроскопических уравнения (закона сохранения) для величин $n(t, \mathbf{r})$, $\mathbf{u}(t, \mathbf{r})$ и $T(t, \mathbf{r})$ бессодержательны до тех пор, пока не установлена связь между диссипативными потоками $\sigma'_{\alpha\beta}$ и \mathbf{q}' , с одной стороны, и этими средними локальными характеристиками газа.

Для того, чтобы система уравнений переноса (гидрогазодинамических уравнений) стала замкнутой, следует решить кинетическое уравнение

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{F} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = I_{\text{coll}}(f) \approx -\frac{f - f_0}{\tau},$$

где мы записали интеграл столкновений в τ -приближении, и с помощью полученного решения определить вид неизвестных потоков.

Для состояний, слабо отличающихся от равновесного, когда градиенты макроскопических величин малы, решение позволяет найти метод Энского-Чепмена.

Мы будем считать, что доминирующей в кинетическом уравнении является правая, столкновительная часть.

Это значит, что столкновения частиц весьма часты и поэтому можно думать, что благодаря частым столкновениям в газе устанавливается распределение, весьма близкое к равновесному максвелловскому распределению.

Оно и должно иметь максвелловский вид (занулять точный интеграл столкновений):

$$f_0(t, \mathbf{p}, \mathbf{r}) = \frac{n(t, \mathbf{r})}{(2\pi m T(t, \mathbf{r}))^{3/2}} \exp\left(-\frac{(\mathbf{p} - m\mathbf{u}(t, \mathbf{r}))^2}{2mT(t, \mathbf{r})}\right) \equiv \frac{n(t, \mathbf{r})}{(2\pi m T(t, \mathbf{r}))^{3/2}} e^{-\frac{m(\mathbf{v} - \mathbf{u}(t, \mathbf{r}))^2}{2T(t, \mathbf{r})}},$$

но параметры $n(t, \mathbf{r})$, $T(t, \mathbf{r})$ и $\mathbf{u}(t, \mathbf{r})$, входящие в него, должны рассматриваться как функции текущего времени t и локальной координаты \mathbf{r} .

Им мы должны придать конкретный смысл: локальной средней плотности числа частиц, локальной средней скорости течения газа и локальной температуры.

Близость этого распределения к равновесному должна обеспечиваться малостью пространственных и временных производных этих макроскопических величин, а само это распределение нулевого приближения называется локально-равновесным распределением.

Физически понятно, что локально-равновесное распределение устанавливается за время порядка τ , то есть за среднее время между двумя последующими столкновениями, в то время как дальнейшая релаксация к полному равновесию в этом, гидродинамическом режиме, происходит за времена $t \gg \tau$.

Критерий применимости гидродинамического режима понятен:

$$\tau/t_{\text{макро}} \ll 1,$$

где $t_{\text{макро}}$ - характерные макроскопические времена в рассматриваемой задаче.

Этот критерий можно переписать через отношение длин

$$\ell/L \ll 1,$$

где $\ell \sim \tau v \sim 1/(n\sigma)$ - средняя дина свободного пробега молекулы между двумя её последовательными столкновениями, а $L \sim vt_{\text{макро}}$ - характерный макроскопический размер системы (или характерная макроскопическая длина в нашей конкретной задаче, например, длина звуковой Волны в задаче о поглощении звука).

Последний введенный параметр называется числом Кнудсена и обозначается как $\text{Kn} = \ell/L$.

Таким образом, рассматриваемый сейчас нами режим, называемый гидродинамическим, соответствует малым числам Кнудсена, $\text{Kn} \ll 1$.

Обратный же случай, когда $\text{Kn} \gg 1$, называется кнудсеновским, или свободно-молекулярным режимом.

параметры при локально-равновесном распределении

Что же касается диссипативных потоков, именно,

$$\sigma'_{\alpha\beta} = -mn \left\langle (v_\alpha - u_\alpha)(v_\beta - u_\beta) - \frac{\delta_{\alpha\beta}}{3}(\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 \right\rangle$$

и

$$q'_\alpha = \frac{mn}{2} \langle (v - u)_\alpha (\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 \rangle,$$

то в локально-равновесном распределении вследствие его изотропии они обращаются в тождественный ноль,

$$\sigma'_{\alpha\beta}(\text{л.р.}) = -mn \left\langle (v_\alpha - u_\alpha)(v_\beta - u_\beta) - \frac{\delta_{\alpha\beta}}{3}(\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 \right\rangle_0 \equiv 0,$$

$$q'_\alpha(\text{л.р.}) = \frac{mn}{2} \langle (v - u)_\alpha (\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 \rangle_0 \equiv 0,$$

и для их определения в гидродинамическом приближении необходимо учесть поправку к локально-равновесному распределению.

Решение кинетического уравнения в τ -приближении методом Чепмана-Энскога

Теперь становится понятной схема получения замкнутых гидрогазодинамических уравнений в методе Энскога-Чепмена.

Решение нулевого приближения нам известно, и надо найти поправку δf что бы, используя её, найти диссипативные потоки $\sigma'_{\alpha\beta}$ и q' .

В гидродинамическом режиме и в τ -приближении δf находится элементарно:

$$\delta f = f - f_0 = -\tau \left(\frac{\partial f_0}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{F} \cdot \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{p}} \right).$$

Рассмотрим в этой формуле справа выражение в скобках, куда нужно подставить локально-равновесную функцию распределения

$$f_0(t, \mathbf{r}, \mathbf{v}) = \left\{ n(t, \mathbf{r}) / [2\pi m T(t, \mathbf{r})]^{3/2} \right\} \times \exp \left(-\frac{m[\mathbf{v} - \mathbf{u}(t, \mathbf{r})]^2}{2T(t, \mathbf{r})} \right).$$

В результате получим, что

$$\begin{aligned} -\frac{\delta f}{\tau} &= \frac{\partial f_0}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{F} \cdot \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{p}} = \\ &= \frac{f_0}{n} \left(\frac{\partial n}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial n}{\partial \mathbf{r}} \right) - \frac{3f_0}{2T} \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial T}{\partial \mathbf{r}} \right) + \\ &+ \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial T}{\partial \mathbf{r}} \right) \cdot \frac{m(\mathbf{v} - \mathbf{u})^2}{2T} \cdot \frac{f_0}{T} + f_0 \cdot \frac{m(\mathbf{v} - \mathbf{u})}{T} \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right) - (\mathbf{F} \cdot (\mathbf{v} - \mathbf{u})) \frac{f_0}{T} \quad (5.4) \end{aligned}$$

Теперь заменим все производные по времени с помощью полученных ранее гидрогазодинамических уравнений, рассматривая их в локально-равновесном, бездиссипативном приближении, и со сделанной подстановкой $P = nT$.

Поскольку в локально-равновесном приближении диссипативные потоки зануляются, то в этом, нулевом приближении,

$$\partial n / \partial t + \operatorname{div}(n \mathbf{u}) = 0,$$

$$\rho d\mathbf{u}/dt + \nabla P \equiv \rho \partial \mathbf{u} / \partial t + \rho(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \nabla P = n \mathbf{F},$$

Получаем уравнение бездиссипативной гидродинамики идеальной жидкости или газа:

$$dT/dt + (2/3)T \operatorname{div} \mathbf{u} \equiv \partial T / \partial t + (\mathbf{u} \cdot \nabla) T + (2/3)T \operatorname{div} \mathbf{u} = 0$$

Тогда получим, уже для поправки к функции распределения, что

$$\begin{aligned} -\frac{\delta f}{\tau} \approx \frac{f_0}{n} \left(-\operatorname{div}(n \mathbf{u}) + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial n}{\partial \mathbf{r}} \right) + \frac{f_0}{T} \left(-\frac{3}{2} + \frac{m(\mathbf{v} - \mathbf{u})^2}{2T} \right) \cdot \left(-\frac{2}{3}T \operatorname{div} \mathbf{u} + (\mathbf{v} - \mathbf{u}) \cdot \frac{\partial T}{\partial \mathbf{r}} \right) + \\ + \frac{f_0}{T} m(\mathbf{v} - \mathbf{u}) \cdot \left(-\frac{\nabla(nT)}{mn} + ((\mathbf{v} - \mathbf{u}) \cdot \nabla) \mathbf{u} + \frac{\mathbf{F}}{m} \right) - (\mathbf{F} \cdot (\mathbf{v} - \mathbf{u})) \frac{f_0}{T} \quad (5.5) \end{aligned}$$

Легко увидеть, что все члены, содержащие ∇n и силу \mathbf{F} , сокращаются.

В результате:

$$\begin{aligned} -\frac{\delta f}{\tau} = \frac{f_0}{T} \left\{ ((\mathbf{v} - \mathbf{u}) \cdot \nabla T) \left(\frac{m(\mathbf{v} - \mathbf{u})^2}{2T} - \frac{5}{2} \right) - \frac{m(\mathbf{v} - \mathbf{u})^2}{3} \operatorname{div} \mathbf{u} + m(\mathbf{v} - \mathbf{u})((\mathbf{v} - \mathbf{u}) \cdot \nabla) \mathbf{u} \right\} \equiv \\ \equiv \frac{f_0}{T} \left\{ ((\mathbf{v} - \mathbf{u}) \cdot \nabla T) \left(\frac{m(\mathbf{v} - \mathbf{u})^2}{2T} - \frac{5}{2} \right) + m(v - u)_\alpha (v - u)_\beta \underbrace{\left[\frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} \right) - \frac{\delta_{\alpha\beta}}{3} \operatorname{div} \mathbf{u} \right]}_{\equiv \frac{1}{2} U_{\alpha\beta}} \right\}. \end{aligned}$$

Используя обозначения $\mathbf{v}' = \mathbf{v} - \mathbf{u}$ и $U_{\alpha\beta} = \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} - \frac{2}{3} \delta_{\alpha\beta} \operatorname{div} \mathbf{u}$ (причем $U_{\alpha\alpha} = 0$), представим окончательное выражение для поправки к функции распределения δf в компактном виде

$$\delta f = -\tau \frac{f_0}{T} \left\{ (\mathbf{v}' \cdot \nabla T) \left(\frac{mv'^2}{2T} - \frac{5}{2} \right) + \frac{m}{2} v'_\alpha v'_\beta U_{\alpha\beta} \right\}$$

Диссипативные потоки и теплопроводность

Вычислим диссипативные потоки с учетом полученной поправки к локально равновесному распределению.

Вычисление потока тепловой энергии $\mathbf{q}' = n \langle m \mathbf{v}' v'^2 / 2 \rangle$ дает следующее (сразу учтем очевидный факт, что ненулевой вклад в \mathbf{q}' возникает только от члена с ∇T в δf):

$$\begin{aligned} q'_\alpha &= \int d^3 p \delta f v'_\alpha \frac{mv'^2}{2} = \\ &= - \int d^3 p \frac{f_0 \tau}{T} (v') \underbrace{v'_\alpha v'_\beta}_{\rightarrow \frac{1}{3} v'^2 \delta_{\alpha\beta}} \nabla_\beta T \left(\frac{mv'^2}{2T} - \frac{5}{2} \right) \frac{mv'^2}{2} = \\ &= - \nabla_\alpha T \int d^3 p \frac{f_0 \tau m}{6T} \left(\frac{mv'^6}{2T} - \frac{5v'^4}{2} \right) = \\ &= - \nabla_\alpha T \frac{mn}{6T} \left\langle \tau \left(\frac{mv'^6}{2T} - \frac{5v'^4}{2} \right) \right\rangle_0 = \\ &= - \kappa \nabla_\alpha T, \end{aligned}$$

где нижний индекс '0' означает усреднение по локально-равновесному распределению, а коэффициент κ , называемый коэффициентом теплопроводности, есть

$$\kappa = \frac{nm}{6T} \left\langle \tau(v') \left(\frac{mv'^6}{2T} - \frac{5v'^4}{2} \right) \right\rangle_0 \underset{\tau = \text{const}}{=} \frac{nm\tau}{6T} \left[\frac{m}{2T} \cdot 7 \cdot 15 \left(\frac{T}{m} \right)^3 - \frac{5}{2} \cdot 15 \left(\frac{T}{m} \right)^2 \right] = \frac{5n\tau T}{2m}.$$

Здесь мы использовали тот факт, что для целых положительных чисел n

$$\langle v'^{2n} \rangle_0 = \frac{(T/m)^n}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3x x^{2n} e^{-x^2/2} = \frac{(T/m)^n 2\pi}{(2\pi)^{3/2}} \int_0^{+\infty} d(x^2) x^{2n+1} e^{-x^2/2} = (2n+1)!! \left(\frac{T}{m} \right)^n.$$

Таким образом мы получили, что $\mathbf{q}' = \mathbf{J} - \kappa \nabla T$, причём с коэффициентом теплопроводности $\kappa = 5n\tau T/(2m)$, вычисленном в τ -приближении с постоянным τ .

По порядку величины

$$\kappa \sim (nT/m)\tau(v_T) \sim nv_T^2/(nv_T\sigma(v_T)) \sim v_T/\sigma(v_T),$$

где $v_T \sim \sqrt{T/m}$.

Диссипативные потоки и вязкость

Теперь вычислим тензор вязких напряжений $\sigma'_{\alpha\beta} = -mn \langle v'_\alpha v'_\beta - \delta_{\alpha\beta} v'^2/3 \rangle$.

Очевидно, что теперь член с ∇T в δf не дает вклада в диссипативный тензор вязких напряжений из-за его нечетности как функции $\mathbf{v}' = \mathbf{v} - \mathbf{u}$.

Тогда сразу можно записать, что

$$\begin{aligned} \sigma'_{\alpha\beta} &= -m \int d^3p \delta f \left\{ v'_\alpha v'_\beta - \frac{\delta_{\alpha\beta}}{3} \mathbf{v}'^2 \right\} = \\ &= \frac{m^2}{2T} \int d^3p \tau(v') f_0 v'_\mu v'_\nu U_{\mu\nu} \left\{ v'_\alpha v'_\beta - \frac{\delta_{\alpha\beta}}{3} v'^2 \right\} \equiv \\ &\equiv \frac{nm^2 U_{\mu\nu}}{2T} \left\langle \tau v'_\mu v'_\nu \left\{ v'_\alpha v'_\beta - \frac{\delta_{\alpha\beta}}{3} v'^2 \right\} \right\rangle_0 \end{aligned}$$

Поскольку $\langle v'_\mu v'_\nu \rangle_0 = \frac{\langle v'^2 \rangle_0}{3} \delta_{\mu\nu}$, $\langle v'_\alpha v'_\beta v'_\mu v'_\nu \rangle_0 = \frac{\langle v'^4 \rangle_0}{15} (\delta_{\alpha\beta} \delta_{\mu\nu} + \delta_{\alpha\mu} \delta_{\beta\nu} + \delta_{\alpha\nu} \delta_{\beta\mu})$, и $U_{\alpha\alpha} = 0$, то легко видеть, что только четверное среднее дает вклад, и

$$\begin{aligned} \sigma'_{\alpha\beta} &= \frac{nm^2 U_{\mu\nu}}{2T} \frac{\langle \tau v'^4 \rangle_0}{15} (\delta_{\alpha\beta} \delta_{\mu\nu} + \delta_{\alpha\mu} \delta_{\beta\nu} + \delta_{\alpha\nu} \delta_{\beta\mu}) = \\ &= \frac{nm^2 \langle \tau v'^4 \rangle_0}{2T} \cdot 2U_{\alpha\beta} \equiv \\ &\equiv \eta \left(\frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} - \frac{2}{3} \delta_{\alpha\beta} \text{div } \mathbf{u} \right), \end{aligned}$$

где

$$\eta = \frac{nm^2 \langle \tau v'^4 \rangle_0}{T} \underset{\tau = \text{const}}{=} \frac{nm^2 \tau \langle v'^4 \rangle_0}{T} = n\tau T$$

Здесь мы учли, что $\langle v'^4 \rangle_0 = 15(T/m)^2$.

Отметим соотношение $\eta = m\kappa/c_p$, где $c_p = 5/2$, которое у нас получилось между коэффициентами η и κ .

Полученное выражение для $\sigma'_{\alpha\beta}$ находится в полном соответствии с общим выражением для тензора вязких напряжений в феноменологической гидродинамике, которое имеет вид

$$\sigma'_{\alpha\beta} = \eta \left(\frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} - \frac{2}{3} \delta_{\alpha\beta} \text{div } \mathbf{u} \right) + \zeta \delta_{\alpha\beta} \text{div } \mathbf{u}$$

где η - коэффициент сдвиговой вязкости и ζ - коэффициент второй (объемной) вязкости.

Одновременно мы нашли, что коэффициент сдвиговой вязкости одноатомного газа в τ -приближении с постоянным τ есть $\eta = n\tau T$, а коэффициент второй вязкости тождественно равен нулю в наших приближениях: $\zeta = 0$ (как это и должно быть для нерелятивистского одноатомного газа в нулевом приближении по газовому параметру только с учетом парных столкновений).

Для непостоянного $\tau(v')$ будем иметь по порядку величины

$$\eta \sim nT\tau(v_T) \sim nmv_T^2 / (nv_T\sigma(v_T)) \sim mv_T / \sigma(v_T),$$

где $v_T \sim \sqrt{T/m}$.

Можно заметить, что в нашем случае однокомпонентного газа и во всех наших приближениях вторая вязкость и была обязана оказаться равной нулю из-за строгого условия обращения в нуль следа тензора вязких напряжений $\sigma'_{\alpha\beta} [\sigma'_{\alpha\alpha} = 0]$.

Для того, чтобы получить её ненулевое значение, надо выйти за рамки наших приближений.

Но из наших результатов следует, что для газов и реально должно всегда быть $\zeta \ll \eta$. Однако для жидкостей, где газовый параметр не мал, может оказаться, что $\zeta \sim \eta$.

5.2.3 Уравнения Навье-Стокса

уравнение Навье-Стокса: различные формы и обзор

$$\rho \left[\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \nabla) \mathbf{v} \right] = -\text{grad } p + \eta \Delta \mathbf{v} + \left(\zeta + \frac{\eta}{3} \right) \text{grad div } \mathbf{v}$$

Несжимаемая жидкость

$$\rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \nabla) \mathbf{v} = -\frac{1}{\rho} \text{grad } p + \frac{\eta}{\rho} \Delta \mathbf{v}$$

Гидродинамическое уравнение Навье-Стокса

Рассмотрим наше второе гидродинамическое уравнение - уравнение движения элемента объема газа/жидкости

$$mn \left(\frac{\partial u_\alpha}{\partial t} + u_\beta \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} \right) + \frac{\partial P}{\partial x_\alpha} = \frac{\partial \sigma'_{\alpha\beta}}{\partial x_\beta} + nF_\alpha,$$

или

$$\rho \frac{du_\alpha}{dt} = -\frac{\partial P}{\partial x_\alpha} + \frac{\partial \sigma'_{\alpha\beta}}{\partial x_\beta} + nF_\alpha,$$

где $\rho = mn$, и было использовано определение субстанциональной производной $d/dt = \partial/\partial t + (\mathbf{u} \cdot \nabla)$.

Используя феноменологическое выражение для тензора вязких напряжений, для постоянных (не зависящих от координат) η и ζ получим, что

$$\frac{\partial \sigma'_{\alpha\beta}}{\partial x_\beta} = \eta \left(\Delta u_\alpha + \nabla_\alpha \text{div } \mathbf{u} - \frac{2}{3} \nabla_\alpha \text{div } \mathbf{u} \right) + \zeta \nabla_\alpha \text{div } \mathbf{u}$$

и гидродинамическое уравнение движения в этом случае принимает вид

$$\rho \frac{d\mathbf{u}}{dt} = -\nabla P + \eta \Delta \mathbf{u} + \left(\zeta + \frac{\eta}{3} \right) \text{grad div } \mathbf{u} + n\mathbf{F}$$

Это и есть уравнение Навье Стокса феноменологической гидродинамики (для газа $P = nT$, но для жидкостей надо использовать их собственное уравнение состояния).

Проводимость Друде и наличие замороженного беспорядка

При наличии "замороженного беспорядка" к уравнению справа добавляется еще один член, $-\rho \mathbf{u}/\tau$.

Действительно, ведь в этом случае кинетическое уравнение имеет вид

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{F} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = \frac{(\mathbb{P} - 1)f}{\tau_p},$$

где $\mathbb{P} = \int \frac{d\hat{\mathbf{v}}}{4\pi}$ - оператор усреднения по направлениям скоростей, а τ_p - время релаксации импульса.

После нашего усреднения уравнения Больцмана (с домножением на импульс) справа остается именно такой ненулевой вклад, так что имеем уравнение

$$\rho \frac{d\mathbf{u}}{dt} = -\nabla P + \eta \Delta \mathbf{u} + \left(\zeta + \frac{\eta}{3} \right) \text{grad div } \mathbf{u} + n\mathbf{F} - \rho \mathbf{u}/\tau_p.$$

В стационарном режиме

$$n\mathbf{F} - \rho \mathbf{u}/\tau_p = 0$$

поэтому

$$\mathbf{u} = n\tau_p \mathbf{F}/\rho$$

так что

$$\mathbf{j} = -ne\mathbf{u} = -ne \cdot n\tau_p(-e\mathbf{E})/(nm) = \frac{ne^2\tau_p}{m}\mathbf{E} \equiv \sigma_D \mathbf{E},$$

где σ_D - проводимость Друде.

вывод с учетом вязкости

просто берем

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho v_i = -\frac{\partial \Pi_{ik}}{\partial x_k}$$

и получаем нужное уравнение.

да?

5.2.4 преобразования

задача 8 по сути

выражение для потока импульса и найти тензор плотности потока импульса

Получить из кинетического уравнения Больцмана выражение для потока импульса и найти тензор плотности потока импульса.

учет упругих столкновений на замороженном беспорядке

Как изменится уравнение для потока импульса, если в τ -приближении учесть упругие столкновения на замороженном беспорядке, как это делалось для электронного газа?

вывод проводимость Друде

Получить в гидродинамическом подходе проводимость Друде для металла.

часть тензора плотности потока импульса, отвечающая за вязкость

б) Определить, какая часть тензора плотности потока импульса, который был найден в (а) и выражен через функцию распределения, отвечает за вязкость.

определение коэффициента вязкости и температуропроводности одноатомного газа

Найти коэффициент вязкости и температуропроводности одноатомного газа в τ приближении.

сравнение коэффициентов температуропроводности и кинематической вязкости в τ приближении

Сравнить коэффициенты температуропроводности и кинематической вязкости в τ приближении.

вывод уравнения Навье-Стокса

Вывести уравнение Навье -Стокса, учесть слагаемые, отвечающие за проводимость Друде.

5.2.5 теплопроводность газа

(теория полностью опирается на предыдущую, так что сперва ее пройду, потом в эту вернусь!)

вкратце об элементарной теории теплопроводности

вроде вопрос про нее же закрыт, нет?

формула

$$\kappa \sim cNl\bar{v}$$

где c - отнесенная к одной молекуле теплоемкость газа. Это известная элементарная газокинетическая формула.

теория

Для вычисления коэффициента теплопроводности газа надо решать кинетическое уравнение с градиентом температуры.

Сохранив в (6,19) лишь первый член в левой стороне, имеем

$$\frac{\varepsilon(\Gamma) - c_p T}{T} \mathbf{v} \nabla T = I(\chi)$$

Решение этого уравнения надо искать в виде

$$\chi = \mathbf{g} \nabla T,$$

где вектор \mathbf{g} -функция только от величин Γ .

Действительно, при подстановке в (7,1) в обеих сторонах равенства получаем множитель ∇T .

Поскольку уравнение должно иметь место при произвольных значениях вектора ∇T , должны быть равными коэффициенты при ∇T в обеих сторонах равенства, так что мы получаем для \mathbf{g} уравнение

$$\mathbf{v} \frac{\varepsilon(\Gamma) - c_p T}{T} = I(\mathbf{g})$$

уже не содержащее ∇T (а тем самым и явной зависимости от координат).

Функция χ должна еще удовлетворять условиям (6,3).

С функцией χ в виде (7,2) первые два из этих условий удовлетворяются автоматически: это очевидно уже из того, что уравнение (7,3) не содержит никаких векторных параметров, вдоль которых могли бы быть направлены постоянные векторы - интегралы $\int f_0 g d\Gamma$ и $\int f_0 \varepsilon g d\Gamma$.

Третье же накладывает на решение уравнения (7,3) дополнительное условие

$$\int f_0 \mathbf{v} g d\Gamma = 0$$

Если кинетическое уравнение решено и функция χ известна, то можно определить коэффициент теплопроводности, вычисляя поток энергии, точнее - его диссипативную часть, не связанную просто с конвективным переносом энергии (эту часть потока энергии будем обозначать символом \mathbf{q}').

Но в отсутствие макроскопического движения в газе \mathbf{q}' совпадает с полным потоком энергии \mathbf{q} , даваемым интегралом (5.9).

При $f = f_0$ этот интеграл исчезает тождественно за счет интегрирования по направлениям \mathbf{v} .

Поэтому при подстановке $f(6.1)$ остается

$$\mathbf{q} = \frac{1}{T} \int \mathbf{v} f_0 \chi \varepsilon d\Gamma = \frac{1}{T} \int f_0 \varepsilon \mathbf{v} (g \nabla T) d\Gamma$$

или, в компонентах,

$$q_\alpha = -\kappa_{\alpha\beta} \frac{\partial T}{\partial x_\beta}, \quad \kappa_{\alpha\beta} = -\frac{1}{T} \int f_0 \varepsilon v_\alpha g_\beta d\Gamma$$

Ввиду изотропии равновесного газа какие-либо избранные направления в нем отсутствуют и тензор $\kappa_{\alpha\beta}$ может выражаться лишь через единичный тензор $\delta_{\alpha\beta}$, т. е. сводится к скаляру:

$$\kappa_{\alpha\beta} = \kappa \delta_{\alpha\beta}, \quad \kappa = \kappa_{\alpha\alpha}/3$$

Таким образом, поток энергии

$$\mathbf{q} = -\kappa \nabla T$$

где скалярный коэффициент теплопроводности

$$\kappa = -\frac{1}{3T} \int f_0 \varepsilon \mathbf{v} g d\Gamma$$

Положительность этой величины (поток \mathbf{q} должен быть направлен противоположно градиенту температуры) автоматически обеспечивается кинетическим уравнением (см. 8 9).

В одноатомных газах скорость \mathbf{v} - единственный вектор, от которого зависит функция g ; ясно поэтому, что эта функция должна иметь вид

$$\mathbf{g} = \frac{\mathbf{v}}{v} g(v)$$

В многоатомных газах функция g зависит уже от двух векторов - скорости \mathbf{v} и момента \mathbf{M} . Если симметрия молекул не допускает существования стереонизомерии, то интеграл столкновений, а с ним и уравнение (7.3) инвариантны по отношению к инверсии; такой же инвариантностью должно обладать и его решение χ .

Другими словами, $\chi = g \nabla T$ должно быть истинным скаляром, а поскольку градиент ∇T есть истинный вектор, то таким же вектором должна быть и функция g . Так, для

двухатомного газа, где векторами \mathbf{v} и \mathbf{M} исчерпываются величины Γ , функция $g(\Gamma)$ имеет вид

$$\mathbf{g} = \mathbf{v}g_1 + \mathbf{M}(\mathbf{v}\mathbf{M})g_2 + [\mathbf{v}\mathbf{M}]g_3$$

где g_1, g_2, g_3 - скалярные функции от скалярных аргументов $\mathbf{v}^2, \mathbf{M}^2, (\mathbf{v}\mathbf{M})^2$; это наиболее общий вид истинного вектора, который может быть построен из истинного же вектора \mathbf{v} и псевдовектора \mathbf{M} .

Если же вещество представляет собой стереоизомер, то инвариантность по отношению к инверсии отсутствует: в таком случае инверсия «превращает» газ, по существу, в другое вещество.

(??) Соответственно функция χ сможет содержать также и псевдоскалярные члены, т. е. функция g псевдовекторные члены (например, член вида $g_4\mathbf{M}$).

Условие применимости изложенного метода решения кинетического уравнения (основанного на предположении о близости f к f_0) можно выяснить путем оценки интеграла столкновений согласно (3.12). Средняя энергия молекулы $\bar{\varepsilon} \sim T$, поэтому оценка обеих частей уравнения (7.3) дает $\bar{v} \sim g/\tau \sim g\bar{v}/l$, откуда $g \sim l$. Условие $\chi/T \sim g|\nabla T|/T \ll 1$ (эквивалентное требованию $\delta f \ll f_0$) означает, следовательно, что расстояния L , на которых температура испытывает существенное изменение ($|\nabla T| \sim T/L$), должны быть велики по сравнению с l .

Другими словами, функция вида (6.1) представляет собой первые члены разложения решения кинетического уравнения по степеням малого отношения l/L .

Оценка интеграла (7.7) с $g \sim l$ приводит к формуле

$$\kappa \sim cNl\bar{v}$$

где c - отнесенная к одной молекуле теплоемкость газа. Это известная элементарная газокинетическая формула.

Положив в ней $l \sim 1/N\sigma$, $c \sim 1$ и $\bar{v} \sim \sqrt{T/m}$, имеем

$$\kappa \sim \frac{1}{\sigma} \sqrt{\frac{T}{m}}$$

В этой оценке сечение σ относится к средней тепловой скорости молекул, и в этом смысле его надо понимать как функцию температуры. С увеличением скорости сечение, вообще говоря, убывает; соответственно σ будет убывающей функцией температуры.

При не слишком низких температурах молекулы газа ведут себя, качественно, как твердые упругие частицы, взаимодействующие друг с другом лишь при непосредственных столкновениях.

Такому характеру взаимодействия отвечает слабо зависящее от скорости (а потому и от температуры) сечение столкновений.

В этих условиях зависимость κ от температуры близка к пропорциональности \sqrt{T} .

5.2.6 Вязкость газа

теория

Вычислим вязкость газа с помощью кинетического уравнения, делается это аналогично вычислению теплопроводности.

Разница состоит в том, что отклонение от равновесия обусловлено не градиентом температуры, а неоднородностью потока газа по скорости макроскопического движения V .

При этом снова предполагается, что характерные размеры задачи $L \gg l$.

Существуют, как известно, два вида вязкости, коэффициенты которых принято обозначать посредством η и ζ .

Они определяются как коэффициенты в тензоре вязких напряжений $\sigma'_{\alpha\beta}$, входящем как часть в тензор плотности потока импульса:

$$\begin{aligned}\Pi_{\alpha\beta} &= P\delta_{\alpha\beta} + \rho V_\alpha V_\beta - \sigma'_{\alpha\beta} \\ \sigma'_{\alpha\beta} &= 2\eta \left(V_{\alpha\beta} - \frac{1}{3}\delta_{\alpha\beta} \operatorname{div} \mathbf{V} \right) + \zeta \delta_{\alpha\beta} \operatorname{div} \mathbf{V}\end{aligned}$$

где $V_{\alpha\beta}$ определено согласно (6.12)(см. VI, §15).

В несжимаемой жидкости проявляется лишь вязкость η . «Вторая» же вязкость проявляется при движениях, в которых $\operatorname{div} \mathbf{V} \neq 0$.

Оба коэффициента целесообразно вычислять отдельно.

Опустив в общем кинетическом уравнении (6.19) член с градиентом температуры, перепишем его в виде

$$mv_\alpha v_\beta \left(V_{\alpha\beta} - \frac{1}{3}\delta_{\alpha\beta} \operatorname{div} \mathbf{V} \right) + \left(\frac{mv^2}{3} - \frac{\varepsilon(\Gamma)}{c_v} \right) \operatorname{div} \mathbf{V} = I(\chi)$$

где в левой части разделены члены, создающие первую и вторую вязкости.

При вычислении первой вязкости надо считать, что
(????)

виде

$$m \left(v_\alpha v_\beta - \frac{1}{3}\delta_{\alpha\beta} v^2 \right) V_{\alpha\beta} = I(\chi)$$

где оба тензорных множителя в левой стороне имеют равный нулю след.

Решение этого уравнения ищем в виде

$$\chi = g_{\alpha\beta} V_{\alpha\beta}$$

где $g_{\alpha\beta}(\Gamma)$ - симметричный тензор; поскольку след $V_{\alpha\alpha} = 0$, то прибавлением к $g_{\alpha\beta}$ члена $(\delta_{\alpha\beta})$ можно всегда добиться того, чтобы было и $g_{\alpha\alpha} = 0$, не меняя при этом функции χ .

Для $g_{\alpha\beta}$ имеем уравнение

$$m \left(v_\alpha v_\beta - \frac{1}{3}\delta_{\alpha\beta} v^2 \right) = I(g_{\alpha\beta})$$

Дополнительные условия (6.3) удовлетворяются автоматически. Поток импульса вычисляется по функции распределения как интеграл (5.8).

Интересующая нас часть этого тензора - тензор вязких напряжений - дается интегралом

$$\begin{aligned}\sigma'_{\alpha\beta} &= -\frac{m}{T} \int v_\alpha v_\beta f_0 \chi d\Gamma = \eta_{\alpha\beta\gamma\delta} V_{\gamma\delta} \\ \eta_{\alpha\beta\gamma\delta} &= -\frac{m}{T} \int f_0 v_\alpha v_\beta g_{\gamma\delta} d\Gamma.\end{aligned}$$

Величины $\eta_{\alpha\beta\gamma\delta}$ составляют тензор четвертого ранга, симметричный по парам индексов α, β и γ, δ и дающий нуль при упрощении по паре γ, δ .

Ввиду изотропии газа этот тензор может выражаться только через единичный тензор $\delta_{\alpha\beta}$. Выражение, удовлетворяющее этим условиям:

$$\eta_{\alpha\beta\gamma\delta} = \eta \left[\delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta} + \delta_{\alpha\delta} \delta_{\beta\gamma} - \frac{2}{3} \delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\delta} \right]$$

Тогда $\sigma'_{\alpha\beta} = 2\eta V_{\alpha\beta}$, так что η есть искомый скалярный коэффициент вязкости.

Он определяется путем упрощения тензора по парам индексов α, γ и β, δ :

$$\eta = -\frac{m}{10T} \int v_{\alpha} v_{\beta} g_{\alpha\beta} f_0 d\Gamma$$

В одноатомном газе $g_{\alpha\beta}$ является функцией только от вектора \mathbf{v} .

Общий вид такого симметричного тензора с равным нулю следом есть

$$g_{\alpha\beta} = \left(v_{\alpha} v_{\beta} - \frac{1}{3} \delta_{\alpha\beta} v^2 \right) g(v)$$

с одной только скалярной функцией $g(v)$.

В многоатомных газах тензор $g_{\alpha\beta}$ составляется с помощью большего числа переменных, в том числе двух векторов \mathbf{v} и \mathbf{M} . В отсутствие стереоизометрии $g_{\alpha\beta}$ может содержать только истинно-тензорные члены; в газе стереоизомерного вещества допускаются также и псевдотензорные члены.

Оценка коэффициента вязкости, аналогичная оценке (7.10) для коэффициента теплопроводности, приводит к известной элементарной газокINETической формуле

$$\eta \sim m \bar{v} N l$$

(см. примеч. на с. 57). При этом температуропроводность и кинематическая вязкость оказываются одинакового порядка величины:

$$x / (N c_p) \sim \eta / (N m) \sim \bar{v} l.$$

Положив в (8.11) $l \sim 1/N\sigma$ и $\bar{v} \sim (T/m)^{1/2}$, получим

$$\eta \sim \sqrt{mT}/\sigma$$

Все сказанное в §7 о зависимости x от давления и от температуры относится и к коэффициенту вязкости η .

Для вычисления второго коэффициента вязкости надо считать отличным от нуля второй член в левой части кинетического уравнения (8.3):

$$\left(\frac{mv^2}{3} - \frac{\varepsilon(\Gamma)}{c_v} \right) \operatorname{div} \mathbf{V} = I(\chi)$$

Ищем решение в виде

$$\chi = g \operatorname{div} \mathbf{V}$$

и для функции g находим уравнение

$$\frac{mv^2}{3} - \frac{\varepsilon(\Gamma)}{c_v} = I(g).$$

Вычислив тензор напряжений и сравнив его с выражением $\zeta \delta_{\alpha\beta} \operatorname{div} \mathbf{V}$, получим коэффициент вязкости в виде

$$\zeta = -\frac{m}{3T} \int v^2 g f_0 d\Gamma$$

У одноатомных газов $\varepsilon(\Gamma) = mv^2/2$, $c_v = 3/2$, и левая часть уравнения (8.16) обращается в нуль. Из уравнения $I(g) = 0$ следует тогда, что и $g = 0$, а потому и $\zeta = 0$. Мы приходим, таким образом, к интересному результату: у одноатомных газов вторая вязкость равна нулю).

вторая вязкость газа ультрарелятивистских частиц равна нулю

(задача от И.М. Халатникова 1955.)

Энергия ε релятивистской частицы в системе отсчета K , которой газ движется с (нерелятивистской) скоростью V , связана с ее энергией ε' в системе K' , в которой газ покоится, формулой $\varepsilon' = \varepsilon - \mathbf{p}\mathbf{V}$, где \mathbf{p} - импульс частицы в системе K (это - формула преобразования Лоренца, в которой опущены члены более чем первого порядка по \mathbf{V}). Функция распределения в системе K : $f_0(\varepsilon - \mathbf{p}\mathbf{V})$, где $f_0(\varepsilon')$ - распределение Больцмана.

Интересуясь лишь вязкостью, мы можем с самого начала считать равными нулю градиенты всех макроскопических величин, за исключением лишь скорости \mathbf{V} ; тогда и $\partial\mathbf{V}/\partial t = 0$, так что последний член в (6.10) выпадает ²⁾. В (6.11) первые два члена тоже отсутствуют, а третий заменяется на

$$\mathbf{v}\nabla(\mathbf{p}\mathbf{V}) = v_\alpha p_\beta \frac{\partial V_\beta}{\partial x_\alpha} = v_\alpha p_\beta V_{\alpha\beta}$$

(направления \mathbf{v} и \mathbf{p} совпадают, поэтому $p_\alpha v_\beta = p_\beta v_\alpha$). Уравнения непрерывности и сохранения энтропии в использованном в §6 виде остаются справедливыми и при движении (с малыми скоростями V) релятивистского газа.

Поэтому остаются в силе и формулы (6.16). В результате кинетическое уравнение принимает вид

$$\left(v_\alpha p_\beta - \delta_{\alpha\beta} \frac{\varepsilon}{c_v} \right) V_{\alpha\beta} = I(\chi)$$

В задаче о второй вязкости надо положить $V_{\alpha\beta} = \frac{1}{3}\delta_{\alpha\beta} \operatorname{div} \mathbf{V}$, и тогда

$$\left(\frac{vp}{3} - \frac{\varepsilon}{c_v} \right) \operatorname{div} \mathbf{V} = I(\chi)$$

В ультрарелятивистском газе $v \approx c$, $\varepsilon = cp$, а теплоемкость $c_v = 3$ (см. V, § 44, задача), так что левая часть уравнения, а с нею и χ обращаются в нуль.

Part IV

Методы квантовой кинетики

6 основы квантовой кинетики

нормальная теория ее, которую дальше используем.

6.1 обзор квантовой кинетики

обзор параметров явлений квантовой кинетики

способ описания систем

обзор параметров квантовой кинетики

6.2 Неравновесная матрица плотности

7 уравнения квантовой кинетики

(пока не та структура)

7.0.1 Квантовое уравнение Лиувилля

формулировка

области применимости

(пока точно не знаю)

7.1 Уравнения Линдблада

7.1.1 Основы уравнения Линдблада

Приведем свойства уравнения Линдблада, а также его вывод

формулировка

$$\frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}] + \sum_k \frac{\gamma_k}{2} (2\hat{S}_k \hat{\rho} \hat{S}_k^+ - \hat{S}_k^+ \hat{S}_k \hat{\rho} - \hat{\rho} \hat{S}_k^+ \hat{S}_k)$$

где суммирование ведется по всевозможным парам собственных состояний $k = \{k_1, k_2\}$.

Такое уравнение называется уравнением Линдблада.

Его более строгий вывод показывает, что оно справедливо только при выполнении двух приближений: борновского и марковского.

Борновское приближение означает, что система не меняет состояние резервуара.

Марковское приближение означает, что мы можем описывать динамику системы локальным по времени уравнением.

Уравнение Линдблада является модельным и приближенным.

Его достоинством является то, что оно позволяет описать релаксацию открытой системы к равновесию и совместимо с началами термодинамики.

Его стандартный вид следующий:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \hat{\rho}(t)}{\partial t} &= \frac{1}{i\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}] + \frac{1}{2} \sum_k \left([\hat{L}_k \hat{\rho}, \hat{L}_k^\dagger] + [\hat{L}_k, \hat{\rho} \hat{L}_k^\dagger] \right) \equiv \\ &\equiv \frac{1}{i\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}] + \frac{1}{2} \sum_k \left(2\hat{L}_k \hat{\rho} \hat{L}_k^\dagger - \hat{L}_k^\dagger \hat{L}_k \hat{\rho} - \hat{\rho} \hat{L}_k^\dagger \hat{L}_k \right)\end{aligned}$$

где \hat{L}_k - операторы Линдблада.

Уравнение Линдблада является наиболее общим уравнением, описывающим неунитарную эволюцию матрицы плотности открытой квантовой подсистемы.

Его еще называют квантовым марковским уравнением.

области применимости

(пока точно не знаю)

когда волновая функция расщепляется

типичные примеры:

когда описываем спиновые системы, которые взаимодействуют с окружением.

постановка задачи

есть

Гамильтониан Системы(system)

Гамильтониан Резервуара (reservoir)

Гамильтониан взаимодействия

$$H = H_s + H_r + H_{sr}$$

ρ - матрица плотности всей системы O - оператор наблюдаемой, относящийся к системе $\langle O \rangle = \text{tr}(\rho O) = \text{tr}_s(\text{tr}_r(\rho O)) = \text{tr}_s(\text{tr}_r(\rho) O) = \text{tr}_s(\rho_s O)$, $\rho_s = \text{tr}_r(\rho)$ - редуцированная матрица плотности.

основная идея вывода

потом напишу вкратце идею

Что такое редуцированная матрица плотности

$$\begin{aligned}\rho &= \sum_{i,j;\alpha\beta} \rho_{ij,\alpha\beta} |e_i^{(s)}\rangle \langle e_j^{(s)}| |e_\alpha^{(r)}\rangle \langle e_\beta^{(r)}| \\ \rho_s &= \text{tr}_r \rho = \sum_\gamma \langle e_\gamma^{(r)} | \left(\sum_{i,j;\alpha\beta} \rho_{ij,\alpha\beta} |e_i^{(s)}\rangle \langle e_j^{(s)}| |e_\alpha^{(r)}\rangle \langle e_\beta^{(r)}| \right) | e_\gamma^{(r)} \rangle = \\ &= \sum_\gamma \left(\sum_{i,j;\alpha\beta} \rho_{ij,\alpha\beta} |e_i^{(s)}\rangle \langle e_j^{(s)}| \right) \delta_{\gamma\alpha} \delta_{\gamma\beta} = \sum_{i,j;\gamma} \rho_{ij,\gamma} |e_i^{(s)}\rangle \langle e_j^{(s)}|\end{aligned}$$

подсчет средних

$$\begin{aligned}O &= \sum_{n,m;\chi} O_{nm} |e_n^{(s)}\rangle \langle e_m^{(s)}| |e_\chi^{(r)}\rangle \langle e_x^{(r)}|, \\ \sum_\chi |e_\chi^{(r)}\rangle \langle e_\chi^{(r)}| &= 1^{(r)},\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle O \rangle &= \text{tr}(\rho O) = \sum_{k,\lambda} \langle e_k^{(s)} | \langle e_\lambda^{(r)} | \sum_{n,m;\chi} O_{nm} | e_n^{(s)} \rangle \langle e_m^{(s)} | e_\chi^{(r)} \rangle \\
&\quad \langle e_\chi^{(r)} | \left(\sum_{i,j;\alpha\beta} \rho_{ij,\alpha\beta} | e_i^{(s)} \rangle \langle e_j^{(s)} | e_\alpha^{(r)} \rangle \langle e_\beta^{(r)} | \right) | e_\lambda^{(r)} \rangle | e_k^{(s)} \rangle = \\
&= \sum_k \langle e_k^{(s)} | \left(\sum_{n,m} O_{nm} | e_n^{(s)} \rangle \langle e_m^{(s)} | \right) \sum_\lambda \langle e_\lambda^{(r)} | \sum_{i,j;\alpha\beta} \rho_{ij,\alpha\beta} | e_i^{(s)} \rangle \langle e_j^{(s)} | e_\alpha^{(r)} \rangle \langle e_\beta^{(r)} | \rangle e_\lambda^{(r)} \rangle | e_k^{(s)} \rangle = \\
&= \sum_k \langle e_k^{(s)} | \left(\sum_{n,m;\chi} O_{nm} | e_n^{(s)} \rangle \langle e_m^{(s)} | \right) (\rho_s)_{ij} | e_i^{(s)} \rangle \langle e_j^{(s)} | e_k^{(s)} \rangle = \text{tr}_s(\rho_s O). \quad (7.1)
\end{aligned}$$

Уравнение на матрицу плотности

необходимо получить уравнение на редуцированную матрицу плотности

$$\dot{\rho} = \frac{i}{\hbar} [\rho, H] = \frac{i}{\hbar} [\rho, H_s + H_r + H_{sr}]$$

Перейдем в представление взаимодействия:

$$\tilde{\rho} = \exp(i(H_s + H_r)t/\hbar) \rho \exp(-i(H_s + H_r)t/\hbar)$$

$$\dot{\tilde{\rho}} = \frac{i}{\hbar} [\tilde{\rho}, \tilde{H}_{sr}(t)]$$

$$\begin{aligned}
\dot{\tilde{\rho}} &= \frac{i}{\hbar} [\tilde{\rho}, \tilde{H}_{sr}(t)] \\
\tilde{\rho}(t) &= \tilde{\rho}(t_0) + \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t [\tilde{\rho}(t'), \tilde{H}_{sr}(t')] dt' \quad (7.2)
\end{aligned}$$

потом обратно:

$$\dot{\rho}(t) = \frac{i}{\hbar} [\tilde{\rho}(t_0), \tilde{H}_{sr}(t)] + \left(\frac{i}{\hbar} \right)^2 \int_{t_0}^t [[\tilde{\rho}(t'), \tilde{H}_{sr}(t')], \tilde{H}_{sr}(t)] dt'. \quad (7.3)$$

Первое слагаемое может быть исключено. Положим $t_0 \rightarrow -\infty$. При $t_0 \rightarrow -\infty$ взаимодействие равно нулю, а матрица плотности соответствует распределению Гиббса. Таким образом, при $t_0 \rightarrow -\infty$:

$$\begin{aligned}
H &= \tilde{H} = H_s + H_r \\
\rho &= \tilde{\rho}(-\infty) = Z^{-1} \exp(-H/T)
\end{aligned}$$

Мы будем считать, что взаимодействие медленно (адиабатически) включается, при $t > t_0 = -\infty$.

Далее мы будем брать след от матрицы плотности по степеням свободы резервуара. Такой след от Гамильтониана взаимодействия (мы это так выберем) будет тождественно равен нулю. Поэтому мы можем «забыть» про первое слагаемое в ур. на матрицу плотности:

$$\dot{\rho}(t) = \left(\frac{i}{\hbar} \right)^2 \int_{t_0}^t [[\tilde{\rho}(t'), \tilde{H}_{sr}(t')], \tilde{H}_{sr}(t)] dt'.$$

Будем считать взаимодействие между системой и резервуаром слабое: Поправки к этому «борновскому» приближению второго порядка по H_{sr}

Будем считать взаимодействие между системой и резервуаром слабое и резервуар находится в термодинамическом равновесии:

$$\tilde{\rho}(t) \approx \tilde{\mathcal{O}}_s(t) \otimes \tilde{\mathcal{O}}_r(-\infty)$$

Получим:

$$\dot{\tilde{\rho}}_s(t) \otimes \tilde{\rho}_r(-\infty) \approx \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{-\infty}^t \left[[\tilde{\rho}_s(t') \otimes \tilde{\rho}_r(-\infty), \tilde{H}_{sr}(t')] , \tilde{H}_{sr}(t) \right] dt',$$

Конкретизируем гамильтонианы

$$H_s = \hbar\omega_s s^+ s, \quad H_r = \sum_{\alpha} \hbar\omega_{\alpha} b_{\alpha}^+ b_{\alpha}$$

$$H_{sr} = \sum_{\alpha} \hbar\gamma_{\alpha} (b_{\alpha}^+ s + s^+ b_{\alpha})$$

легко показать, что

$$\begin{aligned} \tilde{H}_{sr}(t) &= \sum_{\alpha} \hbar\gamma_{\alpha} (b_{\alpha}^+ s e^{-i(\omega_s - \omega_{\alpha})t} + s^+ b_{\alpha} e^{i(\omega_s - \omega_{\alpha})t}) . \\ \tilde{b}_{\alpha}(t) &= e^{iH_r t/\hbar} b_{\alpha} e^{-iH_r t/\hbar} = b_{\alpha} e^{-i\omega_{\alpha} t/\hbar} \end{aligned}$$

и

$$\tilde{s}(t) = e^{iH_s t/\hbar} s e^{-iH_s t/\hbar} = s e^{-i\omega_s t/\hbar}$$

$$\tilde{H}_{sr}(t) = \sum_{\alpha} \hbar\gamma_{\alpha} (b_{\alpha}^+ s e^{-i(\omega_s - \omega_{\alpha})t} + s^+ b_{\alpha} e^{i(\omega_s - \omega_{\alpha})t})$$

Введем обозначение: $F(t) = \sum_{\alpha} \gamma_{\alpha} b_{\alpha} e^{i(\omega_s - \omega_{\alpha})t}$

Теперь

$$\tilde{H}_{sr}(t) = \hbar (F^+(t)s + F(t)s^+).$$

$$\tilde{H}_{sr}(t) = \hbar (F^+(t)s + F(t)s^+).$$

$$F(t) = \sum_{\alpha} \gamma_{\alpha} b_{\alpha} e^{i(\omega_s - \omega_{\alpha})t}$$

$$\dot{\tilde{\rho}}_s(t) \otimes \tilde{\rho}_r(-\infty) \approx \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{-\infty}^t \left[[\tilde{\rho}_s(t') \otimes \tilde{\rho}_r(-\infty), \tilde{H}_{sr}(t')] , \tilde{H}_{sr}(t) \right] dt',$$

$$\dot{\tilde{\rho}}_s(t) \approx \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{-\infty}^t \text{tr}_r \left(\left[[\tilde{\rho}_s(t') \otimes \tilde{\rho}_r(-\infty), \tilde{H}_{sr}(t')] , \tilde{H}_{sr}(t) \right] \right) dt' \quad (7.4)$$

вырвиглазные преобразования:

$$\begin{aligned} \dot{\tilde{\rho}}_s(t) &\approx - \int_{-\infty}^t \text{tr}_r ([[\tilde{\rho}_s(t') \otimes \tilde{\rho}_r(-\infty), (F^+(t')s + F(t')s^+)], (F^+(t)s + F(t)s^+)]) dt' = \\ &= - \int_{-\infty}^t \text{tr}_r ([(\tilde{\rho}_s(t') \otimes \tilde{\rho}_r(-\infty)(F^+(t')s + F(t')s^+)) \\ &\quad s^+ - (F^+(t')s + F(t')s^+)\tilde{\rho}_s(t') \otimes \tilde{\rho}_r(-\infty)), (F^+(t)s + F(t)s^+)]) dt' = \\ &= - \int_{-\infty}^t \text{tr}_r (\tilde{\rho}_s(t') \otimes \tilde{\rho}_r(-\infty)(F^+(t')s + F(t')s^+)(F^+(t)s + F(t)s^+)) dt' + \\ &\quad + \int_{-\infty}^t \text{tr}_r ((F^+(t')s + F(t')s^+)\tilde{\rho}_s(t') \otimes \tilde{\rho}_r(-\infty)(F^+(t)s + F(t)s^+)) dt' + \\ &\quad + \int_{-\infty}^t \text{tr}_r ((F^+(t)s + F(t)s^+)\tilde{\rho}_s(t') \otimes \tilde{\rho}_r(-\infty)(F^+(t')s + F(t')s^+)) dt' - \\ &\quad - \int_{-\infty}^t \text{tr}_r ((F^+(t)s + F(t)s^+)(F^+(t')s + F(t')s^+)\tilde{\rho}_s(t') \otimes \tilde{\rho}_r(-\infty)) dt' \end{aligned} \quad (7.5)$$

$$\begin{aligned}
& - \int_{-\infty}^t \text{tr}_r(\tilde{\rho}_s(t') \otimes \tilde{\rho}_r(-\infty)(F^+(t')s + F(t')s^+)(F^+(t)s + F(t)s^+))dt' = \\
& = - \int_{-\infty}^t \text{tr}_r(\tilde{\rho}_s(t') \otimes \tilde{\rho}_r(-\infty)(F^+(t')F(t)ss^+ + F(t')F^+(t)s^+s))dt' = \\
& = - \int_{-\infty}^t (\langle F^+(t')F(t) \rangle_r \tilde{\rho}_s(t')ss^+ + \langle F(t')F^+(t) \rangle \tilde{\rho}_s(t')s^+s)dt'.
\end{aligned} \tag{7.6}$$

Здесь мы использовали, что

$$\begin{aligned}
\langle F(t')F(t) \rangle &= \langle F^+(t')F^+(t) \rangle = 0 \\
F(t) &= \sum_{\alpha} \gamma_{\alpha} b_{\alpha} e^{i(\omega_s - \omega_{\alpha})t}, \quad \langle b_{\alpha} b_{\beta} \rangle = 0
\end{aligned} \tag{7.7}$$

аналогично вырвиглазные преобразования для второй части:

$$\begin{aligned}
& - \int_{-\infty}^t \text{tr}_r((F^+(t)s + F(t)s^+)(F^+(t')s + F(t')s^+)\tilde{\rho}_s(t') \otimes \tilde{\rho}_r(-\infty))dt' = \\
& = - \int_{-\infty}^t \text{tr}_r((F^+(t)F(t')ss^+ + F(t)F^+(t')s^+s)\tilde{\rho}_s(t') \otimes \tilde{\rho}_r(-\infty))dt' = \\
& = - \int_{-\infty}^t (\langle F^+(t)F(t') \rangle_r ss^+ \tilde{\rho}_s(t') + \langle F(t)F^+(t') \rangle_r s^+s \tilde{\rho}_s(t'))dt' \\
& \quad \int_{-\infty}^t \text{tr}_r((F^+(t')s + F(t')s^+)\tilde{\rho}_s(t') \otimes \tilde{\rho}_r(-\infty)(F^+(t)s + F(t)s^+))dt' = \\
& = \int_{-\infty}^t \text{tr}_r(F^+(t')s\tilde{\rho}_s(t') \otimes \tilde{\rho}_r(-\infty)F(t)s^+ + F(t')s^+\tilde{\rho}_s(t') \otimes \tilde{\rho}_r(-\infty)F^+(t)s)dt' = \\
& = \int_{-\infty}^t \text{tr}_r(s\tilde{\rho}_s(t')s^+ \otimes F^+(t')\tilde{\rho}_r(-\infty)F(t) + s^+\tilde{\rho}_s(t')s \otimes F(t')\tilde{\rho}_r(-\infty)F^+(t))dt' = \\
& = \int_{-\infty}^t \text{tr}_r(s\tilde{\rho}_s(t')s^+ \otimes \tilde{\rho}_r(-\infty)F(t)F^+(t') + s^+\tilde{\rho}_s(t')s \otimes \tilde{\rho}_r(-\infty)F^+(t)F(t'))dt' = \\
& = \int_{-\infty}^t (s\tilde{\rho}_s(t')s^+ \langle F(t)F^+(t') \rangle_r + s^+\tilde{\rho}_s(t')s \langle F^+(t)F(t') \rangle_r)dt'.
\end{aligned}$$

Далее найдем последнее слагаемое:

$$\begin{aligned}
& \int_{-\infty}^t \text{tr}_r((F^+(t)s + F(t)s^+)\tilde{\rho}_s(t') \otimes \tilde{\rho}_r(-\infty)(F^+(t')s + F(t')s^+))dt' = \\
& = \int_{-\infty}^t \text{tr}_r(F^+(t)s\tilde{\rho}_s(t') \otimes \tilde{\rho}_r(-\infty)F(t')s^+ + F(t)s^+\tilde{\rho}_s(t') \otimes \tilde{\rho}_r(-\infty)F^+(t')s)dt' = \\
& = \int_{-\infty}^t \text{tr}_r(s\tilde{\rho}_s(t')s^+ \otimes F^+(t)\tilde{\rho}_r(-\infty)F(t') + s^+\tilde{\rho}_s(t')s \otimes F(t)\tilde{\rho}_r(-\infty)F^+(t'))dt' = \\
& = \int_{-\infty}^t (\langle F(t')F^+(t) \rangle_r s\tilde{\rho}_s(t')s^+ + \langle F^+(t')F(t) \rangle_r s^+\tilde{\rho}_s(t')s)dt'.
\end{aligned}$$

Итак:

$$\begin{aligned}\dot{\rho}_s(t) \approx & \int_{-\infty}^t ((\langle F(t)F^+(t') \rangle_r + \langle F(t')F^+(t) \rangle_r) s \tilde{\rho}_s(t') s^+ + \\ & + (\langle F^+(t)F(t') \rangle_r + \langle F^+(t')F(t) \rangle_r) s^+ \tilde{\rho}_s(t') s) dt' - \\ & - \int_{-\infty}^t ((\langle F^+(t')F(t) \rangle_r \tilde{\rho}_s(t') s s^+ + \langle F(t')F^+(t) \rangle_r \tilde{\rho}_s(t') s^+ s) dt' - \\ & - \int_{-\infty}^t ((\langle F^+(t)F(t') \rangle_r s s^+ \tilde{\rho}_s(t') + \langle F(t)F^+(t') \rangle_r s^+ \tilde{\rho}_s(t')) dt'\end{aligned}$$

корреляторы

Найдем корреляторы:

$$\langle F^+(t)F(t') \rangle_r$$

$$\langle F^+(t)F(t') \rangle_r = \left\langle \sum_{\alpha, \beta} b_{\beta}^+ b_{\alpha} \right\rangle_r \gamma_{\beta}^* \gamma_{\alpha} e^{-i(\omega_s - \omega_{\beta})t + i(\omega_s - \omega_{\alpha})t'} = \sum_{\alpha} n_{\alpha} |\gamma_{\alpha}|^2 e^{-i(\omega_s - \omega_{\alpha})(t - t')}$$

$$\langle F(t)F^+(t') \rangle_r = \sum_{\alpha} (n_{\alpha} + 1) |\gamma_{\alpha}|^2 e^{i(\omega_s - \omega_{\alpha})(t - t')}, \quad n_{\alpha} = \frac{1}{\exp(\hbar\omega_{\alpha}/T) - 1}$$

Введем плотность «фононных состояний» $D(\omega) = \sum_{\alpha} \delta(\omega - \omega_{\alpha})$, тогда:

$$\begin{aligned}\langle F^+(t)F(t') \rangle_r &= \int_0^{\infty} D(\omega) |\gamma(\omega)|^2 n(\omega) e^{-i(\omega_s - \omega)(t - t')} d\omega, \\ \langle F(t)F^+(t') \rangle_r &= \int_0^{\infty} D(\omega) |\gamma(\omega)|^2 (n(\omega) + 1) e^{i(\omega_s - \omega)(t - t')} d\omega.\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\dot{\rho}_s(t) \approx & \int_{-\infty}^t ((\langle F(t)F^+(t') \rangle_r + \langle F(t')F^+(t) \rangle_r) s \tilde{\rho}_s(t') s^+ + \\ & + (\langle F^+(t)F(t') \rangle_r + \langle F^+(t')F(t) \rangle_r) s^+ \tilde{\rho}_s(t') s) dt' - \\ & - \int_{-\infty}^t ((\langle F^+(t')F(t) \rangle_r \tilde{\rho}_s(t') s s^+ + \langle F(t')F^+(t) \rangle_r \tilde{\rho}_s(t') s^+ s) dt' - \\ & - \int_{-\infty}^t ((\langle F^+(t)F(t') \rangle_r s s^+ \tilde{\rho}_s(t') + \langle F(t)F^+(t') \rangle_r s^+ \tilde{\rho}_s(t')) dt'\end{aligned}$$

Используем Марковское приближение: матрица плотности меняется медленнее, чем корреляторы F . Тогда

$$\begin{aligned}\dot{\rho}_s(t) \approx & \int_{-\infty}^t ((\langle F(t)F^+(t') \rangle_r + \langle F(t')F^+(t) \rangle_r) s \tilde{\rho}_s(t) s^+ + (\langle F^+(t)F(t') \rangle_r + \langle F^+(t')F(t) \rangle_r) s^+ \tilde{\rho}_s(t) s) dt' - \\ & - \int_{-\infty}^t ((\langle F^+(t')F(t) \rangle_r \tilde{\rho}_s(t) s s^+ + \langle F(t')F^+(t) \rangle_r \tilde{\rho}_s(t) s^+ s) dt' - \\ & - \int_{-\infty}^t ((\langle F^+(t)F(t') \rangle_r s s^+ \tilde{\rho}_s(t) + \langle F(t)F^+(t') \rangle_r s^+ \tilde{\rho}_s(t)) dt'\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\dot{\rho}_s(t) \approx & \int_{-\infty}^t ((\langle F(t)F^+(t') \rangle_r + \langle F(t')F^+(t) \rangle_r) s \tilde{\rho}_s(t) s^+ + (\langle F^+(t)F(t') \rangle_r + \langle F^+(t')F(t) \rangle_r) s^+ \tilde{\rho}_s(t) s) dt' - \\ & - \int_{-\infty}^t ((\langle F^+(t')F(t) \rangle_r \tilde{\rho}_s(t) s s^+ + \langle F(t')F^+(t) \rangle_r \tilde{\rho}_s(t) s^+ s) dt' - \\ & - \int_{-\infty}^t ((\langle F^+(t)F(t') \rangle_r s s^+ \tilde{\rho}_s(t) + \langle F(t)F^+(t') \rangle_r s^+ \tilde{\rho}_s(t)) dt'\end{aligned}$$

ПОЭТОМУ:

$$\begin{aligned} \dot{\tilde{\rho}}_s(t) &\approx s\tilde{\rho}_s(t)s^+ \int_{-\infty}^t (\langle F(t)F^+(t') \rangle_r + \\ &+ \langle F(t')F^+(t) \rangle_r) dt' + s^+ \tilde{\rho}_s(t)s \int_{-\infty}^t (\langle F^+(t)F(t') \rangle_r + \langle F^+(t')F(t) \rangle_r) dt' - \\ &- \tilde{\rho}_s(t)ss^+ \int_{-\infty}^t \langle F^+(t')F(t) \rangle_r dt' - \tilde{\rho}_s(t)s^+s \int_{-\infty}^t \langle F(t')F^+(t) \rangle_r dt' - \\ &- ss^+ \tilde{\rho}_s(t) \int_{-\infty}^t \langle F^+(t)F(t') \rangle_r dt' - s^+s\tilde{\rho}_s(t) \int_{-\infty}^t \langle F(t)F^+(t') \rangle_r dt' \end{aligned}$$

В ИТОГЕ:

$$\begin{aligned} \dot{\tilde{\rho}}_s(t) &\approx s\tilde{\rho}_s(t)s^+ \int_{-\infty}^t (\langle F(t)F^+(t') \rangle_r + \langle F(t')F^+(t) \rangle_r) dt' + \\ &+ s^+ \tilde{\rho}_s(t)s \int_{-\infty}^t (\langle F^+(t)F(t') \rangle_r + \langle F^+(t')F(t) \rangle_r) dt' - \\ &- \tilde{\rho}_s(t)ss^+ \int_{-\infty}^t \langle F^+(t')F(t) \rangle_r dt' - \tilde{\rho}_s(t)s^+s \int_{-\infty}^t \langle F(t')F^+(t) \rangle_r dt' - \\ &- ss^+ \tilde{\rho}_s(t) \int_{-\infty}^t \langle F^+(t)F(t') \rangle_r dt' - s^+s\tilde{\rho}_s(t) \int_{-\infty}^t \langle F(t)F^+(t') \rangle_r dt'. \end{aligned}$$

интегралы от корреляторов $\langle FF \rangle$

Найдем интегралы от корреляторов $\langle FF \rangle$.

они равны:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^t \langle F(t)F^+(t') \rangle_r dt' &= \pi D(\omega_s) |\gamma(\omega_s)|^2 (n(\omega_s) + 1) + i(\Delta_1 + \Delta_2), \\ \int_{-\infty}^t \langle F(t')F^+(t) \rangle_r dt' &= \pi D(\omega_s) |\gamma(\omega_s)|^2 (n(\omega_s) + 1) - i(\Delta_1 + \Delta_2), \\ \int_{-\infty}^t \langle F^+(t)F(t') \rangle_r dt' &= \pi D(\omega_s) |\gamma(\omega_s)|^2 n(\omega_s) + i\Delta_1, \\ \int_{-\infty}^t \langle F^+(t')F(t) \rangle_r dt' &= \pi D(\omega_s) |\gamma(\omega_s)|^2 n(\omega_s) - i\Delta_1. \end{aligned} \quad (7.8)$$

где Δ определены ниже.

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^t \langle F^+(t)F(t') \rangle_r dt' &= \int_{-\infty}^t \int_0^\infty D(\omega) |\gamma(\omega)|^2 n(\omega) e^{-i(\omega_s - \omega)(t - t')} d\omega dt' = \\ &= \int_0^\infty D(\omega) |\gamma(\omega)|^2 n(\omega) \int_{-\infty}^0 e^{i(\omega_s - \omega - i0)\tau} d\tau d\omega = \int_0^\infty D(\omega) |\gamma(\omega)|^2 n(\omega) \frac{1}{i(\omega_s - \omega - i0)} d\omega = \\ &= \int_0^\infty D(\omega) |\gamma(\omega)|^2 n(\omega) \left(\pi \delta(\omega_s - \omega) + P \frac{1}{i(\omega_s - \omega)} \right) d\omega = \pi D(\omega_s) |\gamma(\omega_s)|^2 n(\omega_s) + i\Delta_1, \\ \int_{-\infty}^t \langle F(t)F^+(t') \rangle_r dt' &= \int_{-\infty}^t \int_0^\infty D(\omega) |\gamma(\omega)|^2 (n(\omega) + 1) e^{i(\omega_s - \omega)(t - t')/\hbar} d\omega dt = \\ &= \pi D(\omega_s) |\gamma(\omega_s)|^2 (n(\omega_s) + 1) + i(\Delta_1 + \Delta_2). \end{aligned}$$

$$\Delta_1 = P \int_0^\infty D(\omega) |\gamma(\omega)|^2 n(\omega) \frac{1}{\omega - \omega_s} d\omega, \quad \Delta_2 = P \int_0^\infty D(\omega) |\gamma(\omega)|^2 \frac{1}{\omega - \omega_s} d\omega \quad (7.9)$$

В ИТОГЕ:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^t \langle F(t)F^+(t') \rangle_r dt' &= \pi D(\omega_s) |\gamma(\omega_s)|^2 (n(\omega_s) + 1) + i(\Delta_1 + \Delta_2), \\ \int_{-\infty}^t \langle F(t')F^+(t) \rangle_r dt' &= \pi D(\omega_s) |\gamma(\omega_s)|^2 (n(\omega_s) + 1) - i(\Delta_1 + \Delta_2), \\ \int_{-\infty}^t \langle F^+(t)F(t') \rangle_r dt' &= \pi D(\omega_s) |\gamma(\omega_s)|^2 n(\omega_s) + i\Delta_1, \\ \int_{-\infty}^t \langle F^+(t')F(t) \rangle_r dt' &= \pi D(\omega_s) |\gamma(\omega_s)|^2 n(\omega_s) - i\Delta_1. \end{aligned} \quad (7.10)$$

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^t \langle F(t)F^+(t') \rangle_r dt' &= \gamma_s (n(\omega_s) + 1) + i(\Delta_1 + \Delta_2), \\ \int_{-\infty}^t \langle F(t')F^+(t) \rangle_r dt' &= \gamma_s (n(\omega_s) + 1) - i(\Delta_1 + \Delta_2) \\ \int_{-\infty}^t \langle F^+(t)F(t') \rangle_r dt' &= \gamma_s n(\omega_s) + i\Delta_1, \\ \int_{-\infty}^t \langle F^+(t')F(t) \rangle_r dt' &= \gamma_s n(\omega_s) - i\Delta_1. \\ \gamma_s &= \pi D(\omega_s) |\gamma(\omega_s)|^2 \end{aligned} \quad (7.11)$$

упрощение уравнения на матрицу плотности

Первые два слагаемые:

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^t (\langle F(t) F^+(t') \rangle_r + \langle F(t') F^+(t) \rangle_r) dt' = \\ & = (\gamma_s (n(\omega_s) + 1) + i(\Delta_1 + \Delta_2)) + (\gamma_s (n(\omega_s) + 1) - i(\Delta_1 + \Delta_2)) = \\ & = 2\gamma_s (n(\omega_s) + 1). \end{aligned}$$

третья строчка:

$$\begin{aligned} & \tilde{\rho}_s(t) s s^+ \int_{-\infty}^t \langle F^+(t') F(t) \rangle_r dt' - \tilde{\rho}_s(t) s^+ s \int_{-\infty}^t \langle F(t') F^+(t) \rangle dt' = \\ & = -\tilde{\rho}_s(t) s s^+ (\gamma_s n(\omega_s) + i\Delta_1) - \tilde{\rho}_s(t) s^+ s (\gamma_s n(\omega_s) - i\Delta_1) \end{aligned}$$

четвертая строчка:

$$\begin{aligned} & -s s^+ \tilde{\rho}_s(t) \int_{-\infty}^t \langle F^+(t) F(t') \rangle_r dt' - s^+ s \tilde{\rho}_s(t) \int_{-\infty}^t \langle F(t) F^+(t') \rangle dt' = \\ & = -s s^+ \tilde{\rho}_s(t) (\gamma_s n(\omega_s) + i\Delta_1) - s^+ s \tilde{\rho}_s(t) (\gamma_s (n(\omega_s) + 1) + i(\Delta_1 + \Delta_2)) \end{aligned}$$

итоговое уравнение на матрицу плотности

$$\begin{aligned} \dot{\tilde{\rho}}_s(t) \approx & 2\gamma_s (n(\omega_s) + 1) s \tilde{\rho}_s(t) s^+ + 2\gamma_s n(\omega_s) s^+ \tilde{\rho}_s(t) s - \\ & - (\gamma_s n(\omega_s) - i(\Delta_1 + \Delta_2)) \tilde{\rho}_s(t) s s^+ - (\gamma_s (n(\omega_s) + 1) - i(\Delta_1 + \Delta_2)) \tilde{\rho}_s(t) s^+ s - \\ & - (\gamma_s n(\omega_s) + i(\Delta_1 + \Delta_2)) s s^+ \tilde{\rho}_s(t) - (\gamma_s (n(\omega_s) + 1) + i(\Delta_1 + \Delta_2)) s^+ s \tilde{\rho}_s(t) = \\ & = \frac{i}{\hbar} [\tilde{\rho}_s(t), \hbar(\Delta_1 + \Delta_2) (s s^+ + s^+ s)] + \\ & + \gamma_s (n(\omega_s) + 1) (2s \tilde{\rho}_s(t) s^+ - \{\tilde{\rho}_s(t), s^+ s\}) + \gamma_s n(\omega_s) (2s^+ \tilde{\rho}_s(t) s - \{\tilde{\rho}_s(t), s s^+\}). \end{aligned}$$

в итоге:

$$\begin{aligned} \dot{\tilde{\rho}}_s(t) \approx & \frac{i}{\hbar} [\tilde{\rho}_s(t), \hbar(\Delta_1 + \Delta_2) (s s^+ + s^+ s)] + \\ & + \gamma_s (n(\omega_s) + 1) (2s \tilde{\rho}_s(t) s^+ - \{\tilde{\rho}_s(t), s^+ s\}) + \\ & + \gamma_s n(\omega_s) (2s^+ \tilde{\rho}_s(t) s - \{\tilde{\rho}_s(t), s s^+\}) \quad (7.12) \end{aligned}$$

или в Шредингеровском представлении:

$$\begin{aligned} \dot{\rho}_s(t) \approx & \frac{i}{\hbar} [\rho_s(t), H_s + \hbar(\Delta_1 + \Delta_2) (s s^+ + s^+ s)] + \\ & + \gamma_s (n(\omega_s) + 1) (2s \rho_s(t) s^+ - \{\rho_s(t), s^+ s\}) + \\ & + \gamma_s n(\omega_s) (2s^+ \rho_s(t) s - \{\rho_s(t), s s^+\}) \quad (7.13) \end{aligned}$$

Таким образом, взаимодействие нашей системы (квантового осциллятора) с резервуаром из бесконечного числа квантовых осцилляторов, привело к перенормировке Гамильтониана системы.

Новый Гамильтониан:

$$\begin{aligned} H_s = \hbar\omega_s s^+ s \rightarrow \hbar\omega_s s^+ s + \hbar(\Delta_1 + \Delta_2) (s s^+ + s^+ s) = \\ = (\hbar\omega_s + 2\hbar(\Delta_1 + \Delta_2)) s^+ s + \hbar(\Delta_1 + \Delta_2) \quad (7.14) \end{aligned}$$

здесь Δ - Лембовские сдвиги

Если $T \ll \hbar\omega_s$, то $n(\omega_s) \ll 1$

$$\begin{aligned} \dot{\rho}_s(t) \approx & \frac{i}{\hbar} [\rho_s(t), H_s + \hbar(\Delta_1 + \Delta_2) (s s^+ + s^+ s)] + \\ & + \gamma_s (2s \rho_s(t) s^+ - \{\rho_s(t), s^+ s\}) \quad (7.15) \end{aligned}$$

сохранение нормы матрицы плотности

такое можно доказать, но я не буду.

доказать, что диссипативное уравнение на матрицу плотности сохраняет норму матрицы плотности

анalogии с другими уравнениями

понятно, чем оно отлично от уравнения Гейзенберга.

...

что еще?

примеры уравнений Линдблада

посмотрим на примеры, чтобы начать ориентироваться.

уравнение Линдблада

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = & -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}_S, \hat{\rho}] + \gamma_{\text{diss}} (1 + N_{\omega_0}) \left(\hat{\sigma} \hat{\rho} \hat{\sigma}^+ - \frac{1}{2} \hat{\sigma}^+ \hat{\sigma} \hat{\rho} - \frac{1}{2} \hat{\rho} \hat{\sigma}^+ \hat{\sigma} \right) + \\ & + (\gamma_{\text{diss}} N_{\omega_0} + \gamma_{\text{pump}}) \left(\hat{\sigma}^+ \hat{\rho} \hat{\sigma} - \frac{1}{2} \hat{\sigma} \hat{\sigma}^+ \hat{\rho} - \frac{1}{2} \hat{\rho} \hat{\sigma} \hat{\sigma}^+ \right) + \frac{\gamma_{\text{deph}}}{2} (\hat{\sigma}_z \hat{\rho} \hat{\sigma}_z - \hat{\rho}) \end{aligned}$$

где γ_{diss} и γ_{deph} - скорости диссипации и дефазировки соответственно, введённые ранее, а также добавлена γ_{pump} , которую называют скоростью некогерентной накачки ДУС каким-то внешним полем.

7.1.2 Уравнения Блоха

используются в оптике, ниже выведены, позже сюда перекину.

формулировка**области применимости**

(пока точно не знаю)

иногда встречается и что-то с этим нужно делать.

пока минимально въехал в него.

7.2 Теория линейного отклика Кубо**обзор**

(глазков уже про это говорил)

7.3 Запаздывающая, причинная и опережающая функции Грина**7.4 рассеяние электронов на примесях**

Вывод кинетического уравнения для электронов, рассеивающихся на примесях

7.5 Кинетика ферми-жидкости

Обсудим подробно кинетику ферми-жидкости.

7.5.1 модель ферми жидкости

(пока это не так нужно знать)

основы ферми-жидкости

(тут теория на пару страниц, которая пока опущена)

итоговые свойства ферми-жидкости

Большая часть возбуждений в ферми-жидкости - квазичастицы имеет точно такой же спектр и динамику, как и в невзаимодействующей системе.

Кроме того, благодаря взаимодействию могут появиться коллективные моды плазменных или нуль-звуковых колебаний.

Появление коллективных мод и есть основной качественный эффект, к которому приводит взаимодействие.

кинетическое уравнение для ферми-жидкости

(левитов -шитов гл 8. пропишу кст и в статфизе это)

Выражение

$$H \equiv \varepsilon(\mathbf{p}, \delta n) = \varepsilon^{(0)}(\mathbf{p}) + \int f(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \delta n(\mathbf{p}', \mathbf{r}) \frac{d^3 p'}{(2\pi)^3}$$

есть гамильтониан H одной квазичастицы, движущейся в самосогласованном поле других квазичастиц.

Динамика квазичастицы описывается уравнением Гамильтона $\partial n / \partial t = \{H, n\}$, где $\{\dots\} = [\partial / \partial \mathbf{r}, \partial / \partial \mathbf{p}]$ - скобки Пуассона.

Вычисляя скобки Пуассона с этим гамильтонианом, получаем кинетическое уравнение теории ферми-жидкости:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial n}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial \varepsilon}{\partial \mathbf{p}} - \frac{\partial n}{\partial \mathbf{p}} \frac{\partial \varepsilon}{\partial \mathbf{r}} = 0$$

Рассмотрим колебания системы, отвечающие малым отклонениям от равновесия.

Для этого представим функцию распределения в виде $n = n_0 + \delta n$ и линеаризуем кинетическое уравнение по δn .

Получим

$$\frac{\partial \delta n}{\partial t} + \frac{\partial \delta n}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial \varepsilon^{(0)}}{\partial \mathbf{p}} - \frac{\partial \delta \varepsilon}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial n_0}{\partial \mathbf{p}} = 0$$

где $\delta \varepsilon$ - функционал Ландау, по определению имеющий вид $\delta \varepsilon = \int f(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \delta n(\mathbf{p}', \mathbf{r}) \frac{d^3 p'}{(2\pi)^3}$.

Нас интересуют решения, зависящие от времени и координат как $e^{-i\omega t + i\mathbf{k}\mathbf{r}}$.

нормальное смещение ферми-поверхности

Нетрудно показать, что все решения δn имеют δ -функциональную зависимость от $|\mathbf{p}|$ и локализованы на ферми-поверхности $|\mathbf{p}| = p_0$.

Поэтому оказывается удобным использовать в качестве независимой переменной функцию единичного вектора \mathbf{n} на ферми-поверхности:

$$u(\mathbf{n}) = \int \delta n(\mathbf{p}) d|\mathbf{p}|$$

где интеграл берется вдоль луча $\mathbf{p} \parallel \mathbf{n}$.

Величина $u(\mathbf{n})$ имеет смысл нормального смещения ферми-поверхности в точке $p_0 \mathbf{n}$.

Из кинетического уравнения можно получить уравнение для $u(\mathbf{n})$, которое имеет следующий вид:

$$(\omega - \mathbf{k}\mathbf{v})u(\mathbf{n}) = \mathbf{k}\mathbf{v} \int F(\mathbf{n}, \mathbf{n}') u(\mathbf{n}') \frac{d\mathbf{n}'}{4\pi}$$

где $\mathbf{v} = v_F \mathbf{n}$, а функция F связана с функцией f в функционале Ландау (8.2) следующим образом:

$$F(\mathbf{n}, \mathbf{n}') = \nu_0 f(\mathbf{p}, \mathbf{p}')|_{|\mathbf{p}|=|\mathbf{p}'|=p_0},$$

где ν_0 - плотность состояний с одной проекцией спина.

квазичастичные и коллективные решения: обзор

Полученное соотношение

$$(\omega - \mathbf{k}\mathbf{v})u(\mathbf{n}) = \mathbf{k}\mathbf{v} \int F(\mathbf{n}, \mathbf{n}') u(\mathbf{n}') \frac{d\mathbf{n}'}{4\pi}$$

следует рассматривать, как уравнение на собственные значения $\omega(\mathbf{k})$.

Оно имеет решения двух типов: квазичастичные и коллективные.

Для квазичастичных решений связь ω и \mathbf{k} есть $\omega = \mathbf{k}\mathbf{v}$, а соответствующая функция $u(\mathbf{n})$ описывает частицу с определенным направлением скорости \mathbf{v} .

Решения другого типа описывают коллективные моды колебаний ферми-жидкости, или так называемый нулевой звук.

квазичастичные решения

Из-за этого функция $u(\mathbf{n})$ на ферми-поверхности имеет сингулярный характер:

$$u(\mathbf{n}') = \delta^{(2)}(\mathbf{n}' - \mathbf{n}) + u_{\text{reg}}(\mathbf{n}')$$

Кроме δ -функции, локализованной в точке $\mathbf{n} = \mathbf{v}/|\mathbf{v}|$ ферми-поверхности, выражение (8.9) содержит $u_{\text{reg}}(\mathbf{n})$ - более плавную функцию, обычно имеющую полюсы при $\mathbf{k}\mathbf{v} = \omega$.

нулевой звук - локальное и изотропное взаимодействие: итоговые свойства и обзор

закон дисперсии нулевого звука оказывается линейным:

$$\omega_0(\mathbf{k}) = s(F_0) v_F |\mathbf{k}|.$$

распространение нуль-звука и динамика отдельных квазичастиц «развязаны», вследствие чего нуль-звуковая мода оказывается незатухающей.

Более точное микроскопическое рассмотрение показывает, что эти результаты справедливы лишь при не слишком больших \mathbf{k} .

Обычно законы дисперсии коллективных мод в ферми-жидкости имеют точку окончания k_{max} , в которой происходит слияние с квазичастичным спектром.

Коллективные моды в ферми-жидкости могут затрагивать не только распределение плотности частиц, но и поляризацию спина. В этом случае говорят о спиновых волнах.

нулевой звук - локальное и изотропное взаимодействие: вывод

(добавлю потом от лл т9 теорию)

необходимо решить уравнение

$$(\omega - \mathbf{k}\mathbf{v})u(\mathbf{n}) = \mathbf{k}\mathbf{v} \int F(\mathbf{n}, \mathbf{n}') u(\mathbf{n}') \frac{d\mathbf{n}'}{4\pi}$$

Рассмотрим простейший случай, когда взаимодействие локально и изотропно, т.е. функция F есть просто константа: $F(\mathbf{n}, \mathbf{n}') = F_0$.

Примером системы с функцией Ландау подобного вида является жидкий ^3He .

В этом случае, ввиду симметрии задачи, функция $u(\mathbf{n})$ зависит только от угла θ между векторами \mathbf{n} и \mathbf{k} .

Поэтому исходное уравнение принимает вид

$$(s - \cos \theta)u(\theta) = \frac{F_0}{2} \cos \theta \int u(\theta') d\theta',$$

где $s = \frac{\omega}{v_F |\mathbf{k}|}$.

????? Решение этого уравнения есть $u(\mathbf{n}) = A \cos \theta / (s - \cos \theta)$, где A - произвольная константа.

???? тут место, в котором нужно сесть и проделать это!!!!

Подставляя это решение, находим

$$\frac{s}{2} \ln \frac{s+1}{s-1} - 1 = \frac{1}{F_0}$$

При любом взаимодействии отталкивания (т. е. при $F_0 > 0$) это уравнение имеет ровно одно вещественное решение $s > 1$ и, таким образом, определяет функцию $s(F_0)$.

Поэтому закон дисперсии нулевого звука оказывается линейным:

$$\omega_0(\mathbf{k}) = s(F_0) v_F |\mathbf{k}|.$$

Поскольку $s(F_0) > 1$, частота $\omega_0(\mathbf{k})$ при любом \mathbf{k} лежит выше границы квазичастичного спектра: $\omega_0(\mathbf{k}) > v_F |\mathbf{k}|$.

Это означает, что распространение нуль-звука и динамика отдельных квазичастиц «развязаны», вследствие чего нуль-звуковая мода оказывается незатухающей.

плазменные колебания - при дальнотдействующих взаимодействиях: обзор

Посмотрим, как видоизменяются коллективные моды в металле, где взаимодействие между частицами кулоновское, т.е. дальнотдействующее.

В этом случае вместо нулевого звука возникают так называемые плазменные колебания.

Запишем кинетическое уравнение $\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial n}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial \varepsilon}{\partial \mathbf{p}} - \frac{\partial n}{\partial \mathbf{p}} \frac{\partial \varepsilon}{\partial \mathbf{r}} = 0$ с учетом силы, возникающей благодаря электрическому полю $\mathbf{E} = -\nabla \Phi$, где

$$\Phi(\mathbf{r}) = e \int \left[\int n(\mathbf{p}, \mathbf{r}') \frac{d^3 \mathbf{p}}{(2\pi)^3} - n_0 \right] \frac{d^3 \mathbf{r}'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|},$$

получаем

$$\frac{\partial n}{\partial t} + (\mathbf{v} \nabla_{\mathbf{r}}) n + e (\mathbf{E} \nabla_{\mathbf{p}}) n = 0$$

и n_0 - плотность фонового положительного заряда.

Как и выше, линеаризуем уравнение и перейдем в импульсное представление.

Получающиеся уравнения оказываются точно такими же, как и в случае нулевого звука, с точностью до замены $F_0 \rightarrow 4\pi e^2 \nu / \mathbf{k}^2$, где $\nu = 2\nu_0$ - плотность состояний с учетом спина.

???? Это происходит потому, что полученное кинетическое уравнение, если выразить в нем электрическое поле через плотность частиц, приобретает такую же форму, как кинетическое уравнение ферми-жидкости с нелокальным функционалом Ландау:

$$\delta\varepsilon(\mathbf{r}) = \iint \frac{e^2 \delta n(\mathbf{p}, \mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \frac{d^3 \mathbf{r}' d^3 \mathbf{p}}{(2\pi)^3}$$

Как и в случае изотропного взаимодействия, энергия зависит только от полной плотности частиц.

Поэтому и угловая зависимость смещений ферми-поверхности, и дисперсионное уравнение выглядят точно так же, как для нуль-звука:

$$\frac{\omega}{2v_F |\mathbf{k}|} \ln \frac{\omega + v_F |\mathbf{k}|}{\omega - v_F |\mathbf{k}|} - 1 = \frac{\mathbf{k}^2}{4\pi e^2 \nu}$$

Частота $\omega(\mathbf{k})$, определяемая из уравнения (8.14), остается конечной при малых \mathbf{k} : $\omega_0 \equiv \omega(\mathbf{k} \rightarrow 0) = (4\pi n e^2 / m)^{1/2}$, что совпадает с известным классическим результатом для плазменной частоты.

Подробнее закон дисперсии плазменных волн будет рассмотрен в задаче 44.

приближение случайных фаз - квантование динамики ферми-жидкости: обзор

Обсудим теперь, как можно проквантовать динамику ферми-жидкости, используя гамильтонов формализм.

Для этого потребуется ввести операторы электрон-дырочных пар, удовлетворяющие бозонным коммутационным соотношениям.

Гамильтониан ферми-жидкости

$$\widehat{\mathcal{H}}_0 = \sum_{\mathbf{p}, \sigma} \xi(\mathbf{p}) a_{\mathbf{p}, \sigma}^+ a_{\mathbf{p}, \sigma}, \quad \widehat{\mathcal{H}}_{\text{int}} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}},$$

записанный через такие операторы, содержит квадратичные члены, а также члены более высокого порядка, которыми можно пренебречь, если энергия рассматриваемых возбуждений мала по сравнению с E_F .

Динамику, определяемую этим квадратичным гамильтонианом, можно исследовать точно и установить ее эквивалентность кинетическому уравнению ферми-жидкости.

Возможность описать систему взаимодействующих фермионов с помощью эквивалентного бозонного гамильтониана имеет разнообразные интересные применения.

Одним из них является так называемый метод бозонизации, который мы рассмотрим где-то дальше.

Как и теория ферми-жидкости Ландау, метод бозе-операторов электрон-дырочных пар основывается на предположении, что функция распределения по импульсам имеет такой же вид, как и для свободных частиц, т.е. что ферми-поверхность не разрушается взаимодействием.

Чтобы выяснить, как взаимодействие меняет характер возбуждений, мы приведем гамильтониан ферми жидкости к виду, содержащему операторы рождения и уничтожения пар.

При этом будет использовано так называемое приближение случайных фаз Бома и Пайнса, впервые введенное при рассмотрении плазменных колебаний в вырожденном электронном газе.

В рамках этого приближения коммутационные соотношения для операторов пар сильно упрощаются.

С формальной точки зрения, рассматриваемый здесь метод является корректным в пределе высокой плотности, когда взаимодействие можно считать слабым.

приближение случайных фаз: вывод

(тут теории много, и это не нужно пока что)

Для простоты изложения будем считать фермионы бесспиновыми.

При необходимости, восстановить спиновую зависимость в окончательных выражениях можно без особого труда.

Введем бозе-операторы $c_{\mathbf{p},\mathbf{k}}, c_{\mathbf{p},\mathbf{k}}^+$ электрон-дырочных пар следующим образом:

$$c_{\mathbf{p},\mathbf{k}} = a_{\mathbf{p}}^+ a_{\mathbf{p}+\mathbf{k}}, \quad c_{\mathbf{p},\mathbf{k}}^+ = a_{\mathbf{p}+\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{p}}, \quad \text{где } |\mathbf{p}| < p_0, |\mathbf{p} + \mathbf{k}| > p_0$$

Обратим внимание читателя на ограничение, наложенное на импульсы \mathbf{p} и \mathbf{k} .

Оно выбрано так, чтобы при действии оператором $c_{\mathbf{p},\mathbf{k}}^+$ на основное состояние невзаимодействующей системы всегда рождалась ровно одна пара частица-дырка, а при действии оператором $c_{\mathbf{p},\mathbf{k}}$ на любое возбужденное состояние число пар всегда уменьшалось.

Условия $|\mathbf{p}| < p_0$ и $|\mathbf{p} + \mathbf{k}| > p_0$, при фиксированном \mathbf{k} определяют подмножество ферми-сферы, имеющее в сечении серповидную форму.

(тут рисунок двух пересекающихся сфер, потом вставлю, если он правда нужен)

Мы будем обозначать эту область R_k и записывать ограничение (8).

15) на \mathbf{p} и \mathbf{k} в виде $\mathbf{p} \in R_k$ Стратегия наша теперь состоит в том, чтобы представить гамильтониан системы в виде выражения, квадратичного по операторам $c_{\mathbf{p},\mathbf{k}}, c_{\mathbf{p},\mathbf{k}}^+$, и показать, что эти операторы подчиняются обычным бозевским коммутационным соотношениям.

При этом интересующая нас задача сведется к задаче о невзаимодействующих осцилляторах.

Хотя такое преобразование, разумеется, является приближенным, выясняется, что неточность допускается только для сильно возбужденных состояний, в то время как состояния с относительно небольшим количеством электрон-дырочных пар описываются совершенно правильно.

Начнем с оператора плотности частиц и рассмотрим приближенное выражение для гармоник плотности:

$$\tilde{\rho}_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{p} \in R_k} (c_{\mathbf{p},\mathbf{k}} + c_{-\mathbf{p},-\mathbf{k}}^+)$$

Заметим, что наложенное условие $\mathbf{p} \in R_k$ не нарушает вещественности оператора плотности $\tilde{\rho}_{\mathbf{k}} = \tilde{\rho}_{-\mathbf{k}}^+$ Смысл приближения (8).

16) состоит в том, что из точного выражения $\rho_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{p}} a_{\mathbf{p}}^+ a_{\mathbf{p}+\mathbf{k}}$ исключены матричные элементы, соответствующие «чересчур многочастичным» процессам.

Говоря более точно, мы отбрасываем все слагаемые $a_{\mathbf{p}}^+ a_{\mathbf{p}+\mathbf{k}}$, дающие нуль при применении к любому состоянию с ровно одной электрон-дырочной парой, а также к основному состоянию невзаимодействующей системы.

Подставим выражение (8).

16) в гамильтониан (8.1). Получающийся при этом приближенный гамильтониан совпадает с исходным гамильтонианом на состояниях, содержащих небольшое количество пар.

Отличие между приближенным и точным гамильтонианами появляется только для достаточно сильно возбужденных состояний.

Чтобы в этом убедиться, рассмотрим коммутационные соотношения получившегося гамильтониана $\widehat{\mathcal{H}}_{\text{int}} = (1/2) \sum_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{k}} \tilde{\rho}_{\mathbf{k}} \tilde{\rho}_{-\mathbf{k}}$ с операторами рождения и уничтожения пар $c_{\mathbf{p},\mathbf{k}}^+, c_{\mathbf{p},\mathbf{k}}$. Коммутатор $[\widehat{\mathcal{H}}_{\text{int}}, c_{\mathbf{p},\mathbf{k}}]$ описывает динамику флуктуации плотности (8.16).

Выразим операторы $\tilde{\rho}_{\mathbf{k}}, c_{\mathbf{p},\mathbf{k}}^+$ и $c_{\mathbf{p},\mathbf{k}}$ через фермиевские операторы, согласно (8.15), (8.16), подставим в интересующий нас коммутатор, и вычислим его, пользуясь фермионными коммутационными соотношениями.

Мы не будем выписывать результат явно, а заметим лишь, что поскольку оператор $\widehat{\mathcal{H}}_{\text{int}}$ 4-го порядка по фермиевским операторам а $c_{\mathbf{p},\mathbf{k}}^+$ и $c_{\mathbf{p},\mathbf{k}}$ — 2-го, результат будет содержать члены 2-го и 4-го порядка по $a_{\mathbf{p}}, a_{\mathbf{p}}^+$

Исключим из коммутатора все члены, содержащие операторы пар с $\mathbf{k}' \neq \mathbf{k}$. Эти члены либо не сохраняют число пар, либо описывают одновременные переходы с участием нескольких пар ⁵. Получающееся приближенное выражение для коммутатора имеет вид

$$[\widehat{\mathcal{H}}_{\text{int}}, c_{\mathbf{p},\mathbf{k}}] = -V_{\mathbf{k}} \tilde{\rho}_{\mathbf{k}}, \quad [\widehat{\mathcal{H}}_{\text{int}}, c_{\mathbf{p},\mathbf{k}}^+] = V_{\mathbf{k}} \tilde{\rho}_{\mathbf{k}}^+$$

Физическим основанием для процедуры, примененной выше к оператору плотности и к коммутаторам $[\widehat{\mathcal{H}}_{\text{int}}, c_{\mathbf{p},\mathbf{k}}]$, является наблюдение, заключающееся в том, что время жизни пары с малой энергией становится очень большим при уменьшении энергии.

Поэтому при рассмотрении коммутаторов законно пренебречь процессами, не сохраняющими число пар и приводящими к превращению одной пары в несколько.

коммутаторы $c_{\mathbf{p},\mathbf{k}}$

Рассмотрим теперь коммутаторы операторов $c_{\mathbf{p},\mathbf{k}}$ и $c_{\mathbf{p}',\mathbf{k}}^+$. Используя определение (8.15), получаем

$$[c_{\mathbf{p},\mathbf{k}}, c_{\mathbf{p}',\mathbf{k}'}^+] = \delta_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} a_{\mathbf{p}'+\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{p}+\mathbf{k}} + \delta_{\mathbf{p}'+\mathbf{k}', \mathbf{p}+\mathbf{k}} a_{\mathbf{p}}^+ a_{\mathbf{p}'}$$

причем $\mathbf{p} \in R_{\mathbf{k}}, \mathbf{p}' \in R_{\mathbf{k}'}$. Применяя приближение случайных фаз, необходимо выделить в правой части (8.

18) члены, не создающие новых пар при действии на основное состояние или на состояние с уже имеющимся небольшим количеством пар.

Это достигается заменой правой части (8.

18) на среднее, взятое по основному состоянию.

В результате коммутатор $[c_{\mathbf{p},\mathbf{k}}, c_{\mathbf{p}',\mathbf{k}'}^+]$ оказывается c -числом:

$$[c_{\mathbf{p},\mathbf{k}}, c_{\mathbf{p}',\mathbf{k}'}^+] = \delta_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}, \quad [c_{\mathbf{p},\mathbf{k}}, c_{\mathbf{p}',\mathbf{k}'}] = 0$$

(Второй коммутатор в (8.

19) получается аналогично.

) Таким образом, мы установили, что операторы рождения пар удовлетворяют бозевским коммутационным соотношениям.

Отметим, что найденные выше коммутаторы (8.

17) могут быть получены непосредственно из (8.

19) и найденного выше выражения $\widehat{\mathcal{H}}_{\text{int}} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{k}} \tilde{\rho}_{\mathbf{k}} \tilde{\rho}_{-\mathbf{k}}$. Таким образом, приближение случайных фаз оказывается самосогласованным.

Займемся теперь оператором кинетической энергии $\widehat{\mathcal{H}}_0 = \sum_{\mathbf{p}} (p^2/2m) a_{\mathbf{p}}^+ a_{\mathbf{p}}$. Его коммутаторы с операторами рождения и уничтожения пар нетрудно вычислить точно:

$$[\widehat{\mathcal{H}}_0, c_{\mathbf{p},\mathbf{k}}^+] = \omega_{\mathbf{p},\mathbf{k}} c_{\mathbf{p},\mathbf{k}}^+, \quad [\widehat{\mathcal{H}}_0, c_{\mathbf{p},\mathbf{k}}] = -\omega_{\mathbf{p},\mathbf{k}} c_{\mathbf{p},\mathbf{k}}$$

где $\omega_{\mathbf{p},\mathbf{k}} = (\mathbf{p} + \mathbf{k})^2/2m - \mathbf{p}^2/2m$. Попытаемся представить оператор кинетической энергии через операторы пар $c_{\mathbf{p},\mathbf{k}}^+$ и $c_{\mathbf{p},\mathbf{k}}$ таким образом, чтобы это представление обеспечивало правильные коммутационные соотношения (8.

20).

Для этого достаточно просто взять сумму по \mathbf{p} и \mathbf{k} от $\omega_{\mathbf{p},\mathbf{k}} c_{\mathbf{p},\mathbf{k}}^+ c_{\mathbf{p},\mathbf{k}}$. Заметим, что условие $\mathbf{p} \in R_k$ обеспечивает положительность $\omega_{\mathbf{p},\mathbf{k}}$.

Вследствие всего сказанного выше, гамильтониан системы можно представить в следующей эквивалентной форме:

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{RPA}} = \sum_{\mathbf{k}} \left(\sum_{\mathbf{p} \in R_k} \omega_{\mathbf{p},\mathbf{k}} c_{\mathbf{p},\mathbf{k}}^+ c_{\mathbf{p},\mathbf{k}} + \frac{1}{2} V_{\mathbf{k}} \tilde{\rho}_{\mathbf{k}} \tilde{\rho}_{-\mathbf{k}} \right)$$

Это выражение квадратично по бозе-операторам $c_{\mathbf{p},\mathbf{k}}$ и $c_{\mathbf{p},\mathbf{k}}^+$ и поэтому его изучение оказывается весьма простой задачей.

Удобно перейти к каноническим операторам координат и импульсов осциллято- ров:

$$\begin{aligned} \varphi_{\mathbf{p},\mathbf{k}} &\equiv \varphi_{-\mathbf{p},-\mathbf{k}}^+ = (2\omega_{\mathbf{p},\mathbf{k}})^{-1/2} (c_{\mathbf{p},\mathbf{k}} + c_{-\mathbf{p},-\mathbf{k}}^+) \\ \pi_{\mathbf{p},\mathbf{k}} &\equiv \pi_{-\mathbf{p},-\mathbf{k}}^+ = i \left(\frac{1}{2} \omega_{\mathbf{p},\mathbf{k}} \right)^{1/2} (c_{\mathbf{p},\mathbf{k}}^+ - c_{-\mathbf{p},-\mathbf{k}}) \end{aligned}$$

В представлении осцилляторов оператор кинетической энергии есть сумма невзаимодействующих осцилляторов ⁶:

$$\hat{\mathcal{H}}_0 = \sum_{\mathbf{k}; \mathbf{p} \in R_k} \frac{1}{2} (\pi_{\mathbf{p},\mathbf{k}}^+ \pi_{\mathbf{p},\mathbf{k}} + \omega_{\mathbf{p},\mathbf{k}}^2 \varphi_{\mathbf{p},\mathbf{k}}^+ \varphi_{\mathbf{p},\mathbf{k}})$$

Взаимодействие в этом представлении записывается так:

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{int}} = \sum_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{k}} \left(\sum_{\mathbf{p} \in R_k} \omega_{\mathbf{p},\mathbf{k}}^{1/2} \varphi_{\mathbf{p},\mathbf{k}}^+ \right) \left(\sum_{\mathbf{p}' \in R_k} \omega_{\mathbf{p}',\mathbf{k}}^{1/2} \varphi_{\mathbf{p}',\mathbf{k}} \right)$$

Теперь можно диагонализировать гамильтониан $\hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{\mathcal{H}}_{\text{int}}$ с помощью канонического преобразования и найти нормальные моды колебаний системы.

Получающийся спектр частот нормальных колебаний состоит из двух компонент (рис. 8.

2).

Первая компонента - непрерывный спектр $\omega = \omega_{\mathbf{p},\mathbf{k}}$, совпадающий со спектром невзаимодействующей системы.

Вторая компонента - коллективная мода с законом дисперсии $\omega(\mathbf{k})$, определяемым из уравнения

$$1 = V_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{p} \in R_k} \frac{2\omega_{\mathbf{p},\mathbf{k}}}{\omega^2 - \omega_{\mathbf{p},\mathbf{k}}^2}$$

Это выражение справедливо для бесспиновых частиц.

В случае частиц со спином 1/2, суммирование по спинам приводит к дополнительному множителю 2 в правой части (8.

26).

В задаче 44 будет показано, что при малых $|\mathbf{k}| \ll p_0$ выражение (8.

26) тождественно дисперсионному соотношению для коллективных мод, полученному из кинетического уравнения ферми-жидкости (8.

7).

В случае кулоновского взаимодействия, $V_{\mathbf{k}} = 4\pi e^2/\mathbf{k}^2$, коллективные возбуждения представляют собой плазменные волны, имеющие конечную частоту $\omega_0 = (4\pi e^2 n/m)^{1/2}$ при $\mathbf{k} \rightarrow 0$.

Плазменные колебания существуют в конечном интервале $0 \leq |\mathbf{k}| < k_{\max}$, причем их частота выше верхней границы непрерывного спектра.

При $|\mathbf{k}| \geq k_{\max} \geq (4\pi e^2 \nu)^{1/2}$ ветвь плазменных колебаний вливается в непрерывный спектр (см.

задачу 44).

В этой области частота ω , определяемая из дисперсионного уравнения (8.

26), оказывается комплексной, т.

е.

колебания приобретают конечное затухание.

Коллективные возбуждения, полученные в приближении случайных фаз, оказываются такими же, как в теории ферми-жидкости Ландау.

Некоторое отличие имеется только в поведении, предсказываемом в области больших $|\mathbf{k}| > k_{\max}$, где теория ферми-жидкости теряет применимость, поскольку $1/k_{\max}$ - это размер квазичастицы.

Если взаимодействие слабое, то приближение случайных фаз дает правильный ответ даже при $|\mathbf{k}| \geq k_{\max}$.

Однако, приближение случайных фаз, основывающееся на гамильтониане электрон-дырочных пар, неприменимо в случае сильного взаимодействия.

А теория ферми-жидкости, полученная весьма общим феноменологическим образом, имеет смысл и при сильном взаимодействии, и утверждает, что при $|\mathbf{k}| \leq k_{\max}$ можно пользоваться квадратичным гамильтонианом пар $\hat{\mathcal{H}}_{\text{RPA}}$ с перенормированными константами, которые определяются функцией Ландау.

Таким образом, пертурбативное приближение случайных фаз и феноменологическая теория ферми-жидкости прекрасно дополняют друг друга.

7.5.2 Условия и скорость нуль-звука

задача 15 дз, мб Бурмистров, задача 10

ИТОГОВЫЕ УСЛОВИЯ И ВЕЛИЧИНЫ

ВВЕДЕНИЕ

Неравновесные состояния ферми-жидкости описываются функцией распределения квазичастиц, зависящей от координат, импульсов и времени.

При нулевой или достаточно низкой температуре столкновения квазичастиц настолько редки, что ими можно полностью пренебречь.

Пользуясь кинетическим уравнением для функции распределения, определить условие, когда возможно распространение волн бесстолкновительного нуль-звука, и его скорость.

Считать, что функция Ландау для взаимодействия квазичастиц не зависит от импульсов квазичастиц.

В отсутствие столкновений между частицами справедлива теорема Лиувилля о тождественном обращении в нуль полной производной по времени от функции распределения

$$\frac{dn}{dt} = \frac{\partial n}{\partial t} + \{H, n\} = 0$$

условия возникновения нуль-звука

условия возникновения нуль-звука имеют вид:

(??)

действительно.

кинетическое уравнение для ферми жидкости

Стандартный вид кинетического уравнения для ферми жидкости есть уравнение на $\nu(\theta)$:

$$(\omega - \mathbf{k}\mathbf{v})\nu(\theta) = \mathbf{k}\mathbf{v}F_0 \int \nu(\theta') \frac{d\Omega_{\theta'}}{4\pi},$$

где $\nu(\theta)$ есть член в $\delta n(\mathbf{p}) = n'_0(\varepsilon)\nu(\theta)$ Здесь

$$F_0 = \frac{p_F^2}{\pi^2 \hbar^3 v_F} f_0 = \frac{m^* p_F}{\pi^2 \hbar^3} f_0$$

безразмерный параметр Ландау, θ - угол между векторами \mathbf{v} и \mathbf{k} , $m^* p_F / \pi^2 \hbar^3$ - плотность состояний и $d\Omega = 2\pi \sin \theta d\theta$ - элемент телесного угла.

Покажем переход к нему из исходного вида уравнения Больцмана.

Рассмотрим малые отклонения функции распределения $\delta n = n - n_0$ от равновесной функции n_0 .

Тогда также изменяется и энергия квазичастиц $H = H(\mathbf{p}, \mathbf{r})$

$$n = n_0(\mathbf{p}) + \delta n(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) \quad \text{и} \quad H = \varepsilon_0(\mathbf{p}) + \delta \varepsilon[n(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)].$$

В линейном приближении по δn и $\delta \varepsilon$ из уравнения Лиувилля найдем

$$\frac{\partial \delta n}{\partial t} + \frac{\partial \delta n}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial \varepsilon_0}{\partial \mathbf{p}} - \frac{\partial n_0}{\partial \mathbf{p}} \frac{\partial \delta \varepsilon}{\partial \mathbf{r}} = 0$$

Скорость квазичастиц равна $\mathbf{v} = \partial \varepsilon_0 / \partial \mathbf{p}$ и производная функции распределения имеет вид $\partial n_0 / \partial \mathbf{p} = \mathbf{v} \partial n_0 / \partial \varepsilon$.

Поэтому уравнение Лиувилля имеет вид:

$$\frac{\partial \delta n}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial \delta n}{\partial \mathbf{r}} - \mathbf{v} \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} \frac{\partial \delta \varepsilon}{\partial \mathbf{r}} = 0$$

Решение ищем в виде бегущей волны

$$\delta n(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = \delta n(\mathbf{p}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r} - i\omega t}$$

где \mathbf{k} - волновой вектор и ω - частота колебаний.

Подставим также изменение энергии квазичастиц через функцию взаимодействия $f(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$, ведь известно, что дается выражением

$$\delta \varepsilon = \int f(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \delta n(\mathbf{p}') e^{i\mathbf{k}\mathbf{r} - i\omega t} d\tau_{p'},$$

где $d\tau_{p'} = 2 \frac{d^3 p'}{(2\pi \hbar)^3}$.

Теперь кинетическое уравнение примет вид:

$$(\omega - \mathbf{k}\mathbf{v})\delta n(\mathbf{p}) = -(\mathbf{k}\mathbf{v}) \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} \int f(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \delta n(\mathbf{p}') d\tau_{p'}$$

Упростим его, положив $f(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = f_0 = \text{const}$ и температуру $T = 0$, тогда

$$(\omega - \mathbf{k}\mathbf{v})\delta n(\mathbf{p}) = -(\mathbf{k}\mathbf{v})\frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon}f_0 \int \delta n(\mathbf{p}') d\tau_{p'}$$

(место подумать)

Поскольку $n'_0(\varepsilon) = -\delta(p - p_F)/v_F$. поправка $\delta n(\mathbf{p})$ отлична от нуля только на поверхности Ферми. т.е. при $|\mathbf{p}| = p_F$ и $|v| = v_F$.

Из вида уравнения можно сказать, что решение имеет форму $\delta n(\mathbf{p}) = n'_0(\varepsilon)\nu(\theta)$, где θ - угол между векторами \mathbf{v} и \mathbf{k} , поэтому приходим к уравнению на $\nu(\theta)$:

$$(\omega - \mathbf{k}\mathbf{v})\nu(\theta) = \mathbf{k}\mathbf{v}F_0 \int \nu(\theta') \frac{d\Omega_{\theta'}}{4\pi},$$

Здесь

$$F_0 = \frac{p_F^2}{\pi^2 \hbar^3 v_F} f_0 = \frac{m^* p_F}{\pi^2 \hbar^3} f_0$$

это безразмерный параметр Ландау, $m^* p_F / \pi^2 \hbar^3$ - плотность состояний и $d\Omega = 2\pi \sin \theta d\theta$ - элемент телесного угла.

Далее введем $s = \frac{\omega}{v_F k}$ и запишем

$$\frac{\nu(\theta)}{F_0} = \frac{\cos \theta}{s - \cos \theta} \int \nu(\theta') \frac{d\Omega_{\theta'}}{4\pi}$$

выражение для параметра Ландау

оно имеет вид:

$$\frac{1}{F_0} = \frac{s}{2} \ln \frac{s+1}{s-1} - 1$$

Действительно.

Из условия самосогласования

$$\frac{1}{F_0} \int \nu(\theta) \frac{d\Omega_{\theta}}{4\pi} = \int \frac{\cos \theta}{s - \cos \theta} \frac{d\Omega_{\theta}}{4\pi} \left(\int \nu(\theta') \frac{d\Omega_{\theta'}}{4\pi} \right)$$

находим

$$\frac{1}{F_0} = \int_0^\pi \frac{\cos \theta}{s - \cos \theta} \frac{2\pi \sin \theta d\theta}{4\pi} = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \frac{x dx}{s - x}$$

и получаем

$$\frac{1}{F_0} = \frac{s}{2} \ln \frac{s+1}{s-1} - 1$$

спектр нуль-звука

спектр нуль-звука имеет вид:

???

$$\omega(k) = s(F_0) v_F k$$

находится спектр из анализа дисперсионного уравнения

$$\frac{1}{F_0} = \frac{s}{2} \ln \frac{s+1}{s-1} - 1$$

имеет действительные решения только при $F_0 > 0$, так как правая часть изменяется в пределах $(+\infty, 0)$ при изменении s от 1 до $+\infty$.

Таким образом, при $F_0 > 0$, что отвечает отталкиванию квазичастиц на ферми-поверхности, дисперсионное уравнение имеет одно действительное решение $s = s(F_0)$, которое соответствует незатухающей волне со звуковым спектром

$$\omega(k) = s(F_0) v_F k$$

Такие звуковые волны в ферми-жидкости называются бесстолкновительным звуком или нуль-звуком.

Если $F_0 \rightarrow +0$, то $s \rightarrow 1$.

Для $F_0 \gg 1$, $s \approx \sqrt{F_0/3}$.

Следовательно, незатухающие волновые процессы возможны только при условии, что скорость квазичастиц v_F не превышает фазовую скорость волны ω/k .

В жидком ^3He значение $F_0 = 10,8$ и скорость нуль-звука примерно 197 м/с.

В процессе распространения нуль-звука поверхность Ферми вытягивается в направлении распространения волны и сплющивается в противоположном направлении.

При $F_0 < 0$ действительных решений дисперсионного уравнения нет и моды колебаний ферми-поверхности - затухающие.

8 описание типичных явлений с помощью квантовой кинетики

(тут по идее заготовки квантовой кинетики, которые будут использоваться ниже в моделях)

8.1 квантовая кинетика фазовых переходов

см методичку максимова из списка литературы

8.1.1 (+)18 решение уравнения Линдблада двухуровневой системы (????)

задача 18 дз, хз, где решена

уравнение Линдблада при спонтанной эмиссии

Решим уравнение Линдблада для эволюции матрицы плотности двухуровневой системы, когда релаксационный член описывает потери на спонтанную эмиссию (естественная ширина спектральной линии).

Уравнение для матрицы плотности в виде квантового уравнения Лиувилля (уравнения фон Неймана)

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = [\hat{H}, \hat{\rho}]$$

является как мощным инструментом исследования функции распределения, так и источником противоречий.

сохранение энтропии

Убедимся в том, что согласно ему энтропия замкнутой квантовой системы $S = -\text{Sp}\{\hat{\rho} \ln \hat{\rho}\}$ сохраняется.

Прямым дифференцированием получаем $-\dot{S} = \text{Sp}\{\dot{\hat{\rho}} \ln \hat{\rho}\} + \text{Sp} \hat{\rho} \cdot$

Подставляя в первое слагаемое $\hat{\rho}$ из уравнения фон Неймана $\frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{H}, \hat{\rho}]$ и используя циклическую перестановку под знаком следа, получаем $\text{Sp}\{\hat{H}\hat{\rho} \ln \hat{\rho}\} - \text{Sp}\{\hat{\rho}\hat{H} \ln \hat{\rho}\} = 0$.

Второе слагаемое также равно нулю из-за нормировки матрицы плотности условием $\text{Sp} \hat{\rho} = 1$.

Таким образом, энтропия замкнутой системы не возрастает, $dS/dt = 0$, и она не сможет прийти к равновесию.

Выход из этого противоречия заключается в том, чтобы учесть, что замкнутых систем не бывает и рассмотреть открытую систему.

Открытая квантовая система взаимодействует с окружением (резервуаром).

Динамика открытой квантовой системы неэрмитова и описывается уравнением Линдблада:

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = [\hat{H}, \hat{\rho}] + \hat{\mathcal{L}} \hat{\rho}$$

Это уравнение описывает релаксацию системы к равновесному гиббсовскому состоянию.

Конкретный вид релаксационного оператора Линдблада $\hat{\mathcal{L}}$ зависит от характера взаимодействия системы и резервуара.

В отличие от уравнения фон Неймана, описывающего эрмитову динамику, уравнение Линдблада совместимо с началами термодинамики.

Оно позволяет объяснить релаксацию к распределению Гиббса $\exp\{(F - \hat{H})/T\}$, второе начало термодинамики (закон возрастания энтропии) и т.д.

уравнение Паули из правила Ферми

Дадим качественные соображения, на основе которых оно может быть получено.

Для того, чтобы описать релаксацию открытой квантовой системы, воспользуемся золотым правилом Ферми, вычисляющего вероятность перехода из состояния дискретного спектра в непрерывный.

Пусть в начальный момент времени открытая система S находилась в одном из возбужденных состояний $|S_i\rangle$, а резервуар R находился в равновесном состоянии.

Резервуар так велик, что содержит континуум мод и его спектр непрерывен.

Взаимодействие между системой и резервуаром имеет вид: $\hat{H}_{SR} = \lambda \hat{S} \hat{R}$, где λ - размерный параметр, а операторы \hat{S} и \hat{R} описывают систему и резервуар соответственно.

Тогда вероятность перехода из начального состояния системы и резервуара $|S_i, R_i\rangle$ с энергией системы E_i в конечное состояние $|S_f, R_f\rangle$ с энергией системы E_f и числом конечных состояний резервуара в интервале от ν_f до $\nu_f + d\nu_f$ дается выражением

$$dw_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle S_f, R_f | \hat{H}_{SR} | S_i, R_i \rangle \right|^2 \delta(E_i - E_f - \hbar\omega_{if}) d\nu_f$$

Мы считаем, что квант возбуждения системы $\hbar\omega_{if} = E_i - E_f$ перешел в резервуар.

Если теперь просуммировать по всем возможным конечным состояниям резервуара, которые имеют энергию $\hbar\omega_{if}$, то мы получим полную вероятность перехода в единицу времени системы из состояния $|S_i\rangle$ в состояние $|S_f\rangle$ вне зависимости от конечного состояния резервуара.

Без ограничения общности эта полная скорость перехода w_{fi} может быть представлена в виде $w_{fi} = \gamma_{if} |\langle f | \hat{S} | i \rangle|^2 \equiv \gamma_{if} |S_{fi}|^2$, где мы в явном виде выделили матричный элемент перехода одной только системы из состояния $|S_i\rangle$ в состояние $|S_f\rangle$.

Вся информация о резервуаре после усреднения по его степеням свободы содержится в γ_{if} .

По своему определению, величина вероятности перехода в единицу времени означает, что диагональный элемент матрицы плотности ρ_{ii} заселения состояния $|S_i\rangle$ меняется по

закону

$$\dot{\rho}_{ii} = -\gamma_{if} |\langle f | \hat{S} | i \rangle|^2 \rho_{ii}.$$

В то же время, вероятность заселенности ρ_{ff} состояния $|S_f\rangle$ будет меняться как

$$\dot{\rho}_{ff} = \gamma_{if} |\langle f | \hat{S} | i \rangle|^2 \rho_{ii},$$

поскольку суммарная вероятность должна сохраняться.

Полученный результат очевидным образом обобщается на динамику вероятностей заселенностей всех собственных состояний системы $|k\rangle$, когда их больше двух.

Собственные состояния определяются из уравнения Шредингера $\hat{H}_S |k\rangle = E_k |k\rangle$

Результирующая система уравнений имеет вид

$$\dot{\rho}_{k_1 k_1} = -\rho_{k_1 k_1} \sum_{k_2=1}^N \gamma_{k_1 k_2} |S_{k_1 k_2}|^2 + \sum_{k_2=1}^N \rho_{k_2 k_2} \gamma_{k_2 k_1} |S_{k_2 k_1}|^2, \quad \left[\sum_{k_1=1}^N \dot{\rho}_{k_1 k_1} = \frac{d}{dt} \sum_{k_1=1}^N \rho_{k_1 k_1} = 0 \right],$$

где учтены переходы между всеми собственными состояниями.

Полученная система уравнений называется уравнениями Паули.

Они описывают динамику диагональных элементов матрицы плотности.

Какова будет динамика недиагональных элементов матрицы плотности? Строгое рассмотрение показывает, что любой процесс перехода из одного собственного состояния в другое сопровождается затуханием недиагональных элементов.

При релаксации к равновесию каждый недиагональный элемент эволюционирует как

$$\dot{\rho}_{fi} = -\frac{1}{2} \left(\gamma_{fi} |\langle f | \hat{S} | i \rangle|^2 + \gamma_{if} |\langle i | \hat{S} | f \rangle|^2 \right) \rho_{fi}.$$

Если учесть переходы из каждого состояния в каждое, то получаем

$$\dot{\rho}_{k_1 k_2} = -\frac{1}{2} \sum_{k'} \left(\gamma_{k' k_1} |S_{k' k_1}|^2 + \gamma_{k' k_2} |S_{k' k_2}|^2 \right) \rho_{k_1 k_2}.$$

Два уравнения для диагональных и недиагональных элементов можно переписать в виде одного уравнения на матрицу плотности открытой системы:

$$\frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}] + \sum_k \frac{\gamma_k}{2} \left(2\hat{S}_k \hat{\rho} \hat{S}_k^+ - \hat{S}_k^+ \hat{S}_k \hat{\rho} - \hat{\rho} \hat{S}_k^+ \hat{S}_k \right)$$

где суммирование ведется по всевозможным парам собственных состояний $k = \{k_1, k_2\}$.

Такое уравнение называется уравнением Линдблада.

Его более строгий вывод показывает, что оно справедливо только при выполнении двух приближений: борновского и марковского.

Борновское приближение означает, что система не меняет состояние резервуара.

Марковское приближение означает, что мы можем описывать динамику системы локальным по времени уравнением.

Уравнение Линдблада является модельным и приближенным.

Его достоинством является то, что оно позволяет описать релаксацию открытой системы к равновесию и совместимо с началами термодинамики.

Его стандартный вид следующий:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{\rho}(t)}{\partial t} &= \frac{1}{i\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}] + \frac{1}{2} \sum_k \left([\hat{L}_k \hat{\rho}, \hat{L}_k^+] + [\hat{L}_k, \hat{\rho} \hat{L}_k^+] \right) \equiv \\ &\equiv \frac{1}{i\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}] + \frac{1}{2} \sum_k \left(2\hat{L}_k \hat{\rho} \hat{L}_k^+ - \hat{L}_k^+ \hat{L}_k \hat{\rho} - \hat{\rho} \hat{L}_k^+ \hat{L}_k \right) \end{aligned}$$

где \hat{L}_k - операторы Линдблада.

Уравнение Линдблада является наиболее общим уравнением, описывающим неунитарную эволюцию матрицы плотности открытой квантовой подсистемы.

Его еще называют квантовым марковским уравнением.

некогерентная накачка и спонтанное излучение

с) Рассмотрим некогерентную накачку в качестве линдбладана.

Рассмотрим атом как двухуровневую систему (ДУС).

В нашем случае роль резервуара выполняет континуум мод электромагнитного поля свободного пространства.

Гамильтониан ДУС с основным состоянием $|g\rangle$ с нулевой энергией и возбужденным состоянием $|e\rangle$ с энергией $\hbar\omega_0$ можно представить в виде $\hat{H}_S = \hbar\omega_0\hat{\sigma}^+\hat{\sigma}$, где оператор $\hat{\sigma}$ - понижающий оператор, $\hat{\sigma}|e\rangle = |g\rangle$, а оператор $\hat{\sigma}^+$ - повышающий оператор, $\hat{\sigma}^+|g\rangle = |e\rangle$. Используя в качестве операторов Линдблада \hat{L}_k операторы $\hat{\sigma}$ и $\hat{\sigma}^+$, можно получить следующее уравнение Линдблада для матрицы плотности ДУС:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = & -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}_S, \hat{\rho}] + \gamma_{\text{diss}} (1 + N_{\omega_0}) \left(\hat{\sigma} \hat{\rho} \hat{\sigma}^+ - \frac{1}{2} \hat{\sigma}^+ \hat{\sigma} \hat{\rho} - \frac{1}{2} \hat{\rho} \hat{\sigma}^+ \hat{\sigma} \right) + \\ & + \gamma_{\text{diss}} N_{\omega_0} \left(\hat{\sigma}^+ \hat{\rho} \hat{\sigma} - \frac{1}{2} \hat{\sigma} \hat{\sigma}^+ \hat{\rho} - \frac{1}{2} \hat{\rho} \hat{\sigma} \hat{\sigma}^+ \right) \end{aligned}$$

где $\gamma_{\text{diss}} = 4\omega_0^3 |\langle e|d|g\rangle|^2 / (3\hbar c^3)$ и $N_{\omega} = (\exp(\hbar\omega/T) - 1)^{-1}$.

Запишем это уравнение в базисе собственных состояний гамильтониана ДУС: $|e\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, $|g\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$, $\sigma = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $\sigma^+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$, $\hat{\rho} = \begin{pmatrix} \rho_{ee} & \rho_{eg} \\ \rho_{ge} & \rho_{gg} \end{pmatrix}$.

Проводя несложные матричные вычисления, получаем уравнения для диагональных и недиагональных элементов матрицы плотности ДУС:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_{ee}}{\partial t} &= -\gamma_{\text{diss}} (N_{\omega_0} + 1) \rho_{ee} + \gamma_{\text{diss}} N_{\omega_0} \rho_{gg}, & \frac{\partial \rho_{eg}}{\partial t} &= -i\omega_0 \rho_{eg} - \frac{\gamma_{\text{diss}} (2N_{\omega_0} + 1) \rho_{eg}}{2} \\ \frac{\partial \rho_{ge}}{\partial t} &= i\omega_0 \rho_{ge} - \frac{\gamma_{\text{diss}} (2N_{\omega_0} + 1) \rho_{ge}}{2}, & \frac{\partial \rho_{gg}}{\partial t} &= -\gamma_{\text{diss}} N_{\omega_0} \rho_{gg} + \gamma_{\text{diss}} (N_{\omega_0} + 1) \rho_{ee} \end{aligned}$$

Для диагональных элементов мы получили по существу кинетические уравнения, которые сохраняют полную вероятность $\rho_{ee} + \rho_{gg} = \text{const} = 1$, то есть след матрицы плотности сохраняется во все моменты времени.

Величины γ_{diss} и $\gamma_{\text{diss}} N_{\omega_0}$ являются аналогами коэффициентов Эйнштейна, относящихся к спонтанному и индуцированному переходам соответственно.

Видно, что в релаксацию вносят вклад как спонтанные, так и индуцированные процессы в то время как в накачку - только индуцированные переходы.

Таким образом, слагаемое, пропорциональное $\gamma_{\text{diss}} (N_{\omega_0} + 1)$, описывает релаксацию энергии в резервуар за счёт как спонтанных, так и индуцированных процессов, а пропорциональное $\gamma_{\text{diss}} N_{\omega_0}$ описывает накачку системы резервуаром только за счёт индуцированных процессов.

Решения уравнений для диагональных элементов с учетом их нормировки имеют простой вид:

$$\rho_{ee}(t) = \frac{N_{\omega_0}}{2N_{\omega_0} + 1} - C e^{-\gamma_{\text{diss}} (2N_{\omega_0} + 1)t}, \quad \rho_{gg}(t) = \frac{N_{\omega_0} + 1}{2N_{\omega_0} + 1} + C e^{-\gamma_{\text{diss}} (2N_{\omega_0} + 1)t},$$

где $C = \frac{N_{\omega_0}}{2N_{\omega_0} + 1} - \rho_{ee}(0) \equiv \rho_{gg}(0) - \frac{N_{\omega_0} + 1}{2N_{\omega_0} + 1}$.

Проиллюстрируем выполнение начал термодинамики.

У системы не существует интеграла движения, то есть оператора, который коммутирует одновременно с гамильтонианом \hat{H}_S и оператором взаимодействия системы с резервуаром.

Поэтому стационарным решением системы уравнений является распределение Гиббса:

$$\rho_{ee} = \frac{N_{\omega_0}}{2N_{\omega_0} + 1}, \quad \rho_{gg} = \frac{N_{\omega_0} + 1}{2N_{\omega_0} + 1}, \quad \frac{\rho_{ee}}{\rho_{gg}} = \frac{N_{\omega_0}}{N_{\omega_0} + 1} = \exp\left(-\frac{\hbar\omega_0}{T}\right)$$

Недиагональные элементы эволюционируют следующим образом:

$$\rho_{ge}(t) = \rho_{ge}(0)e^{i\omega_0 t}e^{-(\gamma_{\text{diss}}(2N_{\omega_0}+1)/2)t}, \quad \rho_{eg}(t) = \rho_{eg}(0)e^{-i\omega_0 t}e^{-(\gamma_{\text{diss}}(2N_{\omega_0}+1)/2)t}$$

то есть экспоненциально затухают.

Отметим, что иногда скорость релаксации энергии (диагональных элементов) называют скоростью продольной релаксации, а скорость затухания дипольного момента (недиагональных элементов) - скоростью поперечной релаксации.

Для рассматриваемого резервуара скорость продольной релаксации $\gamma_{\parallel} = \gamma_{\text{diss}}(2N_{\omega_0} + 1)$, а скорость поперечной релаксации $\gamma_{\perp} = \gamma_{\text{diss}}(2N_{\omega_0} + 1)/2$.

Отметим, что для рассматриваемого резервуара скорости поперечной и продольной релаксации относятся как один к двум.

Можно отметить, что для оптических переходов при комнатной температуре уравнение Линдблада может быть упрощено.

Так как энергия оптического кванта много больше комнатной температуры, то можно считать, что температура резервуара равна нулю.

Как следствие, $N_{\omega_0} = 0$ и имеют место только спонтанные процессы, отвечающие за релаксацию.

Уравнение Линдблада упрощается до

$$\frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}_S, \hat{\rho}] + \gamma_{\text{diss}} \left(\hat{\sigma} \hat{\rho} \hat{\sigma}^+ - \frac{1}{2} \hat{\sigma}^+ \hat{\sigma} \hat{\rho} - \frac{1}{2} \hat{\rho} \hat{\sigma}^+ \hat{\sigma} \right)$$

Таким образом, даже в отсутствие квантов возбуждения в резервуаре релаксация возбужденной системы (в данном случае двухуровневого атома) всё равно происходит.

Это связано с наличием нулевых колебаний энергии резервуара даже тогда, когда он находится при нулевой температуре.

В этом случае скорость продольной релаксации равна $\gamma_{11} = \gamma_{\text{diss}}$, а скорость поперечной релаксации $\gamma_{\perp} = \gamma_{\text{diss}}/2$.

Релаксация двухуровневого атома в дефазирующий резервуар

Ранее был рассмотрен пример гамильтониана взаимодействия с резервуаром, когда происходит релаксация энергии системы.

Однако в некоторых системах могут иметь место процессы, которые приводят только к сбою фазы системы но не меняют её энергию.

Такие процессы называют дефазировкой, или декогеренцией.

Скорость дефазировки может на несколько порядков превосходить скорость диссипации энергии.

Ниже приведен простейший пример резервуара, который приводит к сбою фазы системы, но не меняет её энергию.

Рассмотрим резервуар из гармонических осцилляторов с гамильтонианом $\hat{H}_R = \hbar \sum_k \omega_k \hat{a}_k^+ \hat{a}_k$.

Примем, что гамильтониан двухуровневой системы имеет обычный вид, а взаимодействие ДУС с таким резервуаром описывается гамильтонианом

$$\hat{H}_{SR} = \hbar \sum_k \gamma_k \hat{\sigma}_z (\hat{a}_k^+ + \hat{a}_k) \equiv \hbar \lambda \hat{S} \hat{R},$$

где $\hat{S} \equiv \hat{\sigma}_z = |e\rangle\langle e| - |g\rangle\langle g|$, $\hat{R} = \sum_k (\gamma_k/\lambda) (\hat{a}_k^+ + \hat{a}_k)$.

Этот гамильтониан описывает процесс поглощения и испускания кванта возбуждения резервуара таким образом, что энергия системы не меняется.

Иными словами, он описывает процесс упругого рассеяния возбуждения резервуара на системе.

Используя в качестве оператора Линдблада \hat{L}_k оператор $\hat{\sigma}_z$, получаем уравнение Линдблада:

$$\frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}_S, \hat{\rho}] + \frac{\gamma_{\text{deph}}}{2} \left(\hat{\sigma}_z \hat{\rho} \hat{\sigma}_z - \frac{1}{2} \hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_z \hat{\rho} - \frac{1}{2} \hat{\rho} \hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_z \right) = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}_S, \hat{\rho}] + \frac{\gamma_{\text{deph}}}{2} (\hat{\sigma}_z \hat{\rho} \hat{\sigma}_z - \hat{\rho})$$

поскольку $\hat{\sigma}_z^2 = \hat{I}$.

Отметим, что для подавляющего большинства оптических систем имеет место существенное превышение скорости дефазировки над скоростью релаксации энергии (в реальных системах это отношение может достигать пяти порядков).

Для компонент матрицы плотности уравнения запишутся так:

$$\frac{\partial \rho_{ee}}{\partial t} = 0, \quad \frac{\partial \rho_{gg}}{\partial t} = 0, \quad \frac{\partial \rho_{eg}}{\partial t} = -i\omega_0 \rho_{eg} - \gamma_{\text{deph}} \rho_{eg}, \quad \frac{\partial \rho_{ge}}{\partial t} = i\omega_0 \rho_{ge} - \gamma_{\text{deph}} \rho_{ge}$$

Отметим как важное свойство этих уравнений, что нет связи между диагональными элементами матрицы плотности.

Это и означает, что энергия системы остаётся постоянной,

$$\langle \hat{\sigma}_z \rangle \equiv \text{Sp} (\hat{\sigma}_z \hat{\rho}) = \rho_{ee} - \rho_{gg} = \text{const} = \langle \hat{\sigma}_z(0) \rangle.$$

Недиагональные же элементы матрицы плотности затухают экспоненциально.

Стационарной матрицей плотности будет

$$\hat{\rho} = \begin{pmatrix} \rho_{ee}(0) & 0 \\ 0 & \rho_{gg}(0) \end{pmatrix}.$$

Таким образом, дефазирующий резервуар приводит к занулению недиагональных матричных элементов, при сохранении диагональных.

Поэтому такой процесс называют и процессом дефазировки (есть только поперечная релаксация, но нет продольной).

Естественно, что в реальных системах присутствуют сразу оба вида релаксации, поэтому рассмотрение только одного дефазирующего резервуара всегда является приближением.

* лазеры: оптические уравнения Максвелла-Блоха

Выведем уравнение Максвелла-Блоха для одномодового лазера из уравнений Линдблада.

Рассмотрим динамику ДУС, взаимодействующей с классической монохроматической электромагнитной волной.

Впервые решение задачи о стационарном состоянии ДУС во внешнем монохроматическом поле было получено при помощи феноменологических оптических уравнений Блоха

$$\begin{aligned}\frac{d\langle\hat{\sigma}\rangle}{dt} &= -i\omega_0\langle\hat{\sigma}\rangle - \frac{i}{2}\Omega e^{-i\omega t}\langle\hat{\sigma}_z\rangle - \gamma_{\perp}\langle\hat{\sigma}\rangle, \\ \frac{d\langle\hat{\sigma}^+\rangle}{dt} &= i\omega_0\langle\hat{\sigma}^+\rangle + \frac{i}{2}\Omega e^{i\omega t}\langle\hat{\sigma}_z\rangle - \gamma_{\perp}\langle\hat{\sigma}^+\rangle, \\ \frac{d\langle\hat{\sigma}_z\rangle}{dt} &= i\Omega\{\langle\hat{\sigma}^+\rangle e^{-i\omega t} - \langle\hat{\sigma}\rangle e^{i\omega t}\} - \gamma_{\parallel}(\langle\hat{\sigma}_z\rangle + 1)\end{aligned}$$

где $\langle\ldots\rangle$ есть среднее значение операторов, ω - частота внешней монохроматической волны, $\Omega = (\mathbf{E}_0 \cdot \mathbf{d}_{eg})/\hbar$ - частота Раби, которая определяет взаимодействие ДУС с внешним переменным электрическим полем с амплитудой \mathbf{E}_0 , \mathbf{d}_{eg} - матричный элемент дипольного перехода ДУС, γ_{\parallel} - скорость продольной релаксации и γ_{\perp} - скорость поперечной релаксации, феноменологически введенные для описания процессов релаксации в ДУС.

В наших прежних обозначениях,

$$\langle\hat{\sigma}\rangle \equiv \text{Sp}(\hat{\rho}\hat{\sigma}) = \rho_{eg}$$

$$\langle\hat{\sigma}^+\rangle \equiv \text{Sp}(\hat{\rho}\hat{\sigma}^+) = \rho_{ge},$$

$$\langle\hat{\sigma}_z\rangle \equiv \text{Sp}(\hat{\rho}\hat{\sigma}_z) = \rho_{ee} - \rho_{gg}.$$

Применим уравнения Линдблада для вывода (обоснования) уравнений Блоха.

Наличие внешней монохроматической волны учтем добавлением дополнительного члена в гамильтониан ДУС, который описывает дипольное взаимодействие ДУС с внешним полем:

$$\hat{V} = -\hat{\mathbf{d}}\mathbf{E}(t) = -\mathbf{d}_{eg}(\hat{\sigma} + \hat{\sigma}^+)\mathbf{E}_0 \cos \omega t = -\mathbf{d}_{eg}(\hat{\sigma} + \hat{\sigma}^+)\mathbf{E}_0(e^{-i\omega t} + e^{i\omega t})/2.$$

В приближении вращающейся волны он превратится в

$$\hat{V} = -\frac{\mathbf{d}_{eg}\mathbf{E}_0}{2}(\hat{\sigma}^+e^{-i\omega t} + \hat{\sigma}e^{i\omega t}) = -\frac{\hbar\Omega}{2}(\hat{\sigma}^+e^{-i\omega t} + \hat{\sigma}e^{i\omega t}),$$

вклад взаимодействия в гамильтониан \hat{H}_S , который описывает дипольное взаимодействие ДУС с внешним полем.

В итоге получается гамильтониан системы $\hat{H}_S(t) = \hbar\omega_0\hat{\sigma}^+\hat{\sigma} - \frac{\hbar\Omega}{2}(\hat{\sigma}^+e^{-i\omega t} + \hat{\sigma}e^{i\omega t})$ и феноменологическое уравнение Линдблада

$$\begin{aligned}\frac{\partial\hat{\rho}}{\partial t} &= -\frac{i}{\hbar}[\hat{H}_S, \hat{\rho}] + \gamma_{\text{diss}}(1 + N_{\omega_0})\left(\hat{\sigma}\hat{\rho}\hat{\sigma}^+ - \frac{1}{2}\hat{\sigma}^+\hat{\sigma}\hat{\rho} - \frac{1}{2}\hat{\rho}\hat{\sigma}^+\hat{\sigma}\right) + \\ &+ (\gamma_{\text{diss}}N_{\omega_0} + \gamma_{\text{pump}})\left(\hat{\sigma}^+\hat{\rho}\hat{\sigma} - \frac{1}{2}\hat{\sigma}\hat{\sigma}^+\hat{\rho} - \frac{1}{2}\hat{\rho}\hat{\sigma}\hat{\sigma}^+\right) + \frac{\gamma_{\text{deph}}}{2}(\hat{\sigma}_z\hat{\rho}\hat{\sigma}_z - \hat{\rho})\end{aligned}$$

где γ_{diss} и γ_{deph} - скорости диссипации и дефазировки соответственно, введенные ранее, а также добавлена γ_{pump} , которую называют скоростью некогерентной накачки ДУС каким-то внешним полем.

В результате мы получим уравнения для компонент матрицы плотности, которые обобщают уравнения, полученные нами ранее:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho_{ee}}{\partial t} &= \frac{i}{2} \Omega (e^{-i\omega t} \rho_{ge} - e^{i\omega t} \rho_{eg}) - \gamma_{\text{diss}} (N_{\omega_0} + 1) \rho_{ee} + (\gamma_{\text{diss}} N_{\omega_0} + \gamma_{\text{pump}}) \rho_{gg}, \\ \frac{\partial \rho_{eg}}{\partial t} &= -\frac{i}{2} \Omega e^{-i\omega t} (\rho_{ee} - \rho_{gg}) - i\omega_0 \rho_{eg} - \frac{\{\gamma_{\text{diss}} (2N_{\omega_0} + 1) + \gamma_{\text{pump}}\} \rho_{eg}}{2} - \gamma_{\text{deph}} \rho_{eg} \\ \frac{\partial \rho_{ge}}{\partial t} &= \frac{i}{2} \Omega e^{i\omega t} (\rho_{ee} - \rho_{gg}) + i\omega_0 \rho_{ge} - \frac{\{\gamma_{\text{diss}} (2N_{\omega_0} + 1) + \gamma_{\text{pump}}\} \rho_{ge}}{2} - \gamma_{\text{deph}} \rho_{ge} \\ \frac{\partial \rho_{gg}}{\partial t} &= -\frac{i}{2} \Omega (e^{-i\omega t} \rho_{ge} - e^{i\omega t} \rho_{eg}) - (\gamma_{\text{diss}} N_{\omega_0} + \gamma_{\text{pump}}) \rho_{gg} + \gamma_{\text{diss}} (N_{\omega_0} + 1) \rho_{ee}\end{aligned}$$

Видно, что уравнения для недиагональных компонент в точности совпадут с соответствующими уравнениями Блоха, если принять $\gamma_{\perp} = \frac{\gamma_{\text{diss}} (2N_{\omega_0} + 1) + \gamma_{\text{pump}}}{2} + \gamma_{\text{deph}}$.

В то же время соответствующее уравнение для разностей населенностей верхнего и нижнего уровней $\langle \hat{\sigma}_z \rangle = \rho_{ee} - \rho_{gg}$ будет иметь вид

$$\begin{aligned}\frac{\partial \langle \hat{\sigma}_z \rangle}{\partial t} &= i\Omega (e^{-i\omega t} \rho_{ge} - e^{i\omega t} \rho_{eg}) - 2\gamma_{\text{diss}} (N_{\omega_0} + 1) \rho_{ee} + 2(\gamma_{\text{diss}} N_{\omega_0} + \gamma_{\text{pump}}) \rho_{gg} = \\ &= i\Omega (e^{-i\omega t} \rho_{ge} - e^{i\omega t} \rho_{eg}) - (2\gamma_{\text{diss}} N_{\omega_0} + \gamma_{\text{diss}} + \gamma_{\text{pump}}) \langle \hat{\sigma}_z \rangle - \gamma_{\text{diss}} + \gamma_{\text{pump}}\end{aligned}$$

и совпадение с соответствующим вышеприведенным уравнением Блоха будет лишь в том случае, если $N_{\omega_0} = 0$ и $\gamma_{\text{pump}} = 0$, и тогда $\gamma_{\parallel} = \gamma_{\text{diss}}$.

Отметим одну важную особенность введенной некогерентной накачки.

Пусть внешнее монохроматическое поле отсутствует: $\Omega = 0$.

Тогда рассмотрим стационарное решение уравнений для диагональных элементов матрицы плотности, обобщающее полученное нами ранее:

$$\begin{aligned}\rho_{ee} - \rho_{gg} &= \frac{\gamma_{\text{pump}} - \gamma_{\text{diss}}}{2\gamma_{\text{diss}} N_{\omega_0} + \gamma_{\text{diss}} + \gamma_{\text{pump}}}, \quad \rho_{ee} + \rho_{gg} = 1 \quad \rightarrow \\ \rho_{ee} &= \frac{\gamma_{\text{diss}} N_{\omega_0} + \gamma_{\text{pump}}}{2\gamma_{\text{diss}} N_{\omega_0} + \gamma_{\text{diss}} + \gamma_{\text{pump}}}, \quad \rho_{gg} = \frac{\gamma_{\text{diss}} N_{\omega_0} + \gamma_{\text{diss}}}{2\gamma_{\text{diss}} N_{\omega_0} + \gamma_{\text{diss}} + \gamma_{\text{pump}}}, \quad \frac{\rho_{ee}}{\rho_{gg}} = \frac{N_{\omega_0} + \frac{\gamma_{\text{pump}}}{\gamma_{\text{diss}}}}{N_{\omega_0} + 1}.\end{aligned}$$

Видно, что даже если $N_{\omega_0} = 0$, некогерентная накачка приводит к заселению верхнего уровня ДУС, а также в общем случае при $\gamma_{\text{pump}} > \gamma_{\text{diss}}$ имеет место инверсное заселение верхнего уровня, то есть $\rho_{ee} > \rho_{gg}$.

Теперь рассмотрим стационарное решение уравнений для матрицы плотности в присутствии когерентной монохроматической накачки, при $\Omega \neq 0$.

Решение будем искать в виде $\rho_{eg}(t) = \tilde{\rho}_{eg} e^{-i\omega t}$, $\rho_{ge}(t) = \tilde{\rho}_{ge} e^{i\omega t}$, причем $\tilde{\rho}_{eg}$, $\tilde{\rho}_{ge}$, ρ_{ee} и ρ_{gg} будем считать независимыми от времени.

Тогда из уравнений для недиагональных элементов матрицы плотности легко находим, что $\tilde{\rho}_{eg} = \frac{\Omega(\rho_{ee} - \rho_{gg})}{2(\omega - \omega_0 + i\gamma_{\perp})}$, $\tilde{\rho}_{ge} = (\tilde{\rho}_{eg})^*$, где γ_{\perp} была определена ранее.

Из уравнения для $\langle \hat{\sigma}_z \rangle$ получаем, что

$$i\Omega (\tilde{\rho}_{ge} - \tilde{\rho}_{eg}) = \gamma_{\text{diss}} - \gamma_{\text{pump}} + (2\gamma_{\text{diss}} N_{\omega_0} + \gamma_{\text{diss}} + \gamma_{\text{pump}}) (\rho_{ee} - \rho_{gg}),$$

откуда мы находим, что

$$\rho_{ee} - \rho_{gg} = \frac{\gamma_{\text{pump}} - \gamma_{\text{diss}}}{2\gamma_{\text{diss}} N_{\omega_0} + \gamma_{\text{diss}} + \gamma_{\text{pump}} + \frac{\Omega^2 \gamma_{\perp}}{(\omega - \omega_0)^2 + \gamma_{\perp}^2}}$$

Учитывая это, а также то, что $\rho_{ee} + \rho_{gg} = 1$, окончательно находим, что

$$\begin{aligned}\rho_{ee} &= \frac{\gamma_{\text{diss}} N_{\omega_0} + \gamma_{\text{pump}} + \frac{\Omega^2 \gamma_{\perp}}{2[(\omega - \omega_0)^2 + \gamma_{\perp}^2]}}{2\gamma_{\text{diss}} N_{\omega_0} + \gamma_{\text{diss}} + \gamma_{\text{pump}} + \frac{\Omega^2 \gamma_{\perp}}{(\omega - \omega_0)^2 + \gamma_{\perp}^2}}, \\ \rho_{gg} &= \frac{\gamma_{\text{diss}} N_{\omega_0} + \gamma_{\text{diss}} + \frac{\Omega^2 \gamma_{\perp}}{2[(\omega - \omega_0)^2 + \gamma_{\perp}^2]}}{2\gamma_{\text{diss}} N_{\omega_0} + \gamma_{\text{diss}} + \gamma_{\text{pump}} + \frac{\Omega^2 \gamma_{\perp}}{(\omega - \omega_0)^2 + \gamma_{\perp}^2}}, \\ \frac{\rho_{ee}}{\rho_{gg}} &= \frac{N_{\omega_0} + \frac{\gamma_{\text{pump}}}{\gamma_{\text{diss}}} + \frac{\Omega^2 \gamma_{\perp} / \gamma_{\text{diss}}}{2[(\omega - \omega_0)^2 + \gamma_{\perp}^2]}}{N_{\omega_0} + 1 + \frac{\Omega^2 \gamma_{\perp} / \gamma_{\text{diss}}}{2[(\omega - \omega_0)^2 + \gamma_{\perp}^2]}}, \\ \tilde{\rho}_{eg} &= \frac{(\gamma_{\text{pump}} - \gamma_{\text{diss}}) \Omega / [2(\omega - \omega_0 + i\gamma_{\perp})]}{\left(2\gamma_{\text{diss}} N_{\omega_0} + \gamma_{\text{diss}} + \gamma_{\text{pump}} + \frac{\Omega^2 \gamma_{\perp}}{(\omega - \omega_0)^2 + \gamma_{\perp}^2}\right)}\end{aligned}$$

Из этого решения видно, что и в случае действия монохроматической электромагнитной волны на двухуровневую систему инверсная заселенность может быть только тогда, когда есть некогерентная накачка с $\gamma_{\text{pump}} > \gamma_{\text{diss}}$.

С помощью только одной монохроматической волны в ДУС нельзя создать стационарную инверсную заселенность.

* лазеры: условия лазерной генерации

?

Обсудим условия лазерной генерации.

* лазеры: Нестационарное решение уравнений Блоха, спектр резонансной флюоресценции, условия лазерной генерации и триплет Моллоу

Рассмотрим нестационарное (общее) решение уравнений для матрицы плотности в присутствии когерентной монохроматической накачки, при $\Omega \neq 0$.

Решение будем искать в виде $\rho_{eg}(t) = \tilde{\rho}_{eg}(t)e^{-i\omega t}$, $\rho_{ge}(t) = \tilde{\rho}_{ge}(t)e^{i\omega t}$, то есть $\tilde{\rho}_{eg}$, $\tilde{\rho}_{ge}$, ρ_{ee} и ρ_{gg} будем считать зависящими от времени.

Для них получим систему линейных уравнений

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho_{ee}}{\partial t} &= \frac{i}{2} \Omega (\tilde{\rho}_{ge} - \tilde{\rho}_{eg}) - \gamma_{\parallel e} \rho_{ee} + \gamma_{\parallel g} \rho_{gg}, \\ \frac{\partial \tilde{\rho}_{ge}}{\partial t} &= \frac{i}{2} \Omega (\rho_{ee} - \rho_{gg}) - i(\omega - \omega_0) \tilde{\rho}_{ge} - \gamma_{\perp} \tilde{\rho}_{ge} \\ \frac{\partial \tilde{\rho}_{eg}}{\partial t} &= -\frac{i}{2} \Omega (\rho_{ee} - \rho_{gg}) + i(\omega - \omega_0) \tilde{\rho}_{eg} - \gamma_{\perp} \tilde{\rho}_{eg}, \\ \frac{\partial \rho_{gg}}{\partial t} &= -\frac{i}{2} \Omega (\tilde{\rho}_{ge} - \tilde{\rho}_{eg}) - \gamma_{\parallel g} \rho_{gg} + \gamma_{\parallel e} \rho_{ee}\end{aligned}$$

где для краткости введено $\gamma_{\parallel e} = \gamma_{\text{diss}}(N_{\omega_0} + 1)$ и $\gamma_{\parallel g} = (\gamma_{\text{diss}} N_{\omega_0} + \gamma_{\text{pump}})$.

С обозначением отстройки $\Delta = \omega - \omega_0$ частоты поля от частоты ДУС, полагая для всех компонент зависимость $\sim e^{-\lambda t}$, характерное ее уравнение имеет вид

$$\begin{vmatrix} \lambda - \gamma_{\parallel e} & -i\Omega/2 & i\Omega/2 & \gamma_{\parallel g} \\ -i\Omega/2 & \lambda + i\Delta - \gamma_{\perp} & 0 & i\Omega/2 \\ i\Omega/2 & 0 & \lambda - i\Delta - \gamma_{\perp} & -i\Omega/2 \\ \gamma_{\parallel e} & i\Omega/2 & -i\Omega/2 & \lambda - \gamma_{\parallel g} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \lambda & 0 & 0 & 2\lambda \\ 0 & \lambda + i\Delta - \gamma_{\perp} & 2\lambda - 2\gamma_{\perp} & 0 \\ i\Omega/2 & 0 & \lambda - i\Delta - \gamma_{\perp} & 0 \\ \gamma_{\parallel e} & i\Omega/2 & 0 & \lambda - \gamma_{\parallel g} + \gamma_{\parallel e} \end{vmatrix} =$$

$$= \lambda \{ \lambda^3 - \lambda^2 (2\gamma_{\perp} + \gamma_{\parallel}) + \lambda (\Delta^2 + \Omega^2 + \gamma_{\perp}^2 + 2\gamma_{\perp}\gamma_{\parallel}) - (\Omega^2\gamma_{\perp} + \Delta^2\gamma_{\parallel} + \gamma_{\perp}^2\gamma_{\parallel}) \} = 0$$

где $\gamma_{\parallel} = \gamma_{\parallel e} + \gamma_{\parallel g}$.

Если релаксацией полностью пренебречь, то уравнение сведется к уравнению

$$\lambda^2 (\lambda^2 + \Delta^2 + \Omega^2) = 0$$

с четырьмя корнями $\lambda_{1,2} = 0$ и $\lambda_{3,4} = \pm i\sqrt{\Delta^2 + \Omega^2}$.

В общем случае $\lambda_1 = 0$, а для нахождения остальных трех корней можно воспользоваться аналитической формулой Кардано решения кубического уравнения.

Но и оно в общем случае выглядит громоздко.

В сильном монохроматическом поле однако можно считать релаксацию слабой и учесть её в линейном приближении по константам γ_{11} и γ_{\perp} .

В этом приближении

$$\lambda_2 \approx \frac{\Omega^2\gamma_{\perp} + \Delta^2\gamma_{\parallel}}{\Delta^2 + \Omega^2} \equiv \Gamma_1, \quad \lambda_{3,4} \approx \pm i\sqrt{\Delta^2 + \Omega^2} + \frac{\Delta^2\gamma_{\perp} + \Omega^2\frac{\gamma_{\perp} + \gamma_{\parallel}}{2}}{\Delta^2 + \Omega^2} \equiv \pm i\tilde{\Omega} + \Gamma_2,$$

где введено обозначение $\tilde{\Omega} = \sqrt{\Delta^2 + \Omega^2}$, и введены константы релаксации Γ_1 и Γ_2 .

Поэтому, если в присутствии монохроматического электромагнитного поля вывести двухуровневую систему из её стационарного состояния, определяемого значениями матрицы плотности $\rho_{ee} = \rho_{ee}^{\text{ст}}$, $\rho_{gg} = \rho_{gg}^{\text{ст}}$, $\tilde{\rho}_{eg} = \tilde{\rho}_{eg}^{\text{ст}}$ и $\tilde{\rho}_{ge} = \tilde{\rho}_{ge}^{\text{ст}}$, найденными ранее, то впоследствии она снова срелаксирует к этому состоянию по закону

$$\begin{aligned} \rho_{gg}(t) &= \rho_{gg}^{\text{ст}} + C_1 e^{-\Gamma_1 t} + C_2 e^{-i\tilde{\Omega}t - \Gamma_2 t} + C_2^* e^{i\tilde{\Omega}t - \Gamma_2 t}, \\ \rho_{ee}(t) &= 1 - \rho_{gg}(t) \\ \rho_{eg}(t) &= \tilde{\rho}_{eg}^{\text{ст}} e^{-i\omega t} + C_3 e^{-i\omega t - \Gamma_1 t} + C_4 e^{-i(\omega + \tilde{\Omega})t - \Gamma_2 t} + C_5 e^{-i(\omega - \tilde{\Omega})t - \Gamma_2 t}, \\ \rho_{ge}(t) &= (\rho_{eg}(t))^* \end{aligned}$$

где C_1, C_2, C_3, C_4, C_5 - константы (в общем случае комплексные), определяемые из уравнений и начальных условий.

Интенсивность резонансной флюоресценции на частоте ω_{rf} определяется квадратом модуля амплитуды фурье дипольного момента ДУС $\left| \int_0^{+\infty} \rho_{eg}(t) e^{i\omega_{\text{rf}} t} dt \right|^2$, и она будет содержать очевидный δ -функциональный пик на частоте $\omega_{\text{rf}} = \omega$ от первого члена, и три уширенных пика с лоренцевской формой линии на частотах

$$\omega_{\text{rf}} = \omega$$

и

$$\omega_{\text{rf}} = \omega \pm \tilde{\Omega} \equiv \omega \pm \sqrt{\Delta^2 + \Omega^2}$$

с ширинами Γ_1 и Γ_2 соответственно.

Последние три пика образуют так называемый триплет Моллоу (Mollow).

дефазировка

б) Пусть релаксационный член описывает дефазировку.

Что измениться в решении, какая фаза сбивается?

когерентная накачка

д) Рассмотреть задачу (а), но с дополнительными членами в уравнении Линдблада, соответствующими когерентной накачке.

форма спектральной линии

Найти форму спектральной линии.

8.1.2 (+)13 модель Клайды-Леггета

задача 30 бурмистров

итоговые свойства

э

Взаимодействие частицы со средой ведет к перенормировке потенциальной энергии частицы $U_0(q) \rightarrow U(q)$, к возникновению силы трения и к появлению случайной силы $f(t)$.

применения модели

модель дает понять, что

Частица, взаимодействующая с бесконечной системой осцилляторов, получает силу трения и случайные силы...

Что мы сделали...

Усреднили по степеням свободы осцилляторов, но не стали усреднять по координатам частицы.

Когда так можно делать?

Когда осцилляторы – «термостат». Т.е. Мы пренебрегли возмущением системы осцилляторов со стороны частицы.

Осцилляторы всегда равновесные!!! Они могут поглотить сколько угодно энергии частицы...

(так сказал Щелкачев)

описание модели

Частица массой M находится в потенциале $U_0(q)$ и взаимодействует с внешней средой - термостатом, который представляет собой бесконечный набор $\{\alpha\}$ фононов, т.е. осцилляторов с частотами ω_α .

Гамильтониан среды - энергия осцилляторов:

$$H_{\text{вз}} = \sum_{\alpha} \left(\frac{m \dot{x}_{\alpha}^2}{2} + \frac{m \omega_{\alpha}^2 x_{\alpha}^2}{2} \right)$$

Потенциал взаимодействия частицы со средой, вообще говоря, нелинейный и равен

$$U_{\text{вз}} = \sum_{\alpha} \gamma(q) C_{\alpha} x_{\alpha}$$

где C_{α} - константа взаимодействия.

Спектральная плотность колебаний в среде определена как

$$J(\Omega) = \frac{\pi}{2} \sum_{\alpha} \frac{C_{\alpha}^2}{m \omega_{\alpha}} \delta(\Omega - \omega_{\alpha})$$

поиск уравнения движения с помощью исключения переменных

Предполагая $J(\Omega) = \eta\Omega$ ($\eta > 0$), исключить переменные среды x_α и найти эффективное уравнение движения частицы в среде.

Пишем действие $S = S[q(t), x_\alpha(t)]$ для системы "частица и среда":

$$S = \int \left[\frac{M\dot{q}^2}{2} - U_0(q) + \sum_\alpha \left(\frac{m\dot{x}_\alpha^2}{2} - \frac{m\omega_\alpha^2 x_\alpha^2}{2} \right) - \gamma(q) \sum_\alpha C_\alpha x_\alpha \right] dt$$

(тут судя по всему мы пишем уравнения Эйлера-Лагранжа, их решаем и получаем уравнения)

Уравнения движения для частицы и фононов имеют вид

$$\begin{aligned} M\ddot{q} + U'_0(q) &= -\gamma'(q) \sum_\alpha C_\alpha x_\alpha \\ m\ddot{x}_\alpha + m\omega_\alpha^2 x_\alpha &= -\gamma(q) C_\alpha \end{aligned}$$

Решение линейного уравнения на $x_\alpha(t)$ представим в виде суммы вынужденных и свободных колебаний

$$\begin{aligned} x_\alpha(t) &= -C_\alpha \int_{-\infty}^t \frac{\sin \omega_\alpha(t-s)}{m\omega_\alpha} \gamma(q_s) ds + x_\alpha(0) \cos \omega_\alpha t + \frac{\dot{x}_\alpha(0)}{\omega_\alpha} \sin \omega_\alpha t = \\ &= C_\alpha \int_{-\infty}^{\infty} K_\alpha^R(t-s) \gamma(q_s) ds + x_\alpha^{(cs)}(t) \end{aligned}$$

Здесь мы распространили интегрирование по всему возможному интервалу времени и ввели функцию запаздывающего отклика $K_\alpha^R(t)$:

$$K_\alpha^R(t) = -\vartheta(t) \frac{\sin \omega_\alpha t}{m\omega_\alpha}$$

функция запаздывающего отклика

Решение модели Клайды-Леггета напрямую зависит от функции запаздывающего отклика, так что проанализируем ее.

Определим для $K_\alpha^R(t)$ фурье-компоненту

$$K_\alpha^R(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} K_\alpha^R(t) e^{i\omega t} dt = -\frac{1}{m[\omega_\alpha^2 - (\omega + i\delta)^2]},$$

имеющую полюса $\omega = \pm\omega_\alpha - i\delta$ только в нижней полуплоскости комплексной переменной ω .

Величины $x_\alpha(0)$ и $\dot{x}_\alpha(0)$ можно трактовать как положение и скорость фонона, которые он имел бы в отсутствие его взаимодействия с частицей в один и тот же момент времени, например, при $t = 0$.

Суммарная сила $F(t)$, действующая на частицу, определяется соотношением

$$F(t) = \gamma'(q) \int_{-\infty}^{\infty} K^R(t-s) \gamma(q_s) ds + f(t)$$

где $f(t) = -\gamma(q) \sum_\alpha C_\alpha \left(x_\alpha(0) \cos \omega_\alpha t + \frac{\dot{x}_\alpha(0)}{\omega_\alpha} \sin \omega_\alpha t \right)$.

Суммарная функция отклика $K^R(t)$ здесь равна

$$K^R(t) = -\sum_\alpha C_\alpha^2 K_\alpha^R(t) = \vartheta(t) \sum_\alpha C_\alpha^2 \frac{\sin \omega_\alpha t}{m\omega_\alpha}$$

Ее фурье-компонента легко находится и может быть выражена через спектральную плотность $J(\Omega)$

$$K^R(\omega) = \sum_{\alpha} \frac{C_{\alpha}^2}{m[\omega_{\alpha}^2 - (\omega + i\delta)^2]} \equiv \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\Omega}{\Omega^2 - (\omega + i\delta)^2} J(\Omega) d\Omega.$$

уравнение движения

Окончательно, мы получим следующее уравнение движения частицы:

$$M\ddot{q} + U'_0(q) = \gamma'(q) \int_{-\infty}^{\infty} K^R(t-s) \gamma(q_s) ds + f(t)$$

Функцию отклика K^R можно разбить на две части,

$$K^R(\omega) = K_0 + K_1^R(\omega),$$

одна из которых, K_0 , частотно-независимая

$$K_0 = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{J(\Omega)}{\Omega} d\Omega = \sum_{\alpha} \frac{C_{\alpha}^2}{m\omega_{\alpha}}$$

а другая ее часть K_1^R зависит от частоты

$$K_1^R(\omega) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{J(\Omega)}{\Omega} \frac{\omega^2}{\Omega^2 - (\omega + i\delta)^2} d\Omega$$

Для $J(\Omega) = \eta\Omega$ имеем $K_1^R(\omega) = i\omega\eta$ и $K^R(\omega) = K_0 + i\omega\eta$.

Выполняя обратное фурье-преобразование, находим временное представление для функции отклика

$$K^R(t) = K_0\delta(t) - \eta\delta'(t)$$

Подставим далее $K^R(t)$ в уравнение движения для частицы и вычислим интегралы

$$\begin{aligned} M\ddot{q} + U'_0(q) &= K_0\gamma'(q_t) \int_{-\infty}^{\infty} \delta(t-s) \gamma(q_s) ds - \\ &- \eta\gamma'(q_t) \int_{-\infty}^{\infty} \delta'(t-s) \gamma(q_s) ds + f(t) = K_0\gamma'(q)\gamma(q) - \eta\gamma'^2(q)\dot{q}(t) + f(t) \end{aligned}$$

Это уравнение мы запишем в форме уравнения Ланжевена с нелинейным коэффициентом трения $\mu(q)$ и силой трения, пропорциональной скорости частицы \dot{q}

$$M\ddot{q} + \mu(q)\dot{q} + U'(q) = f(t)$$

где $U(q) = U_0(q) - \frac{1}{2}K_0\gamma^2(q)$ и $\mu(q) = \eta\left(\frac{\partial\gamma(q)}{\partial q}\right)^2$.

Случайная сила и её коррелятор

Теперь перейдем к рассмотрению свойств случайной силы.

Поскольку в состоянии термодинамического равновесия средняя координата гармонического осциллятора (отсчитанная от его центра) и его средняя скорость равны нулю, то есть $\langle x_{\alpha} \rangle = 0$ и $\langle \dot{x}_{\alpha} \rangle = 0$, то среднее значение случайной силы будет также равно нулю: $\langle f(t) \rangle = 0$.

Интерес представляет только корреляционная функция случайной силы.

Временная корреляционная функция случайной силы определяется двойной суммой

$$\langle f(t)f(t') \rangle = \sum_{\alpha, \beta} C_{\alpha} C_{\beta} \left\langle \left(x_{\alpha}(0) \cos \omega_{\alpha} t + \frac{\dot{x}_{\alpha}(0)}{\omega_{\alpha}} \sin \omega_{\alpha} t \right) \left(x_{\beta}(0) \cos \omega_{\beta} t' + \frac{\dot{x}_{\beta}(0)}{\omega_{\beta}} \sin \omega_{\beta} t' \right) \right\rangle.$$

Так как осцилляторы или фононы независимы друг от друга, то среднее от произведения двух величин от разных осцилляторов равно произведению средних, то есть например $\langle x_{\alpha}(0)x_{\beta}(0) \rangle = 0$ при $\alpha \neq \beta$, и тогда

$$\langle f(t)f(t') \rangle = \sum_{\alpha} C_{\alpha}^2 \left[\langle x_{\alpha}(0)x_{\alpha}(0) \rangle \cos \omega_{\alpha} t \cos \omega_{\alpha} t' + \frac{\langle \dot{x}_{\alpha}(0)\dot{x}_{\alpha}(0) \rangle}{\omega_{\alpha}^2} \sin \omega_{\alpha} t \sin \omega_{\alpha} t' + \frac{\langle x_{\alpha}(0)\dot{x}_{\alpha}(0) \rangle}{\omega_{\alpha}} \sin \omega_{\alpha} (t + t') \right]$$

Теперь заметим, что $\langle x_{\alpha}(0)\dot{x}_{\alpha}(0) \rangle = 0$ (как среднее от полной производной по времени), а средний квадрат скорости выражается через средний квадрат координаты: $\langle \dot{x}_{\alpha}^2(0) \rangle = \omega_{\alpha}^2 \langle x_{\alpha}^2(0) \rangle$.

случай гармонического осциллятора

Строже, для гармонического осциллятора

$$\hat{H}_{\alpha} = \frac{\hat{p}_{\alpha}^2}{2m} + \frac{m\omega_{\alpha}^2 \hat{x}_{\alpha}^2}{2},$$

$$\hat{x}_{\alpha} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_{\alpha}}} (\hat{a}^{+} + \hat{a}), \quad \hat{p}_{\alpha} = i\sqrt{\frac{\hbar m\omega_{\alpha}}{2}} (\hat{a}^{+} - \hat{a}),$$

$$\frac{1}{2} \langle \hat{x}_{\alpha} \hat{p}_{\alpha} + \hat{p}_{\alpha} \hat{x}_{\alpha} \rangle = i\frac{\hbar}{2} \langle 2\hat{a}^{+} \hat{a}^{+} - 2\hat{a} \hat{a} \rangle = 0,$$

а также

$$\langle x_{\alpha}^2(0) \rangle \equiv \langle \hat{x}_{\alpha}^2 \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega_{\alpha}} \langle \hat{a}^{+} \hat{a} + \hat{a} \hat{a}^{+} \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega_{\alpha}} \left(\frac{\hbar}{e^{\hbar\omega_{\alpha}/T} - 1} + 1 \right) = \frac{\hbar}{2m\omega_{\alpha}} \operatorname{cth} \frac{\hbar\omega_{\alpha}}{2T}.$$

Учитывая это, выражение для спектральной плотности $J(\Omega) = \frac{\pi}{2} \sum_{\alpha} \frac{C_{\alpha}^2}{m\omega_{\alpha}} \delta(\Omega - \omega_{\alpha})$ и $J(\Omega) = \eta\Omega$, получим вид временного коррелятора силы:

$$\begin{aligned} \langle f(t)f(t') \rangle &= \sum_{\alpha} C_{\alpha}^2 \frac{\hbar}{2m\omega_{\alpha}} \operatorname{cth} \frac{\hbar\omega_{\alpha}}{2T} \cos \omega_{\alpha} (t - t') = \\ &= \frac{\hbar}{\pi} \int_0^{+\infty} J(\Omega) \operatorname{cth} \frac{\hbar\Omega}{2T} \cos \Omega (t - t') d\Omega = \\ &= \frac{\eta}{2\pi} \int_0^{+\infty} \hbar\Omega \operatorname{cth} \frac{\hbar\Omega}{2T} (e^{i\Omega(t-t')} + e^{-i\Omega(t-t')}) d\Omega \equiv \eta \int_{-\infty}^{+\infty} \hbar\Omega \operatorname{cth} \frac{\hbar\Omega}{2T} e^{-i\Omega(t-t')} \frac{d\Omega}{2\pi} \end{aligned}$$

Отсюда можно легко найти фурье-компоненту временного коррелятора силы (его спектральную плотность):

$$\begin{aligned} \langle f(t)f(t') \rangle_{\Omega} &= \int_{-\infty}^{+\infty} \langle f(t)f(t') \rangle e^{i\Omega(t-t')} dt = \\ &= \eta \hbar\Omega \operatorname{cth} \frac{\hbar\Omega}{2T} = \\ &= \begin{cases} 2\eta T, & \text{классический предел, } \hbar = 0, \\ \eta \hbar |\Omega|, & \text{квантовый предел, } T = 0 \end{cases} \end{aligned}$$

Во временном представлении коррелятор силы $\langle f(t)f(t') \rangle$ в двух предельных случаях равен

$$\langle f(t)f(t') \rangle = \begin{cases} 2\eta T \delta(t-t'), & \text{классический предел, } \hbar = 0, \\ -\frac{\eta \hbar}{\pi(t-t')^2}, & \text{квантовый предел, } T = 0. \end{cases}$$

здесь в квантовом случае использовано равенство $\int_0^{+\infty} x \cos x dx = \lim_{\delta \rightarrow +0} \operatorname{Re} \int_0^{+\infty} x e^{(i-\delta)x} dx = -1$.

Случайная сила оказывается некоррелированной в классическом пределе и коррелированной в квантовом пределе.

соответствие флуктуационно-диссипативной теореме

Отметим, что полученный результат полностью соответствует флуктуационнодиссипативной теореме (ФДТ) в виде

$$\langle f(t)f(t') \rangle_\omega = -\operatorname{Im} \left(\frac{1}{\alpha(\omega)} \right) \hbar \operatorname{cth} \frac{\hbar \omega}{2T} = \frac{\hbar \alpha''(\omega)}{|\alpha(\omega)|^2} \operatorname{cth} \frac{\hbar \omega}{2T},$$

где $\alpha(\omega)$ — динамический отклик частицы на внешнюю силу.

Полученное нами уравнение движения частицы имеет вид

$$M\ddot{q} + \eta\dot{q} + U'(q) = f(t),$$

так что если $q(\omega) = \alpha(\omega)f(\omega)$, то очевидно, что $\alpha(\omega) = (-M\omega^2 + M\omega_0^2 - i\eta\omega)^{-1}$

если мы для конкретности, без ограничения общности предположим, что внешний вещественный потенциал $U'(q)$ — также гармонический с собственной частотой ω_0 .

Тогда ясно, что

$$\operatorname{Im}\{\alpha(\omega)\}^{-1} = -\eta\omega,$$

и

$$\langle f(t)f(t') \rangle_\omega = \eta\omega \hbar \operatorname{cth} \frac{\hbar \omega}{2T},$$

в полном соответствии с нашими результатами.

связь коэффициента трения и вершины взаимодействия

Коэффициент трения $\mu(q)$ и вершина взаимодействия $\gamma(q)$ однозначно связаны друг с другом.

выше уже сделано

перенормировка потенциала

Также определить перенормировку потенциала $U_0(q)$ и коэффициент трения $\mu(q)$.

выше уже сделано

спектральная плотность: количество мод на одну частоту

?

количество мод на одну частоту?

8.1.3 (+)17 распад метостабильного состояния

задача 17 из задания, бурмистров - 31

итоги модели

зависимость скорости распада метастабильного состояния с экспоненциальной точностью имеет вид:

????

описание модели

Частица массой M в метастабильном состоянии отделена потенциальным барьером, который удовлетворяет условию квазиклассичности, и вероятность распада настолько мала, что частица все время находится в термодинамическом равновесии с температурой T .

скорость распада метастабильного состояния

Определим зависимость скорости распада метастабильного состояния с экспоненциальной точностью.

Выразим ответ в терминах эффективного (евклидова) действия, определенного для движения частицы в инвертированном потенциале.

температура смены режимов (??)

Определим температуру, при которой термоактивационный механизм распада сменяется квантовым режимом распада.

решение в двух словах

?

главная идея в том, что????

поиск скорости распада через формулу квазиклассики

Пусть частица находится на уровне с энергией $E = E_n$.

Поскольку предполагается условие квазиклассичности, то мы можем воспользоваться экспоненциальным приближением для скорости туннелирования

$$\Gamma(E) = \nu(E)e^{-A(E)/\hbar}$$

где $\nu(E)$ - частота попыток туннелирования, а экспонента задается формулой ВКЕ

$$A(E) = 2 \int_{q_1}^{\infty} \sqrt{2M(U(q) - E)} dq \equiv \oint \sqrt{2M(U(q) - E)} dq$$

Точки $q_1 = q_1(E)$ и $q_2 = q_2(E)$ - точки входа под барьер и выхода из под него.

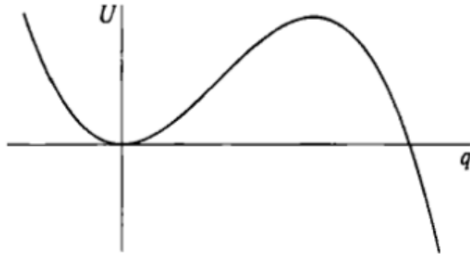
Условие квазиклассичности $A(E) \gg \hbar$ также предполагает большое число уровней в потенциальной яме.

Запишем $A(E)$ для удобства как

$$A(E) = \oint \sqrt{2M(\tilde{E} - \tilde{U}(q))} dq$$

где $\tilde{E} = -E$ и инвертированный потенциал $\tilde{U}(q) = -U(q)$.

Последнее соотношение для $A(E)$ можно трактовать как движение классической частицы в инвертированном потенциале $\tilde{U}(q)$



потенциальный барьер

Пусть частица, которая ограничена движением в потенциальной яме, находится в тепловом равновесии при температуре T .

Тогда вероятность того, что частица находится на уровне с энергией $E = E_n$, определяется распределением Гиббса

$$w(E_n) = Z^{-1} e^{-\beta E_n},$$

где $Z = \sum_n e^{-\beta E_n}$, $\beta = 1/T$.

Вероятность или скорость распада $\Gamma(T)$ определяется следующей суммой по уровням

$$\Gamma(T) = \frac{1}{Z} \sum_n \Gamma(E_n) e^{-\beta E_n} = \frac{1}{Z} \int dE g(E) \nu(E) e^{-\frac{A(E)}{\hbar} - \beta E} = \frac{1}{Z} \int dE g(E) \nu(E) e^{-S(E)/\hbar},$$

где $g(E) = \sum_n \delta(E - E_n)$ - плотность состояний и $S(E) = A(E) + \hbar\beta E$.

Основной вклад в интеграл в силу его экспоненциального характера вносит стационарная точка $E = E^*$, где производная $\partial S(E)/\partial E = 0$.

Это приводит к следующему уравнению

$$\hbar\beta = -\frac{\partial A}{\partial E} = \frac{\partial A}{\partial \tilde{E}} = \oint dq \sqrt{\frac{M}{2(\tilde{E} - \tilde{U}(q))}} = \tau(\tilde{E})$$

Последний интеграл есть в точности период движения классической частицы в инвертированном потенциале $U(q)$, если она имеет энергию \tilde{E} .

Другими словами, необходимый период движения должен быть равен обратной температуре с точностью до постоянной Планка

$$\tau(E^*) = \hbar\beta = \hbar/T$$

По существу это условие представляет собой оптимальное сочетание термоактивации с квантовым туннелированием.

Соответственно, скорость распада метастабильного состояния $\Gamma = \Gamma(T)$ с экспоненциальной точностью определится значением $S(E)$ при $E = E^*$

$$\Gamma(T) \sim \exp(-S(E^*)/\hbar)$$

решение с помощью эффективного действия

Посмотрим на ответ с другой точки зрения.

Представим $S(E)$ в следующем виде:

$$S(E) = A(E) + \hbar\beta E = \oint \sqrt{2M(\tilde{E} - \tilde{U}(q))} dq - \int_{-\hbar\beta/2}^{\hbar\beta/2} \tilde{E} d\tau$$

Первый член в этом выражении иногда называют укороченным действием.

Интегрирование по параметру τ , имеющему смысл времени, можно выбрать и в пределах отрезка $[0, \hbar\beta]$.

Последнему соотношению можно придать смысл некоторого действия $S_{\text{elf}}[q_\tau, \dot{q}_\tau]$ с евклидовым лагранжианом L_E

$$\begin{aligned} S_{\text{eff}}[q(\tau), \dot{q}(\tau)] &= \int_{-\hbar\beta/2}^{\hbar\beta/2} L_E[q(\tau), \dot{q}(\tau)] d\tau = \\ &= \int_{-\hbar\beta/2}^{\hbar\beta/2} \left[\frac{M}{2} \left(\frac{dq}{d\tau} \right)^2 - \tilde{U}(q) \right] d\tau \equiv \\ &\equiv \int_{q(-\hbar\beta/2)=q(\hbar\beta/2)} \left[\frac{M}{2} \left(\frac{dq}{d\tau} \right)^2 + U(q) \right] d\tau. \end{aligned}$$

Таким образом, чтобы найти экспоненту $S[E^*]$ в выражении для скорости распада, можно вычислить значение действия $S_{\text{eff}}[q_\tau, \dot{q}_\tau]$ на замкнутой траектории, период которой $\tau(E)$ равен \hbar/T .

Действие $S_{\text{eff}}[q_\tau, \dot{q}_\tau]$ называют эффективным или реже евклидовым действием, а параметр τ - мнимым временем.

Действительно, если мы сделаем виковский поворот $\tau = it$, то найдем следующие соотношения между эффективным действием и обычны:

$$\begin{aligned} S_{\text{eff}} &= \int \left[\frac{M}{2} \left(\frac{dq}{d\tau} \right)^2 + U(q) \right] d\tau \xrightarrow{\tau=it} -i \int \left[\frac{M}{2} \left(\frac{dq}{dt} \right)^2 - U(q) \right] dt = -iS, \\ &\quad e^{iS/\hbar} \xrightarrow{t=-i\tau} e^{-S_{\text{eff}}/\hbar} \end{aligned}$$

Напомним, что амплитуда перехода в квантовой механике пропорциональна $\exp(iS/\hbar)$.

С этой точки зрения движение частицы под потенциальным барьером можно трактовать как движение классической частицы по оси мнимого времени τ на отрезке длиной \hbar/T в инвертированном потенциале \tilde{U} .

температурная зависимость траекторий и закон Аррениуса

Температурная зависимость скорости распада $\Gamma(T)$ определяется поведением периода движения $r(E)$ в инвертированном потенциале $\tilde{U}(q)$.

Для потенциала, который имеет гладкое поведение в точках локального минимума $q = 0$ и максимума $q = q_0$, отвечающего высоте барьера $U_0 = U(q_0)$, период движения меняется в пределах от $\tau(E = 0) = \infty$ при $E = 0$ до минимального значения $\tau(E = U_0) = 2\pi/\omega_0$, где $\omega_0 = (|U''(q_0)|/M)^{1/2}$.

Соответственно, при температурах $T > T_q = \hbar\omega_0/2\pi$ нетривиальных периодических траекторий в инвертированном потенциале не существует.

Имеется только одна тривиальная траектория, называемая классической, $q(\tau) \equiv q_0$, которая удовлетворяет условию периодичности $q(-\hbar\beta/2) = q(\hbar\beta/2)$ и экстремальности.

Поскольку для этой траектории $\dot{q}(\tau) = 0$, экстремальное значение эффективного действия на классической траектории очевидно и равно классической экспоненте с точностью до постоянной Планка \hbar

$$S(E^*) = \hbar U(q_0)/T = \hbar U_0/T$$

В результате при температурах $T > T_q$ распад метастабильного состояния будет происходить классическим термоактивационным способом, следуя закону Аррениуса

$$\Gamma(T) \sim e^{-U_0/T}, \quad T > T_q = \hbar(|U''(q_0)|/M)^{1/2}/2\pi$$

При температуре $T = T_q$, которая определяется кривизной потенциального барьера, происходит переход к квантовому режиму распада.

Вероятность квантового распада уменьшается с понижением температуры, достигая минимального значения при нулевой температуре

$$\Gamma(0) \sim \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_0^{q_c} \sqrt{2MU(q)} dq\right)$$

Здесь q_c -точка выхода частицы из под барьера при $E = 0$, определяемая условием $U(q_c) = 0$.

напоминание: квазиклассические методы

в данной задаче много использовалось этих методов, так что повторим вкратце их суть. как известно,

$$A(E) = 2 \int_{q_1}^{\infty} \sqrt{2M(U(q) - E)} dq \equiv \oint \sqrt{2M(U(q) - E)} dq$$

это легко понять из соображений
(?)

8.2 Модельные примеры квантовой кинетики

(тут заготовки для того, что будет использоваться в различных явлениях в твердых телах, что будет раскрыто как раз в части про твердое тело! то есть тут каталог моделей, в твердом теле - каталог их применений к твердому телу.)

8.2.1 стенка и квантовый газ

Щелкачев решал на семинаре.

(см прошлые потоки, станет интересно - там решение есть)

постановка задачи

Имеется плоская стенка, которая с небольшой скоростью движется через равновесный газ фермионов.

Столкновения фермионов со стенкой носят зеркальный характер.

Найти силу сопротивления, испытываемую стенкой. То же самое сделать для бозонов. Рекомендуется перед решением этих задач вспомнить определение тензора плотности потока импульса и обсудить его физический смысл. Как изменится решение задачи, если стенка является полупроницаемой мембраной, т.е.

с вероятностью $D < 1$ частица может проходить сквозь стенку? Обсудить случай диффузного отражения от стенки.

решение

не актуально

Part V

Другие кинетические модели сплошных сред

Обсудим кинетические явления в сплошных средах.

8.3 Типичные газовые модели

8.3.1 Приближенное решение кинетического уравнения для газов (-)

(почему-то нет в теормине, так что важно не акцентироваться на это!!! хотя тем не менее, скорее всего изучу)

теория

Ввиду сложности закона взаимодействия молекул (в особенности многоатомных), определяющего функцию w в интеграле столкновений, уравнение Больцмана по существу не может быть даже записано для конкретных газов в точном виде.

Но и при простых предположениях о характере молекулярного взаимодействия сложность математической структуры кинетического уравнения делает, вообще говоря, невозможным нахождение его решения в точном аналитическом виде; это относится даже к линеаризованному уравнению.

приближенные методы Чапмана решения уравнения Больцмана

В связи с этим в кинетической теории газов приобретают особое значение достаточно эффективные методы приближенного решения уравнения Больцмана.

Изложим здесь идею такого метода в применении к одноатомному газу.

Рассмотрим сначала задачу о теплопроводности. Для одноатомного газа теплоемкость $c_p = 5/2$ и линеаризованное уравнение (7.3) принимает вид

$$-\mathbf{v} \left(\frac{5}{2} - \beta v^2 \right) = I(\mathbf{g}) \quad (8.1)$$

(где $\beta = m/(2T)$), а линейный интегральный оператор $I(\mathbf{g})$ определяется формулой

$$I(\mathbf{g}) = \iint v_{\text{отн}} f_{01} (\mathbf{g}' + \mathbf{g}'_1 - \mathbf{g} - \mathbf{g}_1) d^3 p_1 d\sigma$$

(соответствующей интегралу столкновений (3.9)), а равновесная функция распределения

$$f_0(v) = \frac{N\beta^{3/2}}{m^3\pi^{3/2}} e^{-\beta v^2}$$

Эффективный метод приближенного решения уравнения (8.1) основан на разложении искомых функций по полной системе взаимно ортогональных функций, в качестве которых особым удобством обладают так называемые полиномы Сонина. (почему?)

Ищем решение уравнения (8.1) в виде разложения

$$\mathbf{g}(\mathbf{v}) = \frac{\beta}{N} \mathbf{v} \sum_{s=1}^{\infty} A_s S_{3/2}^s (\beta v^2)$$

Эти функции определяются формулой:

$$S_r^s(x) = \frac{1}{s!} e^x x^{-r} \frac{d^s}{dx^s} e^{-x} x^{r+s}$$

причем r - произвольное, а s - целое положительное число или нуль.

В частности, $S_r^0 = 1$, $S_r^1(x) = r + 1 - x$.

Свойство ортогональности этих полиномов при заданном индексе r и различных индексах s имеет вид:

$$\int_0^\infty e^{-x} x^r S_r^s(x) S_r^{s'}(x) dx = \frac{\Gamma(r+s+1)}{s!} \delta_{ss'}$$

Опустив в разложении член с $s = 0$, мы тем самым автоматически удовлетворяем условию (7.4) (интеграл обращается в нуль в силу ортогональности полиномов с $s = 0$ и $s \neq 0$).

Выражение в скобках в левой части (8.1) есть полином $S_{3/2}^1(\beta v^2)$, так что уравнение принимает вид

$$-\mathbf{v} S_{3/2}^1(\beta v^2) = \frac{\beta}{N} \sum_{s=1}^{\infty} A_s I(\mathbf{v} S_{3/2}^s).$$

Умножив его с обеих сторон на $\mathbf{v} f_0(v) S_{3/2}^l(\beta v^2)$ и проинтегрировав по $d^3 p$, получим систему алгебраических уравнений

$$\sum_{s=1}^{\infty} a_{ls} A_s = \frac{15}{4} \delta_{l1}, \quad l = 1, 2, \dots,$$

причем

$$a_{ls} = -\frac{\beta^2}{N^2} \int f_0 \mathbf{v} S_{3/2}^l I(\mathbf{v} S_{3/2}^s) d^3 p = \frac{\beta^2}{4N^2} \{ \mathbf{v} S_{3/2}^l, \mathbf{v} S_{3/2}^s \}$$

где введены обозначения

$$\begin{aligned} \{F, G\} &= \int f_0(v) f_0(v_1) |\mathbf{v} - \mathbf{v}_1| \Delta(F) \Delta(G) d^3 p d^3 p_1 d\sigma \\ \Delta(F) &= F(\mathbf{v}') + F(\mathbf{v}_1') - F(\mathbf{v}) - F(\mathbf{v}_1) \end{aligned}$$

Уравнение с $l = 0$ (10.9) отсутствует, поскольку $a_{0s} = 0$ в силу сохранения импульса: $\Delta(\mathbf{v} S_{3/2}^0) = \Delta(\mathbf{v}) = 0$.

Коэффициент теплопроводности вычисляется подстановкой (10.7) в интеграл (7.7).

Ввиду условия (7.4) этот интеграл ($c\varepsilon = mv^2/2$) можно представить в виде

$$\mathcal{M} = -\frac{1}{3} \int f_0 S_{3/2}^1(\beta v^2) \mathbf{v} \mathbf{g} d^3 p$$

и в результате находим

$$x = \frac{5}{4} A_1$$

В простоте правой части уравнений (10.9) и выражения (10.12) проявляется преимущество разложения по полиномам Сонина.

Ход вычислений для задачи о вязкости вполне аналогичен Ищем решение уравнения (8.6) в виде

$$g_{\alpha\beta} = -\frac{\beta^2}{N^2} \left(v_\alpha v_\beta - \frac{1}{3} v^2 \delta_{\alpha\beta} \right) \sum_{s=0}^{\infty} B_s S_{5/2}^s(\beta v^2)$$

Подстановка в (8.6) с последующим умножением этого уравнения на

$$f_0(v)S_{5/2}^l(\beta v^2) \left(v_\alpha v_\beta - \frac{1}{3}v^2\delta_{\alpha\beta} \right)$$

и интегрированием по d^3p приводит к системе уравнений

$$\sum_{s=0}^{\infty} b_{ls}B_s = 5\delta_{l0}, \quad l = 0, 1, 2, \dots$$

где

$$b_{ls} = \frac{\beta^2}{N^2} \left\{ \left(v_\alpha v_\beta - \frac{v^2}{3}\delta_{\alpha\beta} \right) S_{5/2}^l, \left(v_\alpha v_\beta - \frac{v^2}{3}\delta_{\alpha\beta} \right) S_{5/2}^s \right\}.$$

Для коэффициента вязкости из (8.9) получается

$$\eta = \frac{1}{4}mB_0$$

Приближенное решение бесконечной системы уравнений (10.9) или (10.14) достигается сохранением в разложениях (10.7) или (10.13) лишь нескольких первых членов, т. е. искусственным обрывом системы.

Сходимость процесса приближения при увеличении числа членов оказывается чрезвычайно быстрой: уже сохранение всего одного члена приводит, вообще говоря, к точности $1 - 2\%$ в значении χ или η .

приближенные коэффициенты меньше настоящих

Покажем, что приближенное решение линеаризованного кинетического уравнения для одноатомных газов, осуществляемое описанным способом, приводит к значениям кинетических коэффициентов, заведомо меньшим, чем дало бы точное решение этого уравнения.

Запишем кинетическое уравнение в символическом виде

$$I(g) = L$$

(где функции g и L - векторы в задаче о теплопроводности и тензоры второго ранга в задаче о вязкости).

По функции g соответствующий кинетический коэффициент определяется как величина, пропорциональная интегралу

$$- \int f_0 g I(g) d^3p$$

(см. § 9).

Приближенная же функция g удовлетворяет не самому уравнению (10.17), а лишь интегральному соотношению

$$\int f_0 g I(g) d^3p = \int f_0 L g d^3p$$

(как это очевидно из способа определения коэффициентов в разложениях g).

Высказанное выше утверждение непосредственно следует из «вариационного принципа», согласно которому решение уравнения (10.17) осуществляет максимум функционала (10.18) в классе функций, удовлетворяющих условию (10.19).

В справедливости этого принципа легко убедиться, рассмотрев интеграл

$$- \int f_0(g - \varphi)I(g - \varphi)d^3p$$

где g - решение уравнения (10.17), а φ - любая пробная функция, удовлетворяющая лишь условию (10.19). По общему свойству (9.13) оператора I этот интеграл положителен.

Раскрыв нем скобки, пишем

$$- \int f_0\{gI(g) + \varphi I(\varphi) - \varphi I(g) - gI(\varphi)\}d^3p$$

Поскольку для одноатомного газа принцип детального равновесия справедлив в форме (2.8), то оператор I обладает свойством самосопряженности (9.11)¹).

Поэтому интегралы от двух последних членов в фигурной скобке равны друг другу.

Подставив за тем $I(g) = L$, имеем

$$\begin{aligned} - \int f_0\{gI(g) + \varphi I(\varphi) - 2\varphi I(g)\}d^3p = \\ = - \int f_0\{gI(g) + \varphi I(\varphi) - 2L\varphi\}d^3p > 0. \end{aligned}$$

Наконец, преобразовав интеграл от последнего члена с помощью условия (10.19), находим

$$- \int f_0gI(g)d^3p > - \int f_0\varphi I(\varphi)d^3p$$

что и требовалось доказать.

газ, взаимодействующий по $U = \alpha/r^4$

Упомянем о случае, представляющем интерес с формальной точки зрения, хотя он и не имеет прямого физического смысла.

Это - газ из частиц, взаимодействующих по закону $U = \alpha/r^4$.

Этот случай характерен тем, что сечение столкновений таких частиц (определенное по классической механике) обратно пропорционально их относительной скорости $v_{\text{отн}}$, а потому фигурирующее в интеграле столкновений произведение $v_{\text{отн}} d\sigma$ оказывается зависящим только от угла рассеяния θ , но не от $v_{\text{отн}}$.

В этом свойстве легко убедиться уже из соображений размерности.

Действительно, сечение зависит всего от трех параметров: постоянной α , массы частиц m и скорости $v_{\text{отн}}$.

Из этих величин нельзя составить безразмерной комбинации и всего одну комбинацию с размерностью площади: $v_{\text{отн}}^{-1} (\alpha/m)^{1/2}$; ей и должно быть пропорционально сечение.

Это свойство сечения приводит к существенному упрощению структуры интеграла столкновений, в результате чего оказывается возможным найти точные решения линеаризованных кинетических уравнений задач о теплопроводности и вязкости. Оказывается, что они даются просто первыми членами разложений (10.7) и (10.13)²).

теплопроводность одноатомного газа, сохранив в разложении (10.7) лишь первый член.

При одном члене разложения уравнения (10.9) сводятся к равенству $A_1 = \frac{15}{4}a_{11}$.

Для вычисления интеграла (10.10) с $l = s = 1$ вводим вместо $\mathbf{v}, \mathbf{v}_1, \mathbf{v}', \mathbf{v}'_1$ скорость центра инерции и относительные скорости двух атомов:

$$\mathbf{V} = \frac{1}{2}(\mathbf{v} + \mathbf{v}_1) = \frac{1}{2}(\mathbf{v}' + \mathbf{v}'_1), \quad \mathbf{v}_{\text{отн}} = \mathbf{v} - \mathbf{v}_1, \quad \mathbf{v}'_{\text{отн}} = \mathbf{v}' - \mathbf{v}'_1$$

$$v^2 + v_1^2 = 2V^2 + \frac{1}{2}v_{\text{отн}}^2, \quad d^3p d^3p_1 = m^6 d^3V d^3v_{\text{отн}}$$

Простое вычисление дает

Возведя это выражение в квадрат и усреднив его по направлениям \mathbf{V} , получим

$$\frac{2\beta^2}{3} [v_{\text{отн}}^4 - (\mathbf{v}_{\text{отн}} v'_{\text{отн}})^2] V^2 = \frac{2\beta^2}{3} v_{\text{отн}}^4 V^2 \sin^2 \theta$$

После выполнения интегрирования по $4\pi V^2 dV$ и по направлениям $\mathbf{v}_{\text{отн}}$ (последнее сводится к умножению на 4π) получим окончательно

$$a_{11} = \frac{\beta^4}{4} \left(\frac{\beta}{2\pi} \right)^{1/2} \int_0^\pi \int_0^\infty \exp\left(-\frac{\beta v_{\text{отн}}^2}{2}\right) v_{\text{отн}}^7 \sin^2 \theta \frac{d\sigma}{d\theta} dv_{\text{отн}} d\theta$$

коэффициент теплопроводности

$$x = \frac{75}{16a_{11}}$$

То же для вязкости одноатомного газа

Аналогичным образом имеем

$$B_0 = \frac{5}{b_{00}}, \quad \eta = \frac{5m}{4b_{00}}$$

В интеграле (10.15) при $l = s = 0$ находим

$$\Delta \left(v_\alpha v_\beta - \frac{1}{3} v^2 \delta_{\alpha\beta} \right) = \frac{1}{2} (v_{\text{отн} \alpha} v_{\text{отн} \beta} - v'_{\text{отн} \alpha} v'_{\text{отн} \beta})$$

Квадрат этого выражения есть

$$\frac{1}{2} v_{\text{отн}}^4 \sin^2 \theta$$

После интегрирования по d^3V и по направлениям $\mathbf{v}_{\text{отн}}$ оказывается, что $b_{00} = a_{11}$, так что

$$\eta = \frac{4mx}{15}$$

Для одноатомного газа теплоемкость $c_p = 5/2$. Поэтому отношение кинематической вязкости $\nu = \frac{\eta}{Nm}$ к температуропроводности $\chi = \frac{x}{Nc_p}$ (так называемое число Прандтля) в рассматриваемом приближении оказывается равным

$$\frac{\nu}{\chi} = \frac{2}{3}$$

вне зависимости от закона взаимодействия атомов.

теплопроводность и вязкость одноатомного газа, рассматривая атомы как твердые упругие шарики

В том же приближении найти теплопроводность и вязкость одноатомного газа, рассматривая атомы как твердые упругие шарики диаметра d .

Сечение рассеяния шарика на шарике эквивалентно рассеянию точечной частицы на непроницаемой сфере радиуса d ;

поэтому

....

8.3.2 (!) Диффузия легкого газа в тяжелом

тут какая-то теория диффузии без УФП, я так и не понял, почему так и чт это такое.

теория

Явление диффузии в смеси двух газов мы изучим для некоторых частных случаев, допускающих сравнительно далеко идущее теоретическое исследование.

Обозначим плотности числа частиц двух компонент смеси через N_1 и N_2 и определим концентрацию смеси как $c = N_1/N$, где $N = N_1 + N_2$.

Полная плотность числа частиц связана с давлением и температурой согласно $N = P/T$.

Давление газа постоянно по его объему; концентрация же и температура пусть меняются вдоль оси x (допуская изменение температуры, мы тем самым включаем в рассмотрение также и термодиффузию).

Рассмотрим диффузию в смеси газов, из которых один («тяжелый») состоит из молекул с массой, большой по сравнению с массой частиц другого («легкого») газа.

Легкий газ будем считать одноатомным.

Поскольку средняя тепловая энергия поступательного движения всех частиц (при заданной температуре одинакова, то средняя скорость тяжелых молекул мала по сравнению со скоростью легких и их можно рассматривать приближенно как неподвижные.

При столкновении легкой частицы с тяжелой последнюю можно считать остающейся неподвижной; скорость же легкой частицы меняет направление, оставаясь неизменной по своей абсолютной величине.

В этом параграфе рассмотрим случай, когда концентрация легкого газа в смеси мала (пусть это будет газ 1). Тогда столкновения его атомов друг с другом относительно редки и можно считать, что легкие частицы сталкиваются только с тяжелыми.

В общем случае произвольной газовой смеси для функции распределения частиц каждой из компонент смеси должно быть составлено свое кинетическое уравнение, в правую часть кото-

рого входит сумма интегралов столкновений частиц данной компоненты с частицами ее же и других компонент. В рассматриваемом частном случае, однако, целесообразно произвести вывод упрощенного кинетического уравнения заново.

Искомое уравнение должно определять функцию распределения частиц легкого газа; обозначим ее через $f(\mathbf{p}, x)$. В сделанных предположениях столкновения легких частиц с тяжелыми не меняют распределения последних, и в задаче о диффузии это распределение можно считать заданным.

Пусть θ - угол между направлением импульса легкой частицы $\mathbf{p} = m_1 \mathbf{v}$ и осью x . В силу симметрии условий задачи очевидно, что функция распределения будет зависеть (помимо переменных p и x) только от угла θ . Обозначим через $d\sigma = F(p, \alpha) d\alpha$ сечение столкновений, в результате которых легкая частица, имевшая импульс \mathbf{p} , приобретает импульс $\mathbf{p}' = m \mathbf{v}'$, направленный в элементе телесных углов $d\Omega$; α есть угол между векторами \mathbf{p} и \mathbf{p}' (абсолютные величины которых одинаковы). Вероятность частице испытать такое столкновение на единице пути есть $N_2 d\sigma$, где N_2 - плотность числа тяжелых частиц. Вероятность же, отнесенная к единице времени, получается умножением еще на скорость частицы: $N_2 v d\sigma$.

Рассмотрим частицы, находящиеся в заданной единице объема и обладающие импульсом в заданном интервале абсолютных значений dp , направленным в элементе телесных углов $d\Omega$. Число таких частиц есть $f d^3p = f(p, \theta, x) p^2 dp d\Omega$. Из них в единицу

времени в результате столкновений приобретет импульс \mathbf{p}' , направленный в do' ,

$$f(p, \theta, x) p^2 dp do \cdot N_2 v F(p, \alpha) do'$$

частиц. Всего, следовательно, изменит направление импульса

$$d^3 p \int N_2 v f(p, \theta, x) F(p, \alpha) do'$$

частиц. Наоборот, из числа частиц в $d^3 p' = p'^2 dp' do'$ приобретет скорость, направленную в do ,

$$f(p', \theta', x) p'^2 dp' do' \cdot N_2 v' F(p', \alpha) do$$

частиц. Поскольку $p' = p$, то для полного числа частиц, приобретающих в результате столкновений скорость в $d^3 p$, имеем

$$d^3 p \int N_2 v f(p, \theta', x) F(p, \alpha) do'$$

Таким образом, изменение числа частиц в элементе $d^3 p$ равно разности

$$d^3 p \cdot N_2 v \int F(p, \alpha) [f(p, \theta', x) - f(p, \theta, x)] do'$$

С другой стороны, это изменение должно быть равно полной производной по времени

$$d^3 p \frac{df}{dt} = d^3 p \cdot \mathbf{v} \nabla f = d^3 p \frac{\partial f}{\partial x} v \cos \theta$$

Приравняв оба выражения, получим искомое кинетическое уравнение в виде

$$v \cos \theta \frac{\partial f}{\partial x} = N_2 v \int F(p, \alpha) [f(p, \theta', x) - f(p, \theta, x)] do' \equiv \text{St } f$$

Отметим, что правая часть этого уравнения обращается в нуль для любой функции f , не зависящей от направления \mathbf{p} , а не только для максвелловской функции f_0 , как это имеет место для уравнения Больцмана. Это обстоятельство связано с предположением о неизменности величины импульса при рассеянии легких частиц на тяжелых: очевидно, что такие столкновения оставляют стационарным любое распределение легких частиц по энергиям.

Фактически уравнение (11.1) отвечает лишь нулевому приближению по малой величине m_1/m_2 , и уже в следующем приближении появляется релаксация по энергии.

Если градиенты концентрации и температуры не слишком велики (величины мало меняются на расстояниях порядка длины свободного пробега), то можно искать f в виде суммы

$$f = f_0(p, x) + \delta f(p, \theta, x)$$

где δf - малая поправка к локально-равновесной функции распределения f_0 , линейная по градиентам c и T .

В свою очередь ищем δf в виде

$$\delta f = \cos \theta \cdot g(p, x)$$

где g - функция только от p и x .

При подстановке в (11.1) в левой части уравнения достаточно оставить только член с f_0 ; в интеграле же столкновений член с f_0 выпадает:

$$\text{St } f = g N_2 v \int F(p, \alpha) (\cos \theta' - \cos \theta) do';$$

независящая от углов функция g вынесена из-под знака интеграла.

Этот интеграл можно упростить.

Выберем в качестве полярной оси для отсчета углов направление импульса \mathbf{p} .

транспортное сечение

Пусть φ и φ' - азимуты направлений оси x и импульса \mathbf{p}' относительно полярной оси. Тогда

$$\cos \theta' = \cos \theta \cos \alpha + \sin \theta \sin \alpha \cos (\varphi - \varphi')$$

Элемент телесных углов $do' = \sin \alpha d\alpha d\varphi'$, поскольку α - полярный угол для импульса \mathbf{p}' .

Интеграл от члена $\cos (\varphi - \varphi')$ обращается в нуль при интегрировании по $d\varphi'$.

В результате найдем, что

$$\text{St } f = -N_2 \sigma_t(p) v g \cos \theta = -N_2 \sigma_t(p) v \delta f$$

где введено обозначение

$$\sigma_t(p) = 2\pi \int F(p, \alpha) (1 - \cos \alpha) \sin \alpha d\alpha = \int (1 - \cos \alpha) d\sigma$$

величину σ_t называют транспортным сечением столкновений.

диффузионный поток

Из уравнения (11.1) находим теперь

$$g(p, x) = -\frac{1}{N_2 \sigma_t} \frac{\partial f_0}{\partial x}$$

Диффузионный поток i есть, по определению, плотность потока молекул одной из компонент смеси (в данном случае - легкой).

Он вычисляется по функции распределения как интеграл

$$\mathbf{i} = \int f \mathbf{v} d^3 p$$

или, поскольку вектор \mathbf{i} направлен по оси x ,

$$i = \int \cos \theta \cdot f v d^3 p = \int \cos^2 \theta \cdot g v d^2 p$$

(член с f_0 обращается в нуль при интегрировании по углам).

Подставив сюда (11.5), получим

$$i = -\frac{1}{N_2} \frac{\partial}{\partial x} \int \frac{f_0 v \cos^2 \theta}{\sigma_t(p)} d^3 p = -\frac{1}{3N_2} \frac{\partial}{\partial x} \int \frac{f_0 v}{\sigma_t} d^3 p$$

Это выражение можно записать в виде

$$i = -\frac{1}{3N_2} \frac{\partial}{\partial x} \left\{ N_1 \left\langle \frac{v}{\sigma_t} \right\rangle \right\}$$

где усреднение приводится по максвелловскому распределению. Наконец, вводим концентрацию $c = N_1/N \approx N_1/N_2$ (напомним, что по предположению $N_2 \gg N_1$) и заменяем $N_2 \approx N = P/T$. С учетом постоянства давления получим в результате

$$i = -\frac{T}{3} \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \frac{c}{T} \left\langle \frac{v}{\sigma_t} \right\rangle \right\} = -\frac{1}{3} \left\langle \frac{v}{\sigma_t} \right\rangle \frac{\partial c}{\partial x} - \frac{cT}{3} \frac{\partial}{\partial T} \left[\frac{1}{T} \left\langle \frac{v}{\sigma_t} \right\rangle \right] \frac{\partial T}{\partial x}$$

Эту формулу надо сравнить с феноменологическим выражением диффузионного потока

$$i = -ND \left(\nabla c + \frac{k_T}{T} \nabla T \right)$$

закрывающим в себе определения коэффициента диффузии D и термодиффузионного отношения k_T (коэффициентом же

термодиффузии называют произведение $D_T = Dk_T$; см. VI, §58)¹). Таким образом, находим

$$D = \frac{T}{3P} \left\langle \frac{v}{\sigma_t} \right\rangle$$

$$k_T = cT \frac{\partial}{\partial T} \ln \frac{\langle v/\sigma_t \rangle}{T}.$$

При диффузионном равновесии в неравномерно нагретом газе устанавливается такое распределение концентраций, при котором диффузионный поток $\mathbf{i} = 0$. Приравняв постоянной выражение, стоящее в фигурных скобках в (11.8), получим

$$c = \text{const} \cdot \frac{T}{\langle v/\sigma_t \rangle}$$

Предполагая сечение σ_t не зависящим от скорости и заметив, что $\langle v \rangle \sim (T/m_1)^{1/2}$, найдем, что при диффузионном равновесии в смеси с малой концентрацией легкого газа последняя пропорциональна \sqrt{T} ; другими словами, легкий газ концентрируется в местах с большей температурой. По порядку величины коэффициент диффузии

$$D \sim \bar{v}l$$

где \bar{v} — средняя тепловая скорость молекул легкого газа, а $l \sim 1/(N\sigma)$ — длина свободного пробега.

известный элементарный вывод

Напомним известный элементарный вывод этой формулы.

Число молекул газа 1, проходящих слева направо в 1 с через единичную площадку, перпендикулярную оси x , равно по порядку величины произведению $N_1 \bar{v}$, причем плотность N_1 должна быть взята на расстоянии l влево от площадки, т. е. в тех местах, откуда молекулы достигают эту площадку уже без столкновений. Аналогичным образом определяется число молекул, пересекающих ту же площадку справа налево, а разность обоих чисел дает диффузионный поток:

$$i \sim N_1(x-l)\bar{v} - N_1(x+l)\bar{v} \sim -l\bar{v} \frac{dN_1}{dx}$$

откуда и следует (11.13)²).

8.3.3 (!) Диффузия тяжелого газа в легком

теория

Рассмотрим теперь обратный предельный случай, когда мала концентрация тяжелого газа в смеси.

В этом случае коэффициент диффузии можно вычислить косвенным способом, не прибегая к помощи кинетического уравнения.

Именно, определим так называемую подвижность частиц тяжелого газа, предполагая его находящимся во внешнем поле.

Подвижность же b связана с коэффициентом диффузии этих же частиц известным соотношением Эйнштейна

$$D = bT$$

см (VI, §59)

Подвижность есть, по определению, коэффициент пропорциональности между средней скоростью V , приобретаемой частицей газа во внешнем поле, и действующей на частицу со стороны поля силой \mathbf{f} :

$$\mathbf{V} = b\mathbf{f}$$

Скорость же \mathbf{V} определяется в данном случае из условия взаимной компенсации силы \mathbf{f} и силы сопротивления \mathbf{f}_r , испытываемой движущейся тяжелой частицей со стороны легких (столкновениями тяжелых частиц друг с другом можно пренебречь ввиду их относительной редкости).

Функция распределения легких частиц является при этом максвелловской:

$$f_0 = \frac{N_1}{(2\pi m_1 T)^{3/2}} \exp\left(-\frac{m_1 v^2}{2T}\right)$$

где m_1 — масса легкой частицы. Рассмотрим какую-нибудь одну определенную тяжелую частицу; пусть ее скорость есть \mathbf{V} . Перейдем теперь к системе координат, движущейся вместе с этой частицей, и пусть \mathbf{v} обозначает скорости легких частиц в этой новой системе.

Функция распределения легких частиц в этой системе координат есть $f_0(\mathbf{v} + \mathbf{V})$ (ср. с (6.9)). Предполагая скорость \mathbf{V} малой, можем написать

$$f_0(\mathbf{v} + \mathbf{V}) \approx f_0(v) \left(1 - \frac{m_1 \mathbf{v} \mathbf{V}}{T}\right)$$

Искомую силу сопротивления \mathbf{f}_r можно вычислить как полный импульс, передаваемый тяжелой частице легкими, которые сталкиваются с нею в единицу времени. Тяжелая частица остается при столкновении неподвижной. Легкая же частица приносит с собой импульс $m_1 \mathbf{v}$; после столкновения, при котором ее импульс поворачивается на угол α , она уносит с собой импульс, равный в среднем $m_1 \mathbf{v} \cos \alpha$. Поэтому импульс, передаваемый при таком столкновении тяжелой частице, равен в среднем $m_1 \mathbf{v} (1 - \cos \alpha)$. Умножая его на плотность потока легких частиц

со скоростью \mathbf{v} и на сечение $d\sigma$ такого столкновения и интегрируя, получим полный передаваемый тяжелой частице импульс:

$$\mathbf{f}_r = m_1 \int f_0(\mathbf{v} + \mathbf{V}) v \mathbf{v} \sigma_t d^3 p$$

где опять введено обозначение (11.4). При подстановке сюда $f_0(\mathbf{v} + \mathbf{V})$ в виде (12.3) первый член обращается в нуль (интегрированием по направлениям скорости \mathbf{v}), так что остается

$$\mathbf{f}_r = -\frac{m_1^2}{T} \int f_0(v) (\mathbf{V} \mathbf{v}) \mathbf{v} v \sigma_t d^3 p$$

или, усредняя по направлениям \mathbf{v} ,

$$\mathbf{f}_r = -\frac{m_1^2}{3T} \mathbf{V} \int f_0(v) \sigma_t v^3 d^3 p = -N_1 \frac{m_1^2}{3T} \mathbf{V} \langle \sigma_t v^3 \rangle$$

где угловые скобки снова обозначают усреднение по обычному максвелловскому распределению. Наконец, имея в виду, что в рассматриваемом случае $N_1 \gg N_2$, пишем $N_1 \approx N = P/T$, так что

$$\mathbf{f}_r = -\frac{m_1^2 P}{3T^2} \langle \sigma_t v^3 \rangle \mathbf{V}$$

Приравняв нулю сумму силы сопротивления \mathbf{f}_r и внешней силы \mathbf{f} , получим согласно (12.2) подвижность b , а затем и искомый коэффициент диффузии

$$D = bT = \frac{3T^3}{m_1^2 P \langle \sigma_t v^3 \rangle}$$

термодиффузия

Что касается термодиффузии, то для ее вычисления в рассматриваемом случае необходимо было бы знать функцию распределения частиц легкого газа при наличии в нем градиента температуры. Поэтому коэффициент термодиффузии не может быть вычислен здесь в общем виде.

По порядку величины $D \sim \bar{v}/N\sigma$, где $\bar{v} \sim \sqrt{T/m_1}$ - снова (как и в (11.13)) средняя тепловая скорость молекул легкого газа. Таким образом, порядок величины коэффициента диффузии в обоих случаях одинаков:

$$D \sim \frac{T^{3/2}}{\sigma P m_1^{1/2}}$$

Коэффициент диффузии легкого газа в тяжелом в простейшей модели

Определим коэффициент диффузии в смеси двух газов (легкого и тяжелого), рассматривая их частицы как твердые упругие шарики диаметров d_1 и d_2 .

Сечение столкновений $d\sigma = \pi (d_1 + d_2)^2 d\Omega / (16\pi)$, откуда транспортное сечение $\sigma_t = \pi (d_1 + d_2)^2 / 4$ (в данном случае совпадает с полным сечением σ).

Коэффициент диффузии имеет вид

$$D = \frac{AT^{3/2}}{(d_1 + d_2)^2 P m_1^{1/2}}$$

где m_1 - масса легкой частицы, а A - численный коэффициент.

В случае малой концентрации легкого газа вычисление по (11.10) дает

$$A = \frac{4}{3} \left(\frac{2}{\pi} \right)^{3/2} = 0,68$$

При малой же концентрации тяжелого газа (12.4) дает

$$A = \frac{3}{2\sqrt{2\pi}} = 0,6$$

Обратим внимание на близость значений A в обоих предельных случаях.

8.3.4 Кинетические явления в газе во внешнем поле (-)

теория

Вращательные степени свободы молекул создают тот механизм, через который внешнее магнитное или электрическое поле может оказывать влияние на кинетические явления в газе).

Характер этого влияния одинаков в магнитном и электрическом случаях; будем говорить сначала о газе в магнитном поле

Вращающаяся молекула обладает, вообще говоря, магнитным моментом, среднее (в квантовомеханическом смысле) значение которого обозначим через μ .

Магнитное поле будем предполагать ограниченным по величине настолько, что произведение μB мало по сравнению с интервалами тонкой структуры молекулярных уровней ²⁾. Тогда можно пренебречь влиянием поля на состояние молекулы, так что магнитный момент вычисляется по ее невозмущенному состоянию. При не слишком низких температурах (которые мы и рассматриваем) величина μB будет мала также и по сравнению с T ; это позволяет

пренебречь влиянием поля на равновесную функцию распределения молекул газа.

Магнитный момент направлен вдоль вращательного момента молекулы \mathbf{M} ; напишем его в виде

$$\boldsymbol{\mu} = \gamma \mathbf{M}$$

Классическому вращению молекулы отвечают большие вращательные квантовые числа; при этом можно пренебречь в \mathbf{M} различием между полным (включающим спин) и вращательным моментами.

Значение постоянного коэффициента γ зависит от рода молекулы и природы ее магнитного момента.

Так, для двухатомной молекулы с отличным от нуля спином S имеем

$$\gamma \approx \frac{2\sigma}{M} \mu_B$$

где μ_B - магнетон Бора, а число $\sigma = J - K$ - разность между квантовыми числами полного момента J и вращательного момента K (эта разность пробегает значения $S, S-1, \dots, -S$); в знаменателе же различие между J и K несущественно: $M \approx \hbar J \approx \hbar K$. В формуле (13.2) предполагается, что взаимодействие спин-ось в молекуле мало по сравнению с интервалами вращательной структуры уровней (случай b по Гунду)).

В магнитном поле B на молекулу действует момент сил, равный $[\boldsymbol{\mu} \mathbf{B}]$. Под его влиянием вектор \mathbf{M} перестает быть постоянным в течение «свободного» движения молекулы и меняется согласно уравнению

$$\frac{d\mathbf{M}}{dt} = [\boldsymbol{\mu} \mathbf{B}] = -\gamma [\mathbf{B} \mathbf{M}]$$

- вектор \mathbf{M} прецессирует вокруг направления поля с угловой скоростью $-\gamma \mathbf{B}$. В связи с этим в левую часть кинетического уравнения должен быть добавлен член $(\partial f / \partial \mathbf{M}) \dot{\mathbf{M}}$, так что уравнение принимает вид

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \gamma [\mathbf{M} \mathbf{B}] \frac{\partial f}{\partial \mathbf{M}} = \text{St } f$$

В число переменных Γ , от которых зависит функция распределения, должна быть включена также и дискретная переменная σ , определяющая значение магнитного момента (если таковая имеется, как в (13.2)).

В задачах о теплопроводности и вязкости снова рассматриваем распределение, близкое к равновесному, представив его в виде

$$f = f_0(1 + \chi/T)$$

Покажем прежде всего, что член с производной $\partial f_0 / \partial \mathbf{M}$ в кинетическом уравнении выпадает.

Действительно, поскольку f_0 зависит только от энергии молекулы $\varepsilon(\Gamma)$, а производная $\partial \varepsilon / \partial \mathbf{M}$ есть угловая скорость Ω , то

$$\gamma [\mathbf{M} \mathbf{B}] \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{M}} = \gamma ([\mathbf{M} \mathbf{B}] \Omega) \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}$$

Для молекул типа ротатора и шарового волчка направления \mathbf{M} и Ω совпадают, так что выражение (13.6) обращается в нуль

тождественно.

В других же случаях оно обращается в нуль после усреднения по быстро меняющимся фазам, необходимость которого была объяснена в §1.

При вращении молекул типа симметрического или асимметрического волчка быстро меняется как направление осей самой молекулы, так и направление ее угловой скорости Ω .

После указанного усреднения в Ω может остаться лишь составляющая Ω_M вдоль постоянного вектора \mathbf{M} , но для такой составляющей произведение $[\mathbf{M}\mathbf{B}]\Omega_M = 0$.

Остальные члены в кинетическом уравнении преобразуются так же, как это было сделано в §7(или §8).

Так, для задачи о теплопроводности находим уравнение

$$\frac{\varepsilon(\Gamma) - c_p T}{T} \mathbf{v} \nabla T = -\gamma [\mathbf{M}\mathbf{B}] \frac{\partial \chi}{\partial \mathbf{M}} + I(\chi)$$

Решение этого уравнения снова надо искать в виде $\chi = g \nabla T$, но для составления векторной функции $g(\Gamma)$ мы имеем в своем распоряжении уже не два, а три вектора: \mathbf{v} , \mathbf{M} , \mathbf{B} .

Внешнее поле создает в газе избранное направление.

В связи с этим процесс теплопроводности становится анизотропным и вместо скалярного коэффициента ж надо ввести тензор теплопроводности $x_{\alpha\beta}$, определяющий тепловой поток согласно

$$q_\alpha = -x_{\alpha\beta} \frac{\partial T}{\partial x_\beta}$$

Тензор $x_{\alpha\beta}$ вычисляется по функции распределения как интеграл

$$x_{\alpha\beta} = -\frac{1}{T} \int f_0 \varepsilon v_\alpha g_\beta d\Gamma$$

)ср.

(7.5)) Общий вид тензора второго ранга, зависящего от вектора \mathbf{B} есть

$$x_{\alpha\beta} = x \delta_{\alpha\beta} + x_1 b_\alpha b_\beta + x_2 e_{\alpha\beta\gamma} b_\gamma$$

где $\mathbf{b} = \mathbf{B}/B$, $e_{\alpha\beta\gamma}$ - единичный антисимметричный тензор, а x , x_1 , x_2 - скаляры, зависящие от абсолютной величины поля B .

Тензор (13.10) обладает, очевидно, свойством ¹⁾

$$x_{\alpha\beta}(\mathbf{B}) = x_{\beta\alpha}(-\mathbf{B})$$

Выражению (13.10) отвечает тепловой поток

$$\mathbf{q} = -x \nabla T - x_1 \mathbf{b}(\mathbf{b} \nabla T) - x_2 [\nabla T \cdot \mathbf{b}]$$

Последний член здесь представляет собой, как говорят, нечетный эффект: эта часть теплового потока меняет знак при изменении знака поля.

Интегральный член $I(\chi)$ в правой части уравнения (13.7) дается формулой (6.5).

В его подынтегральном выражении содержится функция f_0 , пропорциональная плотности газа N .

Выделив этот множитель и разделив на него обе части уравнения, найдем, что N входит в уравнение только в комбинациях \mathbf{B}/N и $\nabla T/N$ с полем и градиентом температуры.

Отсюда ясно, что функция $f_0\chi = f_0 g\nabla T$ будет зависеть от параметров N и B только в виде отношения B/N ; только от этой же величины будут зависеть и интегралы (13.9), а тем самым и коэффициенты x, x_1, x_2 в (13.12).

Плотность N пропорциональна (при заданной температуре) давлению газа P .

Таким образом, теплопроводность газа в магнитном поле зависит от величины поля и от давления только через отношение B/P^1 .

При увеличении B первый член в правой части уравнения (13.7) возрастает, а второй не меняется.

Отсюда ясно, что в пределе $B \rightarrow \infty$ решение уравнения должно представлять собой функцию, зависящую только от направления (но не от величины) поля, причем эта функция должна обращать тождественно в нуль член $[\mathbf{MB}]\partial\chi/\partial\mathbf{M}$ в уравнении; соответственно коэффициенты x, x_1, x_2 стремятся при $B \rightarrow \infty$ к постоянным (не зависящим от B) пределам.

Аналогичным образом рассматривается задача о вязкости газа в магнитном поле.

Соответствующее кинетическое уравнение имеет вид

$$\left(mv_\alpha v_\beta - \frac{\varepsilon(\Gamma)}{c_v}\delta_{\alpha\beta}\right)V_{\alpha\beta} = I(\chi) - \gamma[\mathbf{MB}]\frac{\partial\chi}{\partial\mathbf{M}}$$

(ср.

(6.19)).

Решение этого уравнения надо искать в виде $\chi = g_{\alpha\beta}V_{\alpha\beta}$.

Вместо двух коэффициентов вязкости η и ζ надо ввести теперь тензор четвертого ранга $\eta_{\alpha\beta\gamma\delta}$, определяющий тензор вязких напряжений согласно

$$\sigma'_{\alpha\beta} = \eta_{\alpha\beta\gamma\delta}V_{\gamma\delta}$$

по определению тензор $\eta_{\alpha\beta\gamma\delta}$ симметричен по парам индексов α, β и γ, δ .

По известной функции χ его компоненты вычисляются как интегралы

$$\eta_{\alpha\beta\gamma\delta} = - \int m v_\alpha v_\beta f_0 g_{\gamma\delta} d\Gamma$$

Вычисленный таким образом тензор вязкости будет автоматически удовлетворять условию

$$\eta_{\alpha\beta\gamma\delta}(\mathbf{B}) = \eta_{\gamma\delta\alpha\beta}(-\mathbf{B})$$

выражающему собой принцип симметрии кинетических коэффициентов.

С помощью вектора $\mathbf{b} = \mathbf{B}/B$ (и единичных тензоров $\delta_{\alpha\beta}$ и $e_{\alpha\beta\gamma}$) можно составить следующие независимые тензорные комбинации со свойствами симметрии тензора $\eta_{\alpha\beta\gamma\delta}$: 1) $\delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta} + \delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma}$ 2) $\delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta}$ 3) $\delta_{\alpha\gamma}b_\beta b_\delta + \delta_{\beta\gamma}b_\alpha b_\delta + \delta_{\alpha\delta}b_\beta b_\gamma + \delta_{\beta\delta}b_\alpha b_\gamma$ 4) $\delta_{\alpha\beta}b_\gamma b_\delta + \delta_{\gamma\delta}b_\alpha b_\beta$ 5) $b_\alpha b_\beta b_\gamma b_\delta$ 6) $b_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta} + b_{\beta\gamma}\delta_{\alpha\delta} + b_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma} + b_{\beta\delta}\delta_{\alpha\gamma}$

$$7) b_{\alpha\gamma}b_\beta b_\delta + b_{\beta\gamma}b_\alpha b_\delta + b_{\alpha\delta}b_\beta b_\gamma + b_{\beta\delta}b_\alpha b_\gamma$$

где $b_{\alpha\beta} = -b_{\beta\alpha} = e_{\alpha\beta\gamma}b_\gamma$. Во всех этих комбинациях, за исключением четвертой, свойство (13.16) возникает автоматически как следствие симметрии по парам индексов α, β и γ, δ ; в четвертом же выражении объединение двух членов вызывается лишь условием (13.16)¹⁾ Соответственно числу тензоров (13.17) газ в магнитном поле характеризуется в общем случае семью независимыми коэффициентами вязкости.

Определим их как коэффициенты в следующем выражении тензора вязких напряжений:

$$\begin{aligned} \sigma'_{\alpha\beta} = & 2\eta \left(V_{\alpha\beta} - \frac{1}{3}\delta_{\alpha\beta} \operatorname{div} \mathbf{V} \right) + \zeta \delta_{\alpha\beta} \operatorname{div} \mathbf{V} + \\ & + \eta_1 (2V_{\alpha\beta} - \delta_{\alpha\beta} \operatorname{div} \mathbf{V} + \delta_{\alpha\beta} V_{\gamma\delta} b_\gamma b_\delta - 2V_{\alpha\gamma} b_\gamma b_\beta - \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -2V_{\beta\gamma}b_{\gamma}b_{\alpha} + b_{\alpha}b_{\beta}\operatorname{div}\mathbf{V} + b_{\alpha}b_{\beta}V_{\gamma\delta}b_{\gamma}b_{\delta}) + \\
& + 2\eta_2 (V_{\alpha\gamma}b_{\gamma}b_{\beta} + V_{\beta\gamma}b_{\gamma}b_{\alpha} - 2b_{\alpha}b_{\beta}V_{\gamma\delta}b_{\gamma}b_{\delta}) + \\
& + \eta_3 (V_{\alpha\gamma}b_{\beta\gamma} + \nabla_{\beta\gamma}b_{\alpha\gamma} - \nabla_{\gamma\delta}b_{\alpha\gamma}b_{\beta}b_{\delta} - V_{\gamma\delta}b_{\beta\gamma}b_{\alpha}b_{\delta}) + \\
& + 2\eta_4 (V_{\gamma\delta}b_{\alpha\gamma}b_{\beta}b_{\delta} + V_{\gamma\delta}b_{\beta\gamma}b_{\alpha}b_{\delta}) + \zeta_1 (\delta_{\alpha\beta}V_{\gamma\delta}b_{\gamma}b_{\delta} + b_{\alpha}b_{\beta}\operatorname{div}\mathbf{V})
\end{aligned}$$

$(V_{\alpha\beta}.$

определено в (6.12)).

Оно составлено таким образом, что $\eta, \eta_1, \dots, \eta_4$ стоят коэффициентами при тензорах, обращающихся в нуль при упрощении по индексам α, β .

Коэффициенты же ζ и ζ_1 стоят при тензорах с отличным от нуля следом; их можно назвать коэффициентами второй вязкости.

Обратим внимание на то, что они содержат не только скаляр $\operatorname{div}\mathbf{V}$, но и $V_{\gamma\delta}b_{\gamma}b_{\delta}$.

Первые два члена в (13.18) соответствуют обычному выражению тензора напряжений, так что η и ζ - обычные коэффициенты вязкости.

Отметим, что тензоры α_{β} и $\eta_{\alpha\beta\gamma\delta}$ автоматически оказываются истинными тензорами, так что эти выражения удовлетворяют требованию симметрии по отношению к инверсии.

Поэтому отказ от этого требования (для газа стереоизомерного вещества) не привел бы к появлению в них каких-либо новых членов:

Такой отказ приводит, однако, к появлению новых эффектов - возникновению теплового потока $q^{(V)}$ под влиянием градиентов скорости и возникновению вязких напряжений $\sigma'^{(T)}$ под влиянием градиента температуры.

Эти (так называемые перекрестные) эффекты описываются формулами вида

$$q_{\gamma}^{(V)} = c_{\gamma,\alpha\beta}V_{\alpha\beta}, \quad \sigma'_{\alpha\beta}{}^{(T)} = -a_{\alpha\beta,\gamma}\frac{\partial T}{\partial x_{\gamma}}$$

где $c_{\gamma,\alpha\beta}$ и $a_{\alpha\beta,\gamma}$ - тензоры третьего ранга, симметричные по паре индексов, отделенных запятой.

При указанном в §9 выборе величин \dot{x}_a и X_a кинетическими коэффициентами γ_{ab} и γ_{ba} являются $Tc_{\gamma,\alpha\beta}$ и $T^2a_{\alpha\beta,\gamma}$.

Поэтому в силу принципа Онсагера при наличии магнитного поля должно быть

$$Ta_{\alpha\beta,\gamma}(\mathbf{B}) = c_{\gamma,\alpha\beta}(-\mathbf{B})$$

Общий вид таких тензоров:

$$\begin{aligned}
a_{\alpha\beta,\gamma} = & a_1b_{\alpha}b_{\beta}b_{\gamma} + a_2b_{\gamma}\delta_{\alpha\beta} + \\
& + a_3(b_{\alpha}\delta_{\beta\gamma} + b_{\beta}\delta_{\alpha\gamma}) + a_4(b_{\alpha\gamma}b_{\beta} + b_{\beta\gamma}b_{\alpha})
\end{aligned}$$

Все члены в этом выражении - псевдотензоры, так что соотношения (13.19) с такими коэффициентами не инвариантны по отношению к инверсии.

Остановимся коротко на кинетических явлениях в газе в электрическом поле.

Рассмотрим газ, состоящий из полярных (т.

е.

обладающих дипольным моментом d) молекул типа симметрического волчка.

В электрическом поле на полярную молекулу действует момент сил $[dE]$, так что в кинетическом уравнении появится член

$$\dot{\mathbf{M}}\frac{\partial f}{\partial \mathbf{M}} = [dE]\frac{\partial f}{\partial \mathbf{M}}$$

Направление \mathbf{d} совпадает с осью молекулы и не имеет отношения к ее вращательному моменту \mathbf{M} .

Однако в результате усреднения по быстрой прецессии оси волчка вокруг направления постоянного вектора \mathbf{M} в написанном члене останется лишь проекция d на направление \mathbf{M} и он примет вид

$$\gamma[\mathbf{ME}] \frac{\partial f}{\partial \mathbf{M}}$$

где $t = d/M$, причем переменная σ (косинус угла между \mathbf{d} и \mathbf{M}) пробегает теперь непрерывный ряд значений в интервале от -1

до +1.

Выражение (13.22) отличается от соответствующего члена в магнитном случае лишь заменой B на E .

Поэтому остаются в силе и все написанные выше кинетические уравнения и следствия из них).

Некоторое отличие возникает, однако, в связи с тем, что электрическое поле \mathbf{E} - истинный (а не псевдо) вектор и что оно не меняется при обращении времени.

В силу последнего обстоятельства принцип Онсагера для тензоров теплопроводности и вязкости выразится теперь равенствами

$$x_{\alpha\beta}(\mathbf{E}) = x_{\beta\alpha}(\mathbf{E}), \quad \eta_{\alpha\beta\gamma\delta}(\mathbf{E}) = \eta_{\gamma\delta\alpha\beta}(\mathbf{E})$$

вместо (13.11) и (13.16).

Соответственно в выражениях (13.10) и (13.18) (где теперь $\mathbf{b} = \mathbf{E}/E$) будет $\mathfrak{x}_2 \equiv 0$, $\eta_3 = \eta_4 \equiv 0^2$).

В то же время перекрестные эффекты оказываются возможными не только в газе стереоизомерного вещества (где выражение (13.21) остается в силе целиком), но и в газе из нестереоизомерных молекул: выражение (13.21) с $a_4 \equiv 0$ является теперь истинным тензором.

8.3.5 Явления в слабо разреженных газах

обзор

теория

Гидродинамические уравнения движения газа с учетом процессов теплопроводности и внутреннего трения содержат тепловой поток \mathbf{q}' (диссипативная часть потока энергии \mathbf{q}) и тензор вязких напряжений $\sigma'_{\alpha\beta}$ (диссипативная часть потока импульса $\Pi_{\alpha\beta}$).

Эти уравнения приобретают реальный смысл после того, как \mathbf{q}' и $\sigma'_{\alpha\beta}$ выражены через градиенты температуры и скорости газа.

Но обычные выражения, линейные по этим градиентам, представляют собой лишь первые члены разложения по степеням малого отношения l/L - длины свободного пробега к характерным размерам задачи (его называют числом Кнудсена K).

Если это отношение не очень мало, может иметь смысл введение поправок, учитывающих члены следующего порядка малости по l/L .

Такие поправки возникают как в самих уравнениях движения, так и в граничных условиях к ним на поверхности обтекаемых газом тел.

Последовательные члены разложений потоков \mathbf{q}' и $\sigma'_{\alpha\beta}$ выражаются через пространственные производные температуры, давления и скорости различных порядков и в различных степенях.

Эти члены должны вычисляться в принципе путем перехода к следующим приближениям в решении кинетического уравнения.

«Нулевому» приближению соответствует локально равновесная функция распределения f_0 ; этому приближению отвечают гидродинамические уравнения идеальной жидкости.

Первому приближению соответствует функция распределения вида $f = f_0 (1 + \chi^{(1)}/T)$, рассматривавшаяся в §6 – 8, и ему отвечают гидродинамические уравнения Навье-Стокса и уравнение теплопроводности.

В следующем, втором, приближении функцию распределения надо искать и виде

$$f = f_0 \left[1 + \frac{1}{T} \chi^{(1)} + \frac{1}{T} \chi^{(2)} \right]$$

и линеаризовать кинетическое уравнение по поправке второго порядка $\chi^{(2)}$.

Получающееся уравнение имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{T}{f_0} \left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \nabla \right) \frac{f_0 \chi^{(1)}}{T} + \frac{T}{f_0} \left(\frac{\partial}{\partial t} \right)_1 f_0 - \\ - \frac{1}{T^2} \int w' f_{01} [\chi^{(1)'} \chi_1^{(1)'} - \chi^{(1)} \chi_1^{(1)}] d\Gamma_1 d\Gamma' d\Gamma'_1 = \frac{1}{T} I(\chi^{(2)}) \end{aligned}$$

где I – прежний линейный интегральный оператор (6.5).

Производные по времени от макроскопических величин, получающиеся в левой части уравнения от дифференцирования $(f_0 \chi)/T$, должны быть выражены через пространственные производные с помощью гидродинамических уравнений первого приближения.

Символ $(\partial/\partial t)_1$ во втором члене слева означает, что исключение временных производных должно производиться с помощью уравнений, в которых опущены члены нулевого порядка и оставлены только члены первого порядка, т. е.

содержащие η , ζ или κ .

Мы не будем выписывать все многочисленные члены в \mathbf{q}' и $\sigma'_{\alpha\beta}$, возникающие во втором приближении (эти члены называют барнеттовскими; D. Burnett, 1935).

В большом числе случаев эти члены вносят в решение вклад, малый по сравнению с поправками в граничных условиях, о которых речь будет идти ниже.

В таких случаях учет поправок в самих уравнениях был бы неоправданным превышением над допустимой точностью.

Ограничимся рассмотрением лишь некоторых типичных поправочных членов и оценим их для движений различных типов.

Отметим прежде всего, что малый параметр $K = l/L$ определенным образом связан с двумя параметрами, характеризующими гидродинамическое движение, – числом Рейнольдса R и числом Маха M .

Напомним, что первое из них определяется как

$R \sim VL/\nu$, где характерный масштаб изменения скорости течения, а ν – кинематическая вязкость; число же Маха $M \sim V/u$, где u – скорость звука.

В газе порядок величины скорости звука совпадает со средней тепловой скоростью молекул \bar{v} , а кинематическая вязкость $\nu \sim (l\bar{v})$.

Поэтому $R \sim VL/(l\bar{v})$, $M \sim V/\bar{v}$, а число Кнудсена

$$K \sim M/R$$

Отсюда видно, что условие гидродинамичности движения, $K \ll 1$, накладывает определенное ограничение на относительный порядок величины чисел R и M .

Рассмотрим сначала «медленные» движения, в которых

$$R \lesssim 1, \quad M \ll 1$$

Рассмотрим какой-либо из барнеттовских членов в тензоре вязких напряжений, содержащих произведение двух первых производных от скорости, например

$$\rho l^2 \frac{\partial V_\alpha}{\partial x_\gamma} \frac{\partial V_\beta}{\partial x_\gamma}$$

написанный здесь коэффициент ρl^2 (ρ - плотность газа) - оценка по порядку величины.

Этот член дает в $\sigma'_{\alpha\beta}$ вклад $\sigma^{(2)} \sim \sim \rho l^2 V^2 / L^2$.

Порядок же величины основных (навь-стоксовых) членов в вязких напряжениях: $\sigma^{(1)} \sim \eta(\partial V / \partial x) \sim \rho \bar{v} V / L$, и отношение $\sigma^{(2)} / \sigma^{(1)} \sim l V / (L \bar{v}) \sim (l^2 / L^2) R$.

Поскольку $R \lesssim 1$, то мы видим, что члены (14.5) вносят в вязкие напряжения поправку относительного порядка $\lesssim (l/L)^2$, между тем как поправка в граничных условиях (см.

ниже) вносит в движение поправки относительного порядка l/L , т.

е.

значительно большие.

Еще меньше будут поправки, происходящие от членов вида)

$$\frac{\rho l^2}{m^2 \bar{v}^2} \frac{\partial T}{\partial x_\alpha} \frac{\partial T}{\partial x_\beta}$$

Но если перепады температуры задаются «извне» (скажем, погруженными в газ нагретыми телами), то барнеттовские члены вида (14.6) могут привести к возникновению стационарного движения с характерными скоростями, определяющимися условием

$$\partial (\sigma_{\alpha\beta}^{(1)} + \sigma_{\alpha\beta}^{(2)}) / \partial x_\beta = \partial P / \partial x_\alpha.$$

Оценка скорости движения дает

$$V \sim \frac{l}{L} \frac{(\Delta T)^3}{m \bar{v} T^2}$$

При оценке следует учесть, что лапласиан температуры можно выразить с помощью уравнения теплопроводности $\text{div}(\kappa \nabla) T = 0$ через квадрат ее градиента, а также, что движение вызывается только непотенциальной частью силы $\partial \sigma_{\alpha\beta}^{(2)} / \partial x_\beta$.

Потенциальная же часть силы уравновешивается давлением.

Аналогичные соображения относятся к поправочным членам в тепловом потоке \mathbf{q}' .

Из производных одной только температуры вообще нельзя составить поправочного члена второго порядка; первый (после $-x \nabla T$) такой поправочный член имеет вид $\text{const} \times \nabla \Delta T$ (Δ - оператор Лапласа), т.е. третьего порядка.

Члены же, содержащие наряду с производными от температуры еще и производные от скорости, например

$$\frac{\rho l^2}{m} \text{div } \mathbf{V} \cdot \nabla T$$

снова приводят к поправкам относительного порядка l^2 / L^2 .

Перейдем к «быстрым» движениям, в которых

$$R \gg 1, \quad M \lesssim 1$$

В таких случаях картина гидродинамического движения газа складывается из двух областей: объемной, в которой вязкие члены в уравнениях движения вообще несущественны, и тонкого пограничного слоя, в котором скорость газа быстро убывает.

Пусть, например, речь идет об обтекании газом плоской пластинки; направление обтекания выберем в качестве оси x .

Толщина δ пограничного слоя на пластинке:

$$\delta \sim \left(\frac{x\nu}{V} \right)^{1/2} \sim \left(\frac{x l \bar{v}}{V} \right)^{1/2}$$

где x - расстояние от ее передней кромки

(см. VI, § 39).

Характерный размер для изменения скорости вдоль оси x дается самой координатой x , а вдоль перпендикулярного пластинке направления оси y - толщиной пограничного слоя δ .

При этом $V_y \sim V_x \delta / x$, как это следует из уравнения непрерывности.

Главный член в навье-стоксовом тензоре вязких напряжений:

$$\sigma'_{xy} \sim \rho \nu \frac{\partial V_x}{\partial y} \sim \rho \frac{\bar{v} l V}{\delta}$$

Среди барнеттовских же членов в σ'_{xy} , однако, нет члена, который бы содержал квадрат $(\partial V_x / \partial y)^2$ - легко сообразить, что из производных $\partial V_\alpha / \partial x_\beta$ нельзя составить квадратичного по ним тензора второго ранга, xy -компонента которого содержала бы этот квадрат.

Самыми большими членами в $\sigma_{xy}^{(2)}$ могут быть лишь члены вида

$$\rho l^2 \frac{\partial V_x}{\partial y} \operatorname{div} \mathbf{V} \sim \frac{\rho l^2 V^2}{x \delta}$$

Их отношение к $\sigma_{xy}^{(1)} : \sigma^{(2)} / \sigma^{(1)} \sim l V / (x \bar{v}) \sim (l / \delta)^2$, т. е.

СНОВА второго порядка.

Покажем теперь, что поправочные члены в предельных условиях на границе между газом и твердыми телами приводят к эффектам первого порядка по l/L .

Поэтому заметные явления, обусловленные разреженностью газа, имеют место именно вблизи твердых поверхностей.

В неразрезанных газах граничным условием на поверхности твердого тела является равенство температур газа и тела.

В действительности, однако, это условие приближенно и имеет место лишь постольку, поскольку длину свободного пробега можно считать сколь угодно малой.

При учете же конечности длины свободного пробега на поверхности соприкосновения твердого тела и неравномерно нагретого газа имеется некоторая разность температур; эта разность обращается в нуль, вообще говоря, лишь при полном тепловом равновесии, когда температура газа постоянна).

Вблизи твердой поверхности (на небольших, но и не на слишком малых расстояниях от нее) градиент температуры газа можно считать постоянным, так что ход температуры как функции расстояния изображается прямой линией.

Однако в непосредственной близости от стенки (на расстояниях $\sim l$) ход температуры, вообще говоря, более сложен и ее градиент непостоянен.

Примерный ход температуры газа вблизи поверхности изображен на рис.

1 сплошной линией.

Однако этот истинный ход температуры в непосредственной близости стенки,

относящийся к расстояниям, сравнимым с длиной свободного пробега, несуществен "?" при рассмотрении распределения температуры во всем объеме газа.

При изучении распределения температуры около твердой Рис.

1 стенки нас интересует по существу только прямая часть кривой на рис.

1, простирающаяся на расстояния, большие по сравнению с длиной свободного пробега.

Уравнение этой прямой определяется углом ее наклона и отрезком, отсекаемым ею от оси ординат.

Таким образом,

нас интересует не истинный пристеночный скачок температуры,

а скачок, получающийся экстраполированием температуры

до самой стенки, считая ее градиент постоянным вблизи стен- стенки вплоть до равного нулю расстояния (штриховая прямая на рис.

1).

Под δT мы будем понимать именно такой экстраполи- экстраполированный скачок температуры, причем определим его как тем- температуру газа минус температура стенки (на рис. 1 температура стенки условно принята за нуль).

При равном нулю градиенте температуры скачок δ тоже исчезает.

Поэтому при не слишком больших градиентах температуры

$$\delta T = g \frac{\partial T}{\partial n}$$

(производная берется по направлению нормали к поверхности, направленной внутрь газа).

Коэффициент g можно назвать коэффициентом температурного скачка.

Если температура газа растет по направлению внутрь его объема ($\partial T / \partial n > 0$), то должно быть и $\delta T > 0$; следовательно, коэффициент g положителен.

Аналогичные явления имеют место на границе между твердой стенкой и движущимся газом.

Вместо того чтобы полностью «прилипнуть» к поверхности, разреженный газ сохраняет около нее некоторую конечную, хотя и малую скорость; происходит, как говорят, скольжение газа у поверхности.

Аналогично формуле (14.9) имеем для скорости v_0 этого скольжения:

$$v_0 = \xi \frac{\partial V_t}{\partial n}$$

где V_t - касательная составляющая скорости газа вблизи стенки.

Как и g , коэффициент скольжения ξ положителен.

К величине v_0 относятся те же замечания, которые были сделаны по поводу температурного скачка δT , определяемого (14.9).

Эта скорость является, строго говоря, не истинной скоростью газа у самой стенки, а скоростью, экстраполированной в предположении постоянства градиента $\partial V_t / \partial n$ в пристеночном слое газа.

Коэффициенты g и ξ имеют размерность длины и по порядку величины совпадают с длиной свободного пробега:

$$g \sim l, \quad \xi \sim l$$

Самые скачок температуры и скорость скольжения являются, следовательно, величинами первого порядка по l/L .

Для вычисления коэффициентов g и ξ надо было бы решать кинетическое уравнение для функции распределения молекул газа вблизи поверхности.

В этом уравнении должны были бы быть учтены столкновения молекул со стенкой, и потому должен быть известен закон, по которому происходит их рассеяние при таких столкновениях.

Если продолжить на рис.

1 штриховую прямую до ее пересечения с осью абсцисс, то она отсечет от этой оси отрезок длины g .

Другими словами, можно сказать, что распределение температуры при наличии температурного скачка такое же, каким оно было бы при отсутствии скачка, но со стенкой, отодвинутой на расстояние g .

То же самое относится к скольжению газа, причем стенка отодвигается на расстояние ξ .

Разумеется, при таких заменах в решениях гидродинамических задач должны сохраняться только члены первого порядка по g или ξ .

Поскольку учет скачков температуры или скорости эквивалентен смещению границ на расстояния порядка величины l , то вызванные этим поправки в решениях задач имеют порядок $l\partial/\partial x \sim l/L$ - первый по величине l/L .

Наряду с рассмотренными поправками к граничным условиям существуют еще и другие эффекты того же порядка по l/L , которые во многих случаях являются более важными, поскольку Здесь возникают некоторые качественно новые явления. Один из них состоит в возникновении движения газа вблизи неравномерно нагретой твердой поверхности - так называемое тепловое скольжение.

Этот эффект в известном смысле аналогичен термодиффузии в смеси газов.

Подобно тому как при наличии градиента температуры в газовой смеси столкновения с молекулами «чужого» газа приводят к появлению потока частиц, в данном случае поток возникает в результате столкновений с неравномерно нагретой стенкой молекул в узком (с толщиной $\sim l$) приповерхностном слое газа.

Обозначим тангенциальную скорость, приобретаемую газом вблизи стенки в результате теплового скольжения, символом \mathbf{V}_t , а тангенциальную составляющую градиента температуры $\nabla_t T$.

В первом приближении можно утверждать, что \mathbf{V}_t пропорциональна $\nabla_t T$, т.

е.

для изотропной поверхности

$$\mathbf{V}_t = \mu \nabla_t T$$

Коэффициент μ должен быть пропорционален длине пробега (поскольку он связан с частицами в слое газа такой толщины).

Тогда из соображений размерности ясно, что $\mu \sim l/(m\bar{v})$.

Выразив длину пробега через сечение столкновений и плотность газа, имеем $l \sim 1/(N\sigma) \sim T/(\sigma P)$ и окончательно

$$\mu \sim \frac{1}{\sigma P} \sqrt{\frac{T}{m}}$$

Знак коэффициента μ не определяется термодинамическими требованиями; согласно опытным данным обычно $\mu > 0$.

Наконец, еще один эффект первого порядка заключается в появлении в движущемся газе дополнительного поверхностного (т.

е.

сосредоточенного в пристеночном слое толщины $\sim l$) теп-

лового потока $\mathbf{q}'_{\text{пов}}$, пропорционального нормальному градиенту тангенциальной скорости:

$$\mathbf{q}'_{\text{пов}} = \varphi \frac{\partial \mathbf{V}_t}{\partial n}$$

(этот поток имеет размерность эрг/см-с).

Коэффициенты μ и φ связаны друг с другом соотношением, следующим из принципа Онсагера.

Для вывода этой связи рассмотрим «поверхностную» часть возрастания энтропии, $\dot{S}_{\text{пов}}$ связанную с пристеночным движением газа (и отнесенную к единице площади поверхности стенки).

Это возрастание складывается из двух частей.

Во-первых, наличие теплового потока $\mathbf{q}'_{\text{пов}}$ дает в производную $\dot{S}_{\text{пов}}$ вклад

$$-T^{-2} \mathbf{q}'_{\text{пов}} \nabla T$$

(ср.

аналогичное выражение для возрастания энтропии, связанного с объемным тепловым потоком, - VI, §49; IX, §88).

Во-вторых, на обтекаемую газом стенку действует сила трения, равная (будучи отнесена к единице площади) $-\eta \partial \mathbf{V}_t / \partial n$.

Диссипируемая в единицу времени энергия равна работе этой силы

$$-\eta \frac{\partial \mathbf{V}_t}{\partial n} \mathbf{V}_t$$

а поделенная на T она дает соответствующий вклад в возрастание энтропии.

Таким образом,

$$\dot{S}_{\text{пов}} = -\frac{1}{T^2} \mathbf{q}'_{\text{пов}} \nabla T - \frac{1}{T} \eta \mathbf{V}_t \frac{\partial \mathbf{V}_t}{\partial n}$$

Выберем теперь в качестве величин X_a , фигурирующих в общей формулировке принципа Онсагера (§ 9), векторы

$$\mathbf{X}_1 = \frac{1}{T^2} \nabla T, \quad \mathbf{X}_2 = \frac{1}{T} \frac{\partial \mathbf{V}_t}{\partial n}$$

Тогда сравнение (14.15) с общим выражением (9.3) показывает, что соответствующими величинами \dot{x}_a будут векторы

$$\dot{\mathbf{x}}_1 = \mathbf{q}'_{\text{пов}}, \quad \dot{\mathbf{x}}_2 = \eta \mathbf{V}_t$$

Роль же «уравнений движения» (4.3.3) играют соотношения (14.12) и (14.14); записав их в виде

$$\dot{\mathbf{x}}_1 = T \varphi \mathbf{X}_2, \quad \dot{\mathbf{x}}_2 = \eta \mu T^2 \mathbf{X}_1$$

мы приходим к искомому соотношению

$$\varphi = T \eta \mu$$

термомеханический эффект

Два сосуда, содержащие газ при различных температурах T_1 и T_2 , соединены длинной трубкой.

В результате теплового скольжения установится разность давлений между газами в обоих сосудах (термомеханический эффект).

Определить эту разность.

Решение.

Граничное условие на поверхности трубки при пуазейлевском течении под влиянием градиентов давления и температуры с учетом теплового скольжения гласит: $v = \mu dT/dx$ при $r = R$ (R - радиус трубки, ось x направлена вдоль ее длины).

Обычным образом (см.

VI, §17) находим распределение скоростей по сечению трубки:

$$v = -\frac{1}{4\eta} \frac{dP}{dx} (R^2 - r^2) + \mu \frac{dT}{dx}$$

Количество (масса) газа, протекающего через сечение трубки в единицу времени, равно

$$Q = -\frac{\rho\pi R^4}{8\eta} \frac{dP}{dx} + \rho\mu\pi R^2 \frac{dT}{dx}$$

) ρ - плотность газа).

При механическом равновесии $Q = 0$, откуда

$$\frac{dP}{dx} = \frac{8\eta\mu}{R^2} \frac{dT}{dx}$$

Интегрируя по всей длине трубки, находим для разности давлений:

$$P_2 - P_1 = \frac{8\eta\mu}{R^2} (T_2 - T_1)$$

(при не слишком больших разностях $T_2 - T_1$ коэффициенты η и μ можно считать постоянными).

Оценка порядка величины эффекта (с помощью (14.13) и (8.11)) дает

$$\frac{\delta P}{P} \sim \frac{l^2}{R^2} \frac{\delta T}{T}$$

Распределение скоростей по сечению трубки при $Q = 0$ имеет вид

$$v = \mu \left(\frac{2r^2}{R^2} - 1 \right) \frac{dT}{dx}$$

Вдоль стенок газ течет в направлении градиента температуры ($v > 0$), а вблизи оси трубки - в противоположном направлении ($v < 0$).

расход газа между двумя трубками (?)

Две трубки с длинами L различных радиусов ($R_1 \ll R_2$) соединены своими концами; места соединения поддерживаются при различных температурах ($T_2 > T_1$; разность $T_2 - T_1$ мала).

В результате теплового скольжения устанавливается круговое движение газа по трубкам; определить полный расход газа через сечение трубок.

Разделив соотношение (1) задачи 1 на R^4 и интегрируя по замкнутому контуру, образованному обеими трубками, получим

$$Q = \frac{\rho\mu\pi}{L} (T_2 - T_1) (R_2^2 - R_1^2) \frac{R_1^2 R_2^2}{R_2^4 + R_1^4}$$

Течение происходит в указанном на рис.

2 направлении.

сила, действующая на шар, в газе с постоянным градиентом температуры

Определим силу \mathbf{F} , действующую на шар радиуса R , погруженный в газ, в котором поддерживается постоянным градиент температуры $\nabla T = \mathbf{A}$

Распределение температуры внутри шара дается формулой

$$T = \frac{3x_2}{x_1 + 2x_2} Ar \cos \theta$$

(?) чские координаты с началом в центре шара и направлением \mathbf{A} в качестве полярной оси

(см. VI, §50, задача 2).

Отсюда находим для градиента температуры вдоль поверхности шара:

$$\frac{1}{R} \frac{\partial T}{\partial \theta} = -\frac{3x_2}{x_1 + 2x_2} A \sin \theta$$

Возникающее благодаря тепловому скольжению ламинарное движение газа определяется всего одним вектором \mathbf{A} .

Поэтому соответствующее решение уравнения Навье-Стокса можно искать в таком же виде, как и в задаче об обтекании жидкостью движущегося в ней шара

(см. V, §20 (??? что там я не понял)):

$$\mathbf{v} = -a \frac{\mathbf{A} + \mathbf{n}(\mathbf{A}\mathbf{n})}{r} + b \frac{3\mathbf{n}(\mathbf{A}\mathbf{n}) - \mathbf{A}}{r^3}$$

где $\mathbf{n} = \mathbf{r}/r$, аддитивной постоянной в \mathbf{v} не пишем, так как должно быть $v = 0$ при $r \rightarrow \infty$.

Постоянные a и b определяются из условий

$$v_r = 0, \quad v_\theta = \frac{\mu}{R} \frac{\partial T}{\partial \theta} \text{ при } r = R$$

и равны

$$a = \frac{b}{R^2} = -\frac{3x_2 R \mu}{2(x_1 + 2x_2)}$$

$$a = \frac{b}{R^2} = -\frac{3x_2 R \mu}{2(x_1 + 2x_2)}$$

Действующая на шар сила:

$$\mathbf{F} = 8\pi a \eta \mathbf{A} = -\frac{12\pi \eta \mu R}{x_1 + 2x_2} \nabla T$$

Для того чтобы рассмотренные в задачах поверхностные эффекты были действительно малы по сравнению с объемными, температура должна мало меняться - в задачах 1 и 2 на радиусе трубки, а в задаче 3 на радиусе шара.

механокалорический эффект

Два сосуда, соединенные длинной трубкой, содержат газ при одной и той же температуре и давлениях P_1 и P_2 .

Определить тепловой поток между сосудах, сопровождающий пуазейлевское течение по трубке (механокалорический эффект).

Согласно формулам (14.14), (14.16) тепловой поток вдоль стенок трубки

$$q' = 2\pi R q'_{\text{пов}} = 2\pi R T \eta \mu \frac{dV}{dr}$$

С другой стороны, из условия механического равновесия жидкости при стационарном течении имеем

$$2\pi R\eta \frac{dV}{dr} = \pi R^2 \frac{dP}{dx} = \pi R^2 \frac{P_2 - P_1}{L}$$

Отсюда окончательно

$$q' = \pi R^2 T \mu (P_2 - P_1) / L$$

8.3.6 Явления в сильно разреженных газах (-)

мотивация

очень крутой параграф с очень многими газовыми задачами.
очень интересно его и прорешать!!!

теория

Рассмотренные в предыдущем параграфе явления представляют собой лишь поправочные эффекты, связанные с высшими степенями отношения длины свободного пробега l к характеристическим размерам задачи L ; это отношение по-прежнему предполагалось малым.

Если же газ настолько разрежен (или размеры L настолько малы), что $l/L \gtrsim 1$, то гидродинамические уравнения становятся вовсе неприменимыми, даже с исправленными граничными условиями.

В общем случае произвольного l/L требуется в принципе решать кинетическое уравнение с определенными граничными условиями на соприкасающихся с газом твердых поверхностях.

Эти условия определяются взаимодействием молекул газа с поверхностью и связывают функцию распределения частиц, падающих на поверхность, с функцией распределения частиц, покидающих ее.

Если это взаимодействие сводится к рассеянию молекул (без их химического превращения, ионизации или поглощения поверхностью), то оно описывается вероятностью $w(\Gamma', \Gamma) d\Gamma'$, т. е.

вероятностью того, что молекула с заданными значениями Γ , столкнувшись с поверхностью, отразится от нее в заданный интервал $d\Gamma'$; функция w нормирована условием

$$\int w(\Gamma', \Gamma) d\Gamma' = 1$$

С помощью w граничное условие для функции распределения $f(\Gamma)$ записывается в виде

$$\int_{nv < 0} w(\Gamma', \Gamma) \mathbf{n} \mathbf{v} f(\Gamma) d\Gamma = -\mathbf{n} \mathbf{v}' f(\Gamma') \text{ при } \mathbf{n} \mathbf{v}' > 0$$

Интеграл в левой части представляет собой число молекул, падающих в 1 с на 1 см² поверхности и попадающих в результате рассеяния в заданный интервал $d\Gamma'$; интегрирование производится по области значений Γ , отвечающей молекулам, движущимся по направлению к поверхности (\mathbf{n} - единичный вектор внешней нормали к поверхности тела).

Выражение же в правой части условия (15.2) есть число молекул, покидающих поверхность (за то же время и с той же площади); значения Γ' в обеих частях равенства должны отвечать молекулам, движущимся по направлению от поверхности.

В равновесии, когда температура газа совпадает с температурой тела, функция распределения как падающих, так и отраженных частиц должна быть Больцмановской.

Отсюда следует, что функция w должна тождественно удовлетворять равенству

$$\int_{\mathbf{nv} < 0} w(\Gamma', \Gamma) \mathbf{nv} e^{-\varepsilon/T_1} d\Gamma = -\mathbf{nv}' e^{-\varepsilon'/T_1}$$

получающемуся подстановкой в (15.2) $f(\Gamma) = \text{const} \cdot \exp(-\varepsilon/T_1)$, где T_1 - температура тела.

В описанной общей постановке решение задачи о движении сильно разреженного газа, конечно, весьма затруднительно.

Задача может быть поставлена, однако, более простым образом в предельных случаях настолько сильного разрежения газа, что отношение $l/L \gg 1$.

Большая категория таких задач относится к ситуациям, когда значительная масса газа занимает объем, размеры которого велики как по сравнению с размерами L погруженных в газ твердых тел, так и по сравнению с длиной пробега l .

Столкновения молекул с поверхностью тел происходят тогда сравнительно редко и несущественны по сравнению со взаимными столкновениями молекул.

Если газ сам по себе находится в равновесии с некоторой температурой T_2 , то в этих условиях можно считать, что равновесие не нарушается погруженным в него телом.

При этом между газом и телом могут существовать произвольные разности температур.

То же самое относится и к скоростям макроскопического движения.

Пусть $\tau = T_2 - T_1$ есть разность между температурой газа и температурой некоторого участка df поверхности тела, а \mathbf{V} - скорость движения газа относительно тела.

При отличных от нуля τ и \mathbf{V} возникает, во-первых, обмен теплом между газом и телом и, во-вторых, на тело действует со стороны газа некоторая сила.

Обозначим плотность диссипативного потока тепла от газа к телу через q .

Силу же, действующую в каждой точке поверхности тела по направлению \mathbf{n} внешней нормали к ней (и отнесенную к единице площади), обозначим как $\mathbf{F} - P\mathbf{n}$.

Здесь второй член есть обычное давление газа, а \mathbf{F} - интересующая нас дополнительная сила, связанная с τ и \mathbf{V} .

Величины q и \mathbf{F} являются функциями от τ и \mathbf{V} , обращающимися в нуль вместе с ними.

Если τ и \mathbf{V} достаточно малы (первое - по сравнению с самими температурами газа и тела, а второе - по сравнению с тепловой скоростью молекул газа), то можно разложить q и \mathbf{F} в ряд по степеням τ и \mathbf{V} , ограничившись линейными членами.

Обозначим символами F_n и V_n компоненты \mathbf{F} и \mathbf{V} по направлению нормали \mathbf{n} , а символами $\mathbf{F}_t, \mathbf{u}_t$ - их тангенциальные составляющие; последние являются векторами с двумя независимыми компонентами.

Тогда указанные разложения будут иметь вид

$$q = \alpha\tau + \beta V_n, \quad F_n = \gamma\tau + \delta V_n, \quad \mathbf{F}_t = \theta \mathbf{V}_t$$

где $\alpha, \beta, \gamma, \delta, \theta$ - постоянные (вернее, функции температуры и давления), характерные для каждого данного газа и вещества твердого тела.

«Скалярные» величины q и F_n не могут, в силу соображений симметрии, содержать членов, линейных по вектору \mathbf{V}_t .

По такой же причине в разложении вектора \mathbf{F}_t отсутствуют члены, линейные по «скалярам» τ и V_n .

Величины α, δ, θ положительны.

Так, если температура газа выше температуры тела ($\tau > 0$), то тепло будет переходить от газа к телу, т. е.

соответствующая часть потока q будет положительна; поэтому $\alpha > 0$.

Далее, действующие на тело силы F_n , \mathbf{F}_t , обусловленные движением газа относительно тела, должны быть направлены в ту же сторону, куда направлены V_n и \mathbf{V}_t ; поэтому должно быть $\delta > 0, \theta > 0$.

Что касается коэффициентов β и γ , то их знак не следует из общих термодинамических соображений (хотя, как правило, положительны).

Между ними имеется простое соотношение, являющееся следствием принципа симметрии кинетических коэффициентов.

(??!!! так вот зачем оно нужно!)

Для вывода этого соотношения вычислим производную по времени от полной энтропии всей системы, состоящей из газа вместе с находящимся в нем телом.

В единицу времени тело получает от газа через каждый элемент поверхности df количество тепла qdf .

При этом энтропия тела S_1 испытывает приращение:

$$\dot{S}_1 = \oint \frac{q}{T_1} df$$

где интегрирование производится по всей поверхности тела.

Для вычисления увеличения энтропии газа выбираем такую систему координат, в которой газ (в месте нахождения тела) покоится: в этой системе скорость каждой точки поверхности тела есть $-\mathbf{V}$.

Для целей доказательства искомого соотношения будем считать, что форма тела может меняться при его движении; тогда скорости \mathbf{V} различных точек его поверхности будут являться произвольными независимыми переменными величинами.

Согласно термодинамическому соотношению $dE = TdS - Pd\mathcal{V}$ изменение энтропии газа в единицу времени равно

$$\dot{S}_2 = \frac{1}{T_2} (\dot{E}_2 + P_2 \dot{\mathcal{V}}_2)$$

(величины с индексом 2 относятся к газу).

Производная \dot{E}_2 равна, в силу сохранения полной энергии системы, взятому с обратным знаком изменению энергии тела.

Последнее складывается из количества тепла $\oint qdf$ и произведенной над телом работы, равной интегралу $\oint (-\mathbf{V})(\mathbf{F} - P\mathbf{n})df$.

Отсюда находим для изменения энергии газа:

$$\dot{E}_2 = \oint (-q + F_n V_n + \mathbf{F}_t \mathbf{V}_t - P_2 V_n) df$$

Что касается изменения объема газа, то оно равно взятому с обратным знаком изменению объема тела:

$$\dot{\mathcal{V}}_2 = \oint V_n df$$

Таким образом, имеем для изменения энтропии газа:

$$\dot{S}_2 = \frac{1}{T_2} \oint (-q + F_n V_n + \mathbf{F}_t \mathbf{V}_t) df$$

Складывая производные от S_1 и S_2 и полагая затем (при малых τ) $T_1 \approx T_2 \equiv T$, получаем окончательно для скорости изменения полной энтропии системы:

$$\dot{S} = \int \left[\frac{q\tau}{T^2} + \frac{F_n V_n}{T} + \frac{\mathbf{F}_t \mathbf{V}_t}{T} \right] df$$

Выберем в качестве величин $\dot{x}_1, \dot{x}_2, \dot{x}_3, \dot{x}_4$ в общей формулировке принципа Онсагера)§ 9) соответственно q, F_n и две компоненты вектора \mathbf{F}_t (в каждой заданной точке поверхности тела).

Для выяснения смысла соответствующих величин X_a сравним формулу (15.5) с общим выражением скорости изменения энтропии (9.3).

Мы увидим тогда, что величинами X_1, X_2, X_3, X_4 будут соответственно $-\tau/T^2, -V_n/T$ и две компоненты вектора $-\mathbf{V}_t/T$ в той же точке.

Кинетические же коэффициенты (коэффициенты в соотношениях (4.3.3)):

$$\begin{aligned}\gamma_{11} &= \alpha T^2, & \gamma_{22} &= \delta T, & \gamma_{33} &= \gamma_{44} = \theta T \\ \gamma_{12} &= \beta T, & \gamma_{21} &= \gamma T^2\end{aligned}$$

Из симметрии $\gamma_{12} = \gamma_{21}$ следует, таким образом, искомое соотношение

$$\beta = \gamma T$$

Отметим также, что из условия положительности квадратичной формы (9.3) ($\dot{S} > 0$) следуют уже упомянутые неравенства $\alpha, \beta, \theta > 0$ и дополнительно еще неравенство

$$T\alpha\delta > \beta^2$$

Вычисление коэффициентов в (15.4) требует знания конкретного закона рассеяния молекул газа от поверхности тела, выражаемого введенной выше функцией $w(\Gamma', \Gamma)$.

Для примера получим формулу, позволяющую в принципе вычислить величину α .

Плотность потока энергии от газа к телу выражается интегралом

$$q = \int (\varepsilon - \varepsilon') |v_x| w(\Gamma', \Gamma) f(\Gamma) d\Gamma d\Gamma'$$

(взятым по области $v_x < 0, v'_x > 0$), - при каждом столкновении молекулы со стенкой последней передается энергия $\varepsilon - \varepsilon'$.

Преобразуем это выражение с помощью принципа детального равновесия, согласно которому в состоянии равновесия число

переходов $\Gamma \rightarrow \Gamma'$ при рассеянии молекул от стенки равно числу переходов $\Gamma'^T \rightarrow \Gamma^T$.

Это означает, что

$$w(\Gamma', \Gamma) |v_x| \exp\left(\frac{\mu - \varepsilon}{T_1}\right) = w(\Gamma^T, \Gamma'^T) |v'_x| \exp\left(\frac{\mu - \varepsilon'}{T_1}\right)$$

(в равновесии температура газа совпадает с температурой стенки)

Произведем в (15.7) переобозначение переменных интегрирования $\Gamma \rightarrow \Gamma'^T, \Gamma' \rightarrow \Gamma^T$.

Взяв полусумму обоих получающихся выражений, напомним

$$\begin{aligned}q &= \frac{1}{2} \int (\varepsilon - \varepsilon') e^{\mu/T_2} \times \\ &\quad \times \left[w(\Gamma', \Gamma) |v_x| e^{-\varepsilon/T_2} - w(\Gamma^T, \Gamma'^T) |v'_x| e^{-\varepsilon'/T_2} \right] d\Gamma d\Gamma'.\end{aligned}$$

Наконец, подставив сюда $w(\Gamma^T, \Gamma'^T)$ из (15.8) и разложив затем подынтегральное выражение по степеням малой разности $\tau = T_2 - T_1$, найдем, что $q = \alpha\tau$, где

$$\alpha = \frac{1}{2T^2} \int (\varepsilon - \varepsilon')^2 |v_x| w(\Gamma', \Gamma) \exp\left(\frac{\mu - \varepsilon(\Gamma)}{T}\right) d\Gamma d\Gamma'$$

($v_x < 0, v'_x > 0$).

индекс у температуры $T_1 \approx T_2$ опущен).

Функция распределения молекул, рассеянных от стенки, зависит от конкретного характера их взаимодействия со стенкой.

Говорят, что имеет место полная аккомодация, если молекулы,

отраженные от каждого элемента поверхности тела, имеют (независимо от величины и направления их скорости до столкновения) такое же распределение, какое имели бы молекулы в пучке,

выходящем из маленького отверстия в сосуде с газом с температурой, равной температуре тела.

Другими словами, при полной аккомодации рассеиваемый от стенки газ приходит в тепловое равновесие с ней.

Величину коэффициентов в А5.4) имеет смысл сравнивать именно с их значениями при полной аккомодации.

В частности, обмен энергией между молекулами газа и твердой стенкой обычно характеризуют коэффициентом аккомодации, определяемым как отношение α/α_0 (где «0» отвечает полной аккомодации).

В реальных случаях полная аккомодация, вообще говоря, не достигается и коэффициент аккомодации меньше единицы.

В том, что значение «0» действительно является наибольшим возможным, легко убедиться с помощью следующих соображений.

Рассмотрим энтропию S в А5.5) с несколько иной точки зрения: не как полную энтропию тела и газа в целом, а как энтропию тела и лишь той совокупности молекул газа, которые за время Δt падают на поверхность тела.

Для этой же молекул с полной аккомодацией означает переход в состояние полного равновесия, так что ее энтропия принимает максимально возможное значение.

Соответственно будет максимально возможным и изменение энтропии, $\Delta S = \dot{S}\Delta t$, сопровождающее этот переход).

Другими словами, при полной аккомодации квадратичная форма (9.3) должна быть максимальной при любых заданных значениях величин X_a (т.

е.

τ, V_n, \mathbf{V}_t).

Отмечая соответствующие значения коэффициентов γ_{ab} индексом нуль, запишем это условие в виде

$$\frac{\alpha_0 - \alpha}{T^2} \tau^2 + \frac{2(\beta_0 - \beta)}{T^2} \tau V_n + \frac{\delta_0 - \delta}{T} V_n^2 + \frac{\theta_0 - \theta}{T} \mathbf{V}_t^2 > 0$$

Отсюда следуют неравенства

$$\alpha_0 > \alpha, \delta_0 > \delta, \theta_0 > \theta \\ T(\alpha_0 - \alpha)(\delta_0 - \delta) > (\beta_0 - \beta)^2$$

Рассмотрим вытекание сильно разреженного газа из маленького отверстия (с линейными размерами L).

В предельном случае $l/L \gg 1$ этот процесс приобретает весьма простой характер.

Молекулы будут покидать сосуд независимо одна от другой, образуя молекулярный пучок, в котором каждая молекула движется с той скоростью, с которой она подошла к отверстию.

Число молекул, выходящих в 1 с из отверстия, совпадает числом столкновений, которые испытали бы за это время молекулы газа с площадью поверхности, равной площади отверстия s .

Число столкновений, отнесенное к единице площади стенки, есть $P(2\pi mT)^{-1/2}$, где P - давление газа, m - масса молекулы (см.

V, § 39).

Таким образом, для количества (массы) вытекающего в 1 с газа находим

$$Q = sP\sqrt{\frac{m}{2\pi T}}$$

Если два сосуда с газом соединены друг с другом отверстием, то в случае $l \ll L$ при механическом равновесии давления P_1 и P_2 газов в обоих сосудах будут одинаковыми, вне зависимости от значений их температур T_1 и T_2 .

Если же $l \gg L$, то условием механического равновесия будет являться равенство чисел молекул, переходящих через отверстие из одного сосуда в другой и обратно.

Согласно (15.11) это приводит к равенству

$$\frac{P_1}{\sqrt{T_1}} = \frac{P_2}{\sqrt{T_2}}$$

Таким образом, давления разреженных газов в двух сообщаемых сосудах будут различными, причем они относятся друг к другу как корни из температур (эффект Кнудсена).

До сих пор речь шла о явлениях в значительной массе сильно разреженного газа, находящегося самом по себе в равновесии.

Остановимся коротко на явлениях другого характера, в которых и сам газ не находится в равновесном состоянии.

Такова, например, передача тепла между двумя твердыми пластинками, нагретыми до различных температур и погруженными в разреженный газ, причем расстояние между ними мало по сравнению с длиной свободного пробега.

Молекулы, движущиеся в пространстве между пластинками, практически не испытывают столкновений друг с другом и, отражаясь от одной пластинки, свободно движутся до столкновения с другой.

При рассеянии от более нагретой пластинки молекулы приобретают от нее некоторую энергию, а затем при столкновении с менее нагретой — отдают ей часть своей энергии.

Механизм теплопередачи в этом случае существенно отличается, таким образом, от механизма обычной теплопроводности в неразреженном газе.

Его можно характеризовать коэффициентом теплопередачи x , определенным (по аналогии с обычным коэффициентом теплопроводности) так, чтобы было

$$q = \frac{x(T_2 - T_1)}{L}$$

где q - передаваемое количество тепла (отнесенное к единице площади пластинок в единицу времени), T_1 и T_2 - температуры пластинок, а L - расстояние между ними.

Коэффициент x можно оценить по порядку величины с помощью формулы (7.10).

Поскольку вместо столкновений молекул друг с другом мы имеем теперь дело с непосредственными столкновениями с пластинками, то вместо длины свободного пробега l надо подставить расстояние L между пластинками.

Таким образом, имеем

$$x \sim L\bar{v}N \sim \frac{PL}{\sqrt{mT}}$$

Коэффициент теплопередачи в сильно разреженном газе пропорционален давлению - в противоположность теплопроводности неразреженного газа, не зависящей от давления.

Подчеркнем, впрочем, что теперь ж не является характеристикой лишь самого газа: x зависит также и от конкретных условий задачи (от расстояния L между пластинками).

Аналогичное явление представляет собой «вязкость» сильно разреженного газа, проявляющаяся, например, при относительном движении двух находящихся в нем пластинок (причем опять $L \ll l$).

Коэффициент вязкости η надо определить теперь так, чтобы было

$$F = \eta V/L$$

где F - сила трения, испытываемая движущейся пластинкой (отнесенная к единице ее площади), а V - скорость движения одной пластинки относительно другой.

Написав в (8.11) расстояние L вместо длины пробега l , получим

$$\eta \sim m\bar{v}NL \sim LP\sqrt{\frac{m}{T}}$$

т.

е.

вязкость разреженного газа тоже пропорциональна давлению.

распределение плотности газа, вылетающего из полупространства

(?!!!! очень крутая задача!!!)

Пусть в начальный момент $t = 0$ газ занимает полупространство $x < 0$.

В пренебрежении столкновениями определим распределение плотности в последующие моменты времени.

В пренебрежении столкновениями кинетическое уравнение сводится к уравнению

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} = 0,$$

общее решение которого есть $f = f(\mathbf{r} - \mathbf{v}t, \mathbf{v})$.

С учетом поставленного начального условия получим в данном случае

$$f = f_0(v) \text{ при } v_x > x/t, \quad f = 0 \text{ при } v_x < x/t$$

где f_0 - максвелловское распределение.

Плотность газа

$$N(t, x) = \int \int_{-\infty}^{\infty} \int_{x/t}^{\infty} f_0(v) m^3 dv_x dv_y dv_z = \frac{N_0}{2} \left[1 - \Phi \left(\frac{x}{t} \sqrt{\frac{m}{2T}} \right) \right]$$

где

$$\Phi(\xi) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\xi} e^{-y^2} dy$$

а N_0 - начальная плотность.

Ввиду пренебрежения столкновениями, написанные формулы фактически справедливы лишь в области $|x| \ll l$.

сила, действующая на шарик в разреженном газе

Определить силу, действующую на шарик радиуса R , движущийся со скоростью \mathbf{V} в разреженном газе.

(???? лол где решение?)

Полная сила сопротивления движению шарика равна

$$\mathbf{F} = -\frac{4\pi}{3} \mathbf{V} R^2 (\delta + 2\theta)$$

скорость плоского диска в газе

Определить скорость, с которой будет двигаться в разреженном газе невесомый плоский диск, стороны которого нагреты до различных температур T_1 и T_2 .

Р е ш е н и е.

Скорость V движения диска (в направлении, перпендикулярном к его плоскости) определится из условия равенства нулю суммы сил, действующих на обе его стороны.

Диск будет двигаться менее нагретой стороной вперед со скоростью, равной (считаем, что $T_2 > T_1$)

$$V = \frac{\gamma}{2\delta} (T_2 - T_1)$$

 α_0 коэффициента α при полной аккомодации

(???)

4. Вычислить значение α_0 коэффициента α при полной аккомодации.

Р е ш е н и е.

Количество энергии, приносимой в единицу времени молекулами, сталкивающимися с единицей площади поверхности тела, есть $\int f_2 v_x \varepsilon d\Gamma$, где f_2 - больцмановская функция распределения с температурой T_2 газа (ε - энергия молекулы, а ось x направлена перпендикулярно к поверхности тела).

Количество уносимой этими же молекулами энергии получится отсюда (при полной аккомодации) просто заменой T_2 на температуру тела T_1 .

Поток тепла

$$q = \int (f_2 - f_1) \varepsilon v_x d\Gamma$$

(интегрирование по v_x - в пределах от 0 до ∞).

Энергию молекулы пишем в виде $\varepsilon = \varepsilon_{\text{вн}} + mv^2/2$, где $\varepsilon_{\text{вн}}$ - внутренняя энергия.

Вычисление дает для каждого из интегралов значение

$$\int f \varepsilon v_x d\Gamma = \nu (\bar{\varepsilon}_{\text{вн}} + 2T) = \nu \left(\bar{\varepsilon} + \frac{T}{2} \right) = \nu T \left(c_v + \frac{1}{2} \right)$$

где $\bar{\varepsilon} = c_v T$ - средняя энергия молекулы, а $\nu = P/\sqrt{2\pi m T}$ - число молекул, сталкивающихся в 1 с с 1 см² поверхности. Тепло q равно разности энергии приходящих и уходящих молекул при одинаковом числе тех и других, т. е. одинаковом ν .

В результате находим для коэффициента в $q = \alpha (T_2 - T_1)$ значение

$$\alpha_0 = \frac{P}{\sqrt{2\pi m T}} \left(c_v + \frac{1}{2} \right)$$

(. разность $T_2 - T_1$ предполагается малой, так что полагаем $T_1 \approx T_2 \equiv T$).

То же для коэффициентов β и γ

Нормальная составляющая импульса, приносимого молекулами, сталкивающимися в 1 с с 1 см² поверхности тела, равна половине давления газа. Выражая давление через ν , имеем

$$\frac{P}{2} = \nu \sqrt{\frac{\pi m T}{2}}$$

Взяв разность значений этой величины при температурах T_1 и T_2 и одинаковых ν , получим дополнительную силу F_n , обусловленную разностью температур. Считая $T_2 - T_1$ малой, найдем

$$\gamma_0 = P/4T$$

Для коэффициента β имеем согласно (15.6) $\beta_0 = P/4$.

То же для коэффициентов δ и θ .

6. То же для коэффициентов δ и θ .

Р е п е н и е.

Выбираем систему координат, в которой тело покоится, а газ движется со скоростью \mathbf{V} ; ось x направлена по нормали к поверхности, а плоскость xy выбрана так, чтобы \mathbf{V} лежало на ней. Функция распределения в этой системе есть

$$f = \text{const} \cdot \exp \left\{ -\frac{\varepsilon_{\text{ВН}}}{T} - \frac{m}{2T} [(v_x - V_x)^2 + (v_y - V_y)^2 + v_z^2] \right\}$$

Что касается отраженных молекул, то при полной аккомодации они имеют функцию распределения с $\mathbf{V} = 0$; τ считаем равным нулю.

При вычислении касательной силы F_y полагаем $V_x = 0$. Приносимая падающими на поверхность тела молекулами полная y -компонента импульса есть

$$\int m v_y v_x f d\Gamma = m V_y \int v_x f d\Gamma = m V_y \nu$$

(по v_x интегрирование производится везде в пределах от 0 до ∞). Уносимая же ими y -компонента импульса исчезает. Таким образом, $F_y = m \nu V_y$, так что

$$\theta_0 = \nu m = P \sqrt{\frac{m}{2\pi T}}$$

Пусть теперь $V_x \neq 0, V_y = 0$. С точностью до членов первого порядка по V_x имеем

$$f = f_0 + V_x \frac{m v_x}{T} f_0$$

где f_0 - функция распределения с $\mathbf{V} = 0$. Число молекул, сталкивающихся в 1 с с 1 см² поверхности, есть

$$\nu = \int f v_x d\Gamma = \frac{P}{\sqrt{2\pi m T}} + \frac{P V_x}{2T}$$

Приносимая этими молекулами x -компонента импульса есть

$$\int m v_x^2 f d\Gamma = \frac{P}{2} + P V_x \sqrt{\frac{2m}{\pi T}}$$

Отраженные от стенки молекулы имеют функцию распределения с $V_x = 0$, нормированную таким образом, чтобы интеграл $\int f v_x d\Gamma$ был равен числу ν падающих молекул, определенному выше. Уносимая этими молекулами x компонента импульса равна

$$-\frac{\nu}{2} \sqrt{2\pi m T} = -\frac{P}{2} - \frac{P V_x}{2} \sqrt{\frac{\pi m}{2T}}$$

Дополнительная к давлению нормальная сила есть $F_x = \delta_0 V_x$, где

$$\delta_0 = P \sqrt{\frac{m}{2\pi T}} \left(2 + \frac{\pi}{2} \right) = \frac{\theta_0}{2} (4 + \pi)$$

температура пластинки при полной аккомодации

7. В предположении полной аккомодации определить температуру пластинки, движущейся со скоростью V в разреженном газе параллельно самой себе.

Р е ш е н и е.

Поступая как в задаче 4, имеем для приносимой энергии:

$$\nu \left(c_v T_2 + \frac{T_2}{2} + \frac{mV^2}{2} \right)$$

а для уносимой:

$$\nu T_1 \left(c_v + \frac{1}{2} \right)$$

Приравнивая эти потоки, находим

$$T_1 - T_2 = \frac{mV^2}{2c_v + 1}$$

8. Определить количество газа, протекающего в единицу времени через поперечное сечение цилиндрической трубы (радиуса R) под влиянием градиентов давления и температуры. Газ настолько разрежен, что длина сво-

бодного пробега $l \gg R^1$). При столкновениях молекул с ее стенками имеет место полная аккомодация.

Р е ш е н и е. Распределение молекул по скоростям при отражении их от стенки при полной аккомодации имеет вид $v_x f d^3p$, где f - максвелловская функция распределения, а ось x перпендикулярна к поверхности. Обозначая через ϑ угол между скоростью молекулы и осью x , найдем, что распределение отраженных молекул по направлениям их движения (независимо от абсолютной величины скорости) имеет вид

$$\frac{\nu}{\pi} \cos \vartheta d\vartheta$$

(эта функция нормирована так, что ее интеграл по всем телесным углам по одну сторону плоскости равен ν).

Выбираем ось z по оси трубки, а начало координат - в рассматриваемом ее сечении. Через это сечение проходят молекулы, испытавшие последнее отражение от различных участков поверхности трубы. Из числа молекул, рассеянных от некоторого элемента df поверхности стенки на расстояние z , пройдут через заданное сечение те, которые отражены по направлениям, лежащим внутри телесного угла, под которым видно это сечение из рассматриваемой точки на поверхности трубы, т. е. $df \cdot \nu \int \cos \vartheta d\vartheta / \pi$ молекул (интегрирование производится по указанному интервалу углов).

Этот интеграл, очевидно, одинаков для всех точек, лежащих на одинаковом расстоянии z от заданного сечения. Поэтому полное число молекул, проходящих (в 1 с) через это сечение, получится заменой df на кольцевой элемент поверхности $2\pi R dz$ и интегрированием по всей длине трубы; умножая еще на массу m молекулы, получим расход массы газа через сечение трубы:

$$Q = 2mR \int \nu \left(\int \cos \vartheta d\vartheta \right) dz$$

Число ν , будучи функцией давления и температуры, меняется вдоль длины трубы. Если градиенты давления и температуры вдоль длины не слишком велики, то можно написать

$$\nu(z) = \nu(0) + z \frac{d\nu}{dz} \Big|_{z=0}$$

Интеграл с $\nu(0)$ обращается, очевидно, в нуль, так что

$$Q = 2\pi R \frac{d\nu}{dz} \Big|_{z=0} \iint z \cos \vartheta d\vartheta dz$$

Для проведения интегрирования вводим в плоскости рассматриваемого сечения трубы координаты r и φ , где r - расстояние переменной точки A' от некоторой

заданной точки O на окружности сечения, а φ - угол между отрезком OA' и радиусом сечения (рис. 3). Молекула, отраженная от стенки в точке A (лежавшей на одной образующей с точкой O) и проходящая затем через точку A' , должна иметь скорость под углом ϑ с нормалью к поверхности трубы в точке A , для которого

$$\cos \vartheta = \frac{r \cos \varphi}{\sqrt{r^2 + z^2}}$$

Элемент телесного угла можно написать в виде

$$d\Omega = \frac{r dr d\varphi}{r^2 + z^2} \frac{z}{\sqrt{r^2 + z^2}}$$

(площадь $r dr d\varphi$ проецируем на плоскость, перпендикулярную к прямой AA' , и делим на квадрат длины этой прямой). Интегрирование производится по области

$$-\pi/2 \leq \varphi \leq \pi/2, \quad 0 \leq r \leq 2R \cos \varphi, \quad -\infty \leq z \leq \infty$$

и дает

$$Q = \frac{8\pi R^3}{3} \frac{d\nu}{dz}$$

Наконец, подставив $\nu = P/\sqrt{2\pi mT}$, получим окончательно

$$Q = \frac{4\pi R^3}{3L} \sqrt{2\pi m} \left(\frac{P_2}{\sqrt{T_2}} - \frac{P_1}{\sqrt{T_1}} \right)$$

где в скобках стоит разность значений величины P/\sqrt{T} на длине L трубы (замена производной разностью допустима ввиду постоянства Q , а потому и этой производной, вдоль длины трубы). 9. В предположении полной аккомодации найти силу трения между двумя твердыми плоскостями (расстояние между которыми $L \ll l$), движущимися относительно друг друга со скоростью V ; плоскости имеют температуры T_1 и T_2 . е ш е н и е. Пусть плоскость 1 (с температурой T_1) покоится, а плоскость 2 движется со скоростью V вдоль оси x ; ось y направлена от первой плоскости ко второй. Молекулы со скоростями $v_y > 0$ и $v_y < 0$ отражены соответственно от плоскостей 1 и 2: при полной аккомодации их

функции распределения

$$f = \frac{2N_1}{(2\pi m T_1)^{3/2}} \exp\left(-\frac{mv^2}{2T_1}\right) \quad \text{при}$$

$$f = \frac{2N_2}{(2\pi m T_2)^{3/2}} \exp\left(-\frac{m(\mathbf{v} - \mathbf{V})^2}{2T_2}\right) \quad \text{при}$$

где N_1 и N_2 - соответствующие плотности числа частиц; полная плотность $N = N_1 + N_2$. Условие отсутствия суммарного потока в направлении оси y дает

$$N_1 \sqrt{T_1} = N_2 \sqrt{T_2}$$

На каждую из плоскостей действует давление $P = N_1 T_1 + N_2 T_2$ и сила трения (отнесенная к единице площади)

$$F_2 = -F_1 = mV \int_{v_y > 0} v_y f d^3p = VN_2 \sqrt{\frac{2mT_2}{\pi}} = VN \sqrt{\frac{2m}{\pi}} \frac{(T_1 T_2)^{1/2}}{T_1^{1/2} + T_2^{1/2}}$$

Если $T_1 = T_2 \equiv T$, то

$$F_2 = -F_1 = VP\sqrt{\frac{m}{2\pi T}}$$

в соответствии с (15.15), (15.16). 10. В предположении полной аккомодации определить коэффициент теплопередачи ж между двумя пластинками с близкими температурами T_1 и T_2

молекулы имеют равновесное распределение с температурой T_2 . Поэтому поток энергии от пластинки 1 к пластинке 2 : $q = \alpha_0 (T_2 - T_1)$. Взяв α_0 из задачи 4 и определив ж согласно (15.13), получим

$$x = \alpha_0 L = \frac{PL}{\sqrt{2\pi mT}} \left(c_v + \frac{1}{2} \right)$$

в соответствии с оценкой (15.14).

плотность газа на оси позади кругового диска

Определим плотность газа на оси позади кругового диска радиуса $R \ll l$, движущегося в газе со скоростью $-\mathbf{V}$, большой по сравнению со средней тепловой скоростью атомов v_T .

Р е ш е н и е.

При $V \gg v_T$ частицы, отраженные от задней поверхности диска, несущественны (за исключением узкой области у этой поверхности - см. ниже).

Все дело сводится к «затенению» диском набегающего потока.

В системе координат, в которой диск покоится (а газ движется со скоростью \mathbf{V}), в отсутствие самого диска функция распределения была бы равна

$$f_0(\mathbf{v}) = \frac{N_0}{(2\pi mT)^{3/2}} \exp \left\{ -\frac{m(\mathbf{v} - \mathbf{V})^2}{2T} \right\}$$

В присутствии диска плотность числа частиц газа на оси z (рис. 4) будет

$$N(z) = 2\pi \int_0^\infty \int_{\vartheta_0}^\pi f_0(\mathbf{v}) p^2 \sin \vartheta d\vartheta dp$$

где ϑ - угол между \mathbf{v} и осью z , а ϑ_0 - угол, под которым радиус диска виден из точки наблюдения на оси z) $\operatorname{tg} \vartheta_0 = R/z$;

частицы с $\vartheta < \vartheta_0$ «затенены»).

Интегрирование с учетом условия $V \gg v_T$ дает

$$\begin{aligned} N(z) &= \frac{N_0}{V} \left(\frac{m}{2\pi T} \right)^{1/2} \int_0^\infty \exp \left\{ -\frac{m}{2T} [(v - V \cos \vartheta_0)^2 + V^2 \sin^2 \vartheta_0] \right\} v dv \approx \\ &\approx N_0 \cos \vartheta_0 \exp \left\{ -\frac{mV^2}{2T} \sin^2 \vartheta_0 \right\} = N_0 \frac{z}{\sqrt{R^2 + z^2}} \exp \left\{ -\frac{mV^2}{2T} \frac{R^2}{R^2 + z^2} \right\} \end{aligned}$$

где N_0 - плотность газа вдали от диска.

Интегрирование по dp выполнено в предположении $\cos \vartheta_0 \gg v_T/V$ (можно показать, что это же неравенство является также и условием допустимости пренебрежения отраженными от задней стенки частицами).

8.3.7 Динамический вывод кинетического уравнения (-)

теория

Хотя изложенный в пар 3 вывод кинетического уравнения удовлетворителен с физической точки зрения, представляет значительный интерес проследить за тем, каким образом это уравнение можно аналитически получить из математического аппарата теории, т. е.

из уравнений движения частиц газа;
такой вывод дан Н.Н. Боголюбовым.

Значение этого метода состоит также и в том, что он дает регулярную процедуру, позволяющую в принципе получить не только уравнение Больцмана, но и поправки к нему, т. е. члены следующих порядков по малому «параметру газовой» - отношению $(d/\bar{r})^3$, где d - молекулярные размеры (радиус действия молекулярных сил), а \bar{r} среднее расстояние между молекулами.

Излагаемый ниже вывод относится к одноатомному газу в чисто классических рамках, т. е. в предположении, что не только свободное движение, но и процессы столкновения частиц газа описываются классической механикой.

Исходным пунктом метода является теорема Лиувилля для функции распределения газа в целом как системы \mathcal{N} частиц.

Обозначим такую функцию (в $6\mathcal{N}$ -мерном фазовом пространстве) через $f^{(\mathcal{N})}(t, \tau_1, \tau_2, \dots, \tau_{\mathcal{N}})$, где символы τ_a обозначают совокупности координат и компонент импульса a -й частицы: $\tau_a = (\mathbf{r}_a, \mathbf{p}_a)$; эта функция будет предполагаться нормированной на единицу:

$$\int f^{(\mathcal{N})}(t, \tau_1, \dots, \tau_{\mathcal{N}}) d\tau_1 \dots d\tau_{\mathcal{N}} = 1, \quad d\tau_a = d^3x_a d^3p_a$$

Фигурирующая в уравнении Больцмана «одночастичная» функция распределения получается интегрированием функции $f^{(\mathcal{N})}$ по всем $d\tau_a$, кроме одного:

$$f^{(1)}(t, \tau_1) = \int f^{(\mathcal{N})} d\tau_2 \dots d\tau_{\mathcal{N}}$$

функция $f^{(1)}$ тоже нормирована на 1; обозначение же f (без индекса) сохраним для функции распределения, нормированной на полное число частиц: $f = \mathcal{N} f^{(1)}$.

Напомним, что теорема Лиувилля возникает как следствие уравнения непрерывности в фазовом пространстве, которому должна удовлетворять функция распределения замкнутой системы:

$$\frac{\partial f^{(\mathcal{N})}}{\partial t} + \sum_{a=1}^{\mathcal{N}} \left\{ \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_a} (f^{(\mathcal{N})} \dot{\mathbf{r}}_a) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_a} (f^{(\mathcal{N})} \dot{\mathbf{p}}_a) \right\} = 0$$

С помощью уравнений Гамильтона $\dot{\mathbf{r}}_a = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}_a}$, $\dot{\mathbf{p}}_a = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}_a}$ получается равенство

$$\frac{\partial f^{(\mathcal{N})}}{\partial t} + \sum_{a=1}^{\mathcal{N}} \left\{ \frac{\partial f^{(\mathcal{N})}}{\partial \mathbf{r}_a} \dot{\mathbf{r}}_a + \frac{\partial f^{(\mathcal{N})}}{\partial \mathbf{p}_a} \dot{\mathbf{p}}_a \right\} = \frac{df^{(\mathcal{N})}}{dt} = 0$$

причем $\dot{\mathbf{r}}_a \equiv \mathbf{v}_a$ и $\dot{\mathbf{p}}_a$ предполагаются выраженными через выраженные предется τ_1, τ_2, \dots согласно уравнениям (16.3); равенство (16.4) и составляет содержание теоремы Лиувилля.

Функцию Гамильтона одноатомного газа в случае, если внешнее поле отсутствует, а взаимодействие частиц газа друг с другом сводится к сумме их попарных взаимодействий,

представим в виде

$$H = \sum_{a \leq N} \frac{p_a^2}{2m} + \sum_{b < a \leq N} U(|\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b|)$$

С такой функцией Гамильтона уравнение (16.4) принимает вид

$$\frac{\partial f^{(N)}}{\partial t} + \sum_{a=1}^N \left\{ \frac{\partial f^{(N)}}{\partial \mathbf{r}_a} \mathbf{v}_a - \frac{\partial f^{(N)}}{\partial \mathbf{p}_a} \sum_{b < a} \frac{\partial U_{ab}}{\partial \mathbf{r}_a} \right\} = 0$$

где $U_{ab}(a \neq b)$ обозначает $U(|\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b|)$.

Проинтегрируем теперь это уравнение по $d\tau_2 \dots d\tau_N$.

В результате такого интегрирования из всех членов под знаком суммы в (16.6) останутся лишь те, которые содержат дифференцирования по \mathbf{p}_1 или \mathbf{r}_1 ; интегралы от остальных членов преобразуются в интегралы по бесконечно удаленным поверхностям в импульсном или координатном пространстве и обращаются в нуль. Таким образом, получим

$$\frac{\partial f^{(1)}(t, \tau_1)}{\partial t} + \mathbf{v}_1 \frac{\partial f^{(1)}(t, \tau_1)}{\partial \mathbf{r}_1} = \mathcal{N} \int \frac{\partial U_{12}}{\partial \mathbf{r}_1} \frac{\partial f^{(2)}(t, \tau_1, \tau_2)}{\partial \mathbf{p}_1} d\tau_2$$

где $f^{(2)}$ - нормированная на 1 двухчастичная функция распределения, т. е. интеграл

$$f^{(2)}(t, \tau_1, \tau_2) = \int f^{(N)} d\tau_3 \dots d\tau_N$$

(множитель \mathcal{N} в (16.7) учитывает члены, отличающиеся лишь обозначением переменных интегрирования; строго говоря, число таких членов есть $\mathcal{N} - 1$, но, ввиду очень большой величины \mathcal{N} , $\mathcal{N} - 1 \approx \mathcal{N}$)

Аналогичным образом, проинтегрировав (16.6) по $d\tau_3 \dots d\tau_N$, получим уравнение

$$\begin{aligned} \frac{\partial f^{(2)}}{\partial t} + \mathbf{v}_1 \frac{\partial f^{(2)}}{\partial \mathbf{r}_1} + \mathbf{v}_2 \frac{\partial f^{(2)}}{\partial \mathbf{r}_2} - \frac{\partial U_{12}}{\partial \mathbf{r}_1} \frac{\partial f^{(2)}}{\partial \mathbf{p}_1} - \frac{\partial U_{12}}{\partial \mathbf{r}_2} \frac{\partial f^{(2)}}{\partial \mathbf{p}_2} = \\ = \mathcal{N} \int \left[\frac{\partial f^{(3)}}{\partial \mathbf{p}_1} \frac{\partial U_{13}}{\partial \mathbf{r}_1} + \frac{\partial f^{(3)}}{\partial \mathbf{p}_2} \frac{\partial U_{23}}{\partial \mathbf{r}_2} \right] d\tau_3, \end{aligned}$$

где $f^{(3)}(t, \tau_1, \tau_2, \tau_3)$ - трехчастичная функция распределения.

Продолжая таким образом, мы получили бы практически неограниченную (\mathcal{N} очень велико!) цепочку последовательных уравнений, каждое из которых выражает $f^{(n)}$ через $f^{(n+1)}$.

Все эти уравнения - точные в том смысле, что никаких предположений, связанных с разреженностью газа, в них еще не делалось.

Но для получения замкнутой системы уравнений эту цепочку надо где-то оборвать, воспользовавшись условием разреженности газа.

В частности, первому приближению метода отвечает обрыв цепочки уже на первом уравнении (уравнение (16.7)), в котором двухчастичная функция $f^{(2)}$ будет приближенно выражена через $f^{(1)}$.

Последнее осуществляется с учетом разреженности газа с помощью уравнения (16.9).

Обращаясь к этому уравнению, покажем прежде всего, что интеграл в его правой части мал.

Действительно, функция $U(r)$

заметно отлична от нуля лишь в радиусе действия сил, т.

е.

при $r \lesssim d$.

Поэтому и в обеих частях интеграла в (16.9) интегрирования по координатам происходят фактически лишь по областям $|\mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_1| \lesssim d$ или $|\mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_2| \lesssim d$, т.

е.

по объему $\sim d^3$.

Заметив также, что при интегрировании по всему объему газа $\mathcal{V} \sim \mathcal{N}\bar{r}^3$ было бы $\int f^{(3)} d\tau_3 = f^{(2)}$, находим следующую оценку:

$$\mathcal{N} \int \frac{\partial f^{(3)}}{\partial \mathbf{p}_1} \frac{\partial U_{13}}{\partial \mathbf{r}_1} d\tau_3 \sim \frac{\partial U(r)}{\partial r} \frac{\partial f^{(2)}}{\partial p_1} \frac{d^3}{\bar{r}^3}$$

Отсюда видно, что правая часть уравнения (16.9) мала в отношении $(d/\bar{r})^3$ по сравнению с содержащими $\partial U/\partial \mathbf{r}$ членами в левой части уравнения и поэтому ею можно пренебречь.

Совокупность же членов в левой части уравнения представляет собой полную производную $df^{(2)}/dt$, в которой $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2$ рассматриваются как функции времени, удовлетворяющие уравнениям движения (16.3) с функцией Гамильтона задачи двух тел:

$$H = \frac{\mathbf{p}_1^2}{2m} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2m} + U(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)$$

Таким образом, имеем

$$\frac{d}{dt} f^{(2)}(t, \tau_1, \tau_2) = 0$$

До сих пор все преобразования уравнений носили чисто механический характер.

Разумеется, для вывода кинетического уравнения необходимо сделать также и некоторое предположение статистического характера.

Оно может быть сформулировано как утверждение о статистической независимости каждой пары частиц, вступающих в столкновение (по существу именно это предположение подразумевалось при выводе кинетического уравнения в §3, когда вероятность столкновения записывалась в виде (2.1), пропорциональном произведению ff_1).

В излагаемом методе это утверждение играет роль начального условия к дифференциальному уравнению (16.10).

Именно оно вносит асимметрию по отношению к обоим направлениям времени, в результате чего из инвариантных к обращению времени уравнений механики получается необратимое кинетическое уравнение.

Корреляция между положениями и импульсами частиц газа возникает лишь в течение времени их столкновения ($\sim d/\bar{v}$) и простирается на расстояния $\sim d$.

Таким образом, предположение о статистической независимости сталкивающихся частиц является также и источником принципиальных ограничений в допускаемых кинетическим уравнением расстояниях и промежутках времени, о которых говорилось уже в §3.

Пусть t_0 - некоторый момент времени, предшествующий столкновению,

когда две частицы находятся еще далеко друг от друга ($|\mathbf{r}_{10} - \mathbf{r}_{20}| \gg d$,

где индекс нуль отличает значения величин в этот момент).

Статистическая независимость сталкивающихся частиц означает,

что в такой момент t_0 двухчастичная функция распределения распадается на произведение двух одночастичных функций $f^{(1)}$.

Поэтому интегрирование уравнения (16.10) от t_0 до t дает

$$f^{(2)}(t, \tau_1, \tau_2) = f^{(1)}(t_0, \tau_{10}) f^{(1)}(t_0, \tau_{20})$$

Здесь $\tau_{10} = (\mathbf{r}_{10}, \mathbf{p}_{10})$ и $\tau_{20} = (\mathbf{r}_{20}, \mathbf{p}_{20})$ надо понимать как те значения координат и импульсов, которые должны иметь частицы в момент t_0 для того, чтобы к моменту t приобрести требуемые значения $\tau_1 = (\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1)$ и $\tau_2 = (\mathbf{r}_2, \mathbf{p}_2)$; в этом смысле τ_{10}, τ_{20} являются функциями от τ_1, τ_2 и $t - t_0$ (причем от $t - t_0$ зависят лишь \mathbf{r}_{10} и \mathbf{r}_{20} ; значения же \mathbf{p}_{10} и \mathbf{p}_{20} , относясь к свободно движущимся перед столкновением частицам, от выбора $t - t_0$ не зависят).

Возвратимся к уравнению (16.7) - будущему кинетическому уравнению.

Его левая часть уже имеет требуемый вид; нас будет интересовать теперь интеграл в его правой части, который должен превратиться в конце концов в интеграл столкновений уравнения Больцмана.

Подставив в этот интеграл $f^{(2)}$ из (16.11) и перейдя в обеих частях уравнения от функции $f^{(1)}$ к функции

$$f = \mathcal{N} f^{(1)}, \text{ пишем}$$

$$\frac{\partial f(t, \tau_1)}{\partial t} + \mathbf{v}_1 \frac{\partial f(t, \tau_1)}{\partial \mathbf{r}_1} = \text{St } f$$

где

$$\text{St } f = \int \frac{\partial U_{12}}{\partial \mathbf{r}_1} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1} \{f(t_0, \tau_{10}) f(t_0, \tau_{20})\} d\tau_2$$

В интеграле (16.12) существенна только область $|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1| \sim d \rightarrow$ область, в которой происходит столкновение.

Но в этой области можно пренебречь (в рассматриваемом первом приближении!) координатной зависимостью функции f ; эта функция заметно меняется лишь на расстояниях L (характерные размеры задачи), во всяком случае больших по сравнению с d .

Мы не изменим поэтому окончательного вида интеграла столкновений, если будем рассматривать (с целью некоторого упрощения рассуждений и записи формул) пространственно-однородный случай, т.

е.

предположив, что функция f вообще не зависит от координат.

Сразу же отметим, что в функциях $f(t_0, \mathbf{p}_{10})$, $f(t_0, \mathbf{p}_{20})$ пропадает тогда и явная (через посредство $\mathbf{r}_{10}(t)$ и $\mathbf{r}_{20}(t)$) зависимость от времени.

Преобразуем подинтегральное выражение в (16.12), воспользовавшись тем, что выражение в фигурных скобках является интегралом движения (именно как таковое оно появилось в (16.11)).

Независимо от этого \mathbf{p}_{10} и \mathbf{p}_{20} - значения импульсов в фиксированный момент времени t_0 уже по определению являются интегралами движения.

(????)

Учтя также и отмеченное выше отсутствие в них явной зависимости от времени t , имеем

$$\frac{d}{dt} f(t_0, \mathbf{p}_{10}) f(t_0, \mathbf{p}_{20}) = \left(\mathbf{v}_1 \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_1} + \mathbf{v}_2 \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_2} - \frac{\partial U_{12}}{\partial \mathbf{r}_1} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1} - \frac{\partial U_{12}}{\partial \mathbf{r}_2} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_2} \right) \times f(t_0, \mathbf{p}_{10}) f(t_0, \mathbf{p}_{20}) = 0$$

Выразим отсюда производную по \mathbf{p}_1 через производные по $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$ и \mathbf{p}_2 и подставим в (16.12).

Член с производной $\partial/\partial \mathbf{p}_2$ исчезает после преобразования в интеграл по поверхности в импульсном пространстве.

После этого получим

$$\text{St } f(t, \mathbf{p}_1) = \int \mathbf{v}_{\text{отн}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \{f(t_0, \mathbf{p}_{10}) f(t_0, \mathbf{p}_{20})\} d^3 x d^3 p_2$$

где введена относительная скорость частиц $\mathbf{v}_{\text{отн}} = \mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2$ и учтено, что \mathbf{p}_{10} и \mathbf{p}_{20} (а с ними и все выражение в фигурных скобках) зависят от \mathbf{r}_1 и \mathbf{r}_2 лишь через разность $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$.

Введя вместо $\mathbf{r} = (x, y, z)$ цилиндрические координаты z, ρ, φ с осью z вдоль $\mathbf{v}_{\text{отн}}$, заметив, что $\mathbf{v}_{\text{отн}} \partial/\partial \mathbf{r} = v_{\text{отн}} \partial/\partial z$, и проинтегрировав по dz , перепишем (16.14) в виде ¹⁾

$$\text{St } f(t, \mathbf{p}_1) = \int \left\{ f(t_0, \mathbf{p}_{10}) f(t_0, \mathbf{p}_{20}) \right\} \Big|_{z=-\infty}^{z=\infty} v_{\text{отн}} \rho d\rho d\varphi \cdot d^3 p_2$$

Вспомним теперь, что \mathbf{p}_{10} и \mathbf{p}_{20} - начальные (в момент t_0) импульсы частиц, которые в конечный момент t имеют импульсы \mathbf{p}_1 и \mathbf{p}_2 .

Если в конечный момент $z = z_1 - z_2 = -\infty$, то ясно, что в начальный момент частицы находились «еще дальше» друг от друга, т. е. столкновения вообще не было; другими словами, в этом случае начальные и конечные импульсы совпадают:

$$\mathbf{p}_{10} = \mathbf{p}_1, \quad \mathbf{p}_{20} = \mathbf{p}_2 \quad \text{при} \quad z = -\infty$$

Если же $z = +\infty$, то \mathbf{p}_{10} и \mathbf{p}_{20} играют роль начальных импульсов для столкновения, в результате которого частицы приобретают импульсы \mathbf{p}_1 и \mathbf{p}_2 ; в этом случае введем обозначения

$$\mathbf{p}_{10} = \mathbf{p}'_1(\rho), \quad \mathbf{p}_{20} = \mathbf{p}'_2(\rho) \quad \text{при} \quad z = +\infty$$

Эти значения являются функциями координаты ρ , играющей роль прицельного параметра столкновения.

Произведение же

$$\rho d\rho d\varphi = d\sigma$$

есть классическое сечение столкновений.

Наконец, остается заметить, что явную зависимость функций $f(t_0, \mathbf{p}_{10})$ и $f(t_0, \mathbf{p}_{20})$ от t_0 можно заменить в рассматриваемом приближении такой же зависимостью от t .

Действительно, справедливость утверждения (16.11) требует соблюдения лишь неравенства $t - t_0 \gg d/\bar{v}$: в момент t_0 расстояние между частицами должно быть велико по сравнению с радиусом действия сил d .

Но разность $t - t_0$ может быть выбрана так, чтобы удовлетворять также и условию $t - t_0 \ll l/\bar{v}$, где l - длина пробега; отношение же l/\bar{v} - время свободного пробега - есть как раз та характерная величина, которая определяет периоды возможного изменения функции распределения со временем.

Изменение функции распределения за время $t - t_0$ будет тогда относительно малым, так что им можно пренебречь.

После всего сказанного получаем окончательное выражение для интеграла столкновений (16.15):

$$\text{St } f(t, \mathbf{p}_1) = \int \{ f(t, \mathbf{p}'_1) f(t, \mathbf{p}'_2) - f(t, \mathbf{p}_1) f(t, \mathbf{p}_2) \} v_{\text{отн}} d\sigma d^3 p_2$$

совпадающее с больцмановским интегралом столкновений (3.9).

8.3.8 Кинетическое уравнение с учетом тройных столкновений (-)

!! важно понимать, что это не так уж нужно!!! сперва сделать главное нужно!!!

обзор случаев применения

(?? что ли в любое уравнение можно добавить этот учет??)
когда на самом деле нужно?

мотивация

вообще интересно, думаю, это первая из ненужных тем, которые я заучу, потому что понятная постановка задачи, а вот что дальше - вопрос.

теория

Для нахождения первых поправочных членов к уравнению Больцмана надо вернуться к тем пунктам изложенных в §16 вычислений, в которых были произведены пренебрежения, и продвинуть точность вычислений на один порядок (по параметру газовойности) дальше.

Эти пренебрежения относились, прежде всего, к уравнению (16.9), в котором были опущены члены, содержащие тройную корреляцию $f^{(3)}$; тем самым были исключены из рассмотрения тройные столкновения атомов.

Кроме того, при преобразовании интеграла столкновения (16.12) к окончательному виду (16.16) было пренебрежено изменением функции распределения на расстояниях $\sim d$ и за времена $\sim d/\bar{v}$; тем самым двойные столкновения рассматривались как «локальные» - происходящие в одной точке.

Теперь должны быть учтены оба эти источника поправок - тройные столкновения и «нелокальность» парных столкновений.

В первом приближении цепочка уравнений была оборвана на втором уравнении, связывающем $f^{(2)}$ с $f^{(3)}$.

Во втором приближении надо дойти до третьего уравнения, связывающего $f^{(3)}$ с $f^{(4)}$, причем члены с $f^{(4)}$ в нем можно опустить (подобно тому, как в первом приближении были опущены члены с $f^{(3)}$ в (16.9)).

После этого оно сведется к виду

$$\frac{d}{dt} f^{(3)}(t, \tau_1, \tau_2, \tau_3) = 0$$

аналогичному прежнему уравнению (16.10) для $f^{(2)}$; переменные τ_1, τ_2, τ_3 в (17.1) предполагаются изменяющимися со временем согласно уравнениям движения задачи трех тел (причем взаимодействие между частицами по-прежнему будем считать парным)).

С учетом статистической независимости частиц перед столкновением решение уравнения (17.1) есть

$$f^{(3)}(t, \tau_1, \tau_2, \tau_3) = f^{(1)}(t_0, \tau_{10}) f^{(1)}(t_0, \tau_{20}) f^{(1)}(t_0, \tau_{30})$$

Величины t_0, τ_{a0} ($a = 1, 2, 3$) имеют здесь такой же смысл, что и в (16.11).

$\tau_{a0} = \tau_{a0}(t, t_0, \tau_1, \tau_2, \tau_3)$ - это значения координат и импульсов, которые частицы должны иметь в момент t_0 для того, чтобы к моменту t попасть в заданные точки τ_1, τ_2, τ_3 фазового пространства.

Отличие от (16.11) состоит лишь в том, что теперь $\tau_{a0} = (\mathbf{r}_{a0}, \mathbf{p}_{a0})$ являются начальными значениями координат и импульсов задачи трех (а не двух) тел, которую будем считать в принципе решенной.

Для записи и преобразования дальнейших формул целесообразно ввести оператор \hat{S}_{123} , действие которого на функцию переменных τ_1, τ_2, τ_3 (относящихся к трем частицам в задаче трех тел) заключается в замене этих переменных согласно

$$\begin{aligned} \mathbf{r}_a &\rightarrow \tilde{\mathbf{r}}_a = \mathbf{r}_{a0} + \frac{\mathbf{p}_{a0}}{m} (t - t_0) \\ \mathbf{p}_a &\rightarrow \tilde{\mathbf{p}}_a = \mathbf{p}_{a0} \end{aligned}$$

Аналогичным образом, оператор \hat{S}_{12} будет производить такую же замену в функциях переменных τ_1, τ_2 , относящихся к двум частицам в задаче двух тел.

Важное свойство преобразования (17.3) состоит в том, что при временах $t - t_0 \gg d/\bar{v}$ оно перестает зависеть от времени.

Действительно, при таких $t - t_0$ частицы находятся далеко друг от друга и движутся свободно с постоянными скоростями $\mathbf{v}_{a0} = \mathbf{p}_{a0}/m$; при этом значения \mathbf{r}_{a0} зависят от времени как $\text{const} - \mathbf{v}_{a0}(t - t_0)$ и временная зависимость в (17.3) выпадает.

Заметим также, что если частицы вообще не взаимодействовали бы, то преобразование (17.3) сводилось бы к тождеству: при свободном (в течение всего времени) движении правые части преобразований (17.3) тождественно совпадают с левыми.

По той же причине, если одна из частиц, скажем, частица 1, не взаимодействует с частицами 2 и 3, то $\hat{S}_{123} \equiv \hat{S}_{23}$ операторы же \hat{S}_{12} и \hat{S}_{13} в этих условиях сводятся к единице.

В силу этих свойств очевидно, что оператор

$$\hat{G}_{123} = \hat{S}_{123} - \hat{S}_{12} - \hat{S}_{13} - \hat{S}_{23} + 2$$

обращается в нуль, если хотя бы одна из трех частиц не взаимодействует с двумя другими.

Другими словами, этот оператор выделяет из функций ту часть, которая связана со взаимодействием всех трех частиц (между тем как в задачу трех тел входят, как частные случаи, также и парные столкновения при свободно движущейся третьей частице).

С помощью оператора \hat{S}_{123} формула (17.2) запишется в виде

$$f^{(3)}(t, \tau_1, \tau_2, \tau_3) = \hat{S}_{123} \tilde{f}^{(1)}(t, t_0, \tau_1) \tilde{f}^{(1)}(t, t_0, \tau_2) \tilde{f}^{(1)}(t, t_0, \tau_3)$$

где

$$\tilde{f}^{(1)}(t, t_0, \tau) = f^{(1)}\left(t_0, \mathbf{r} - \frac{\mathbf{p}}{m}(t - t_0), \mathbf{p}\right)$$

(сдвиг аргумента \mathbf{r} в $f^{(1)}$ введен для компенсации сдвига, производимого оператором \hat{S}_{123}).

Двухчастичное распределение $f^{(2)}$ получим, проинтегрировав функцию $f^{(3)}$ по переменным τ_3 , а интегрирование по τ_2 и τ_3 дает функцию распределения $f^{(1)}$:

$$\begin{aligned} f^{(2)}(t, \tau_1, \tau_2) &= \int f^{(3)}(t, \tau_1, \tau_2, \tau_3) d\tau_3 \\ f^{(1)}(t, \tau_1) &= \int f^{(3)}(t, \tau_1, \tau_2, \tau_3) d\tau_2 d\tau_3 \end{aligned}$$

Цель дальнейшего вычисления состоит в том, чтобы из этих двух равенств ($cf^{(3)}$ из (17.5)) путем исключения $\tilde{f}^{(1)}$ с нужной точностью выразить $f^{(2)}$ через $f^{(1)}$.

Подставив затем это выражение в уравнение (16.7) (само по себе точное), мы получим искомое кинетическое уравнение.

Для осуществления этой программы, прежде всего, преобразуем интеграл (17.8), выразив в (17.5) оператор \hat{S}_{123} через \hat{G}_{123} согласно (17.4).

Имея в виду очевидные (в силу сохранения полного числа молекул) равенства

$$\begin{aligned} \int \tilde{f}^{(1)}(t, t_0, \tau) d\tau &= \int f^{(1)}(t_0, \tau) d\tau = 1 \\ \int \hat{S}_{12} \tilde{f}^{(1)}(t, t_0, \tau_1) \tilde{f}^{(1)}(t, t_0, \tau_2) d\tau_1 d\tau_2 &= 1 \end{aligned}$$

получим

$$\begin{aligned} f^{(1)}(t, \tau_1) &= \tilde{f}^{(1)}(t, t_0, \tau_1) + 2 \int \left\{ (\hat{S}_{12} - 1) \tilde{f}^{(1)}(t, t_0, \tau_1) \tilde{f}^{(1)}(t, t_0, \tau_2) \right\} d\tau_2 + \\ &+ \int \left\{ \hat{G}_{123} \tilde{f}^{(1)}(t, t_0, \tau_1) \tilde{f}^{(1)}(t, t_0, \tau_2) \tilde{f}^{(1)}(t, t_0, \tau_3) \right\} d\tau_2 d\tau_3 \end{aligned}$$

Это уравнение можно решать относительно $\tilde{f}^{(1)}$ последовательными приближениями, имея в виду, что $(\hat{S}_{12} - 1)$ первого, а \hat{G}_{123} второго порядка малости (ср.

оценку правой части (16.9)).

В нулевом приближении: $\tilde{f}^{(1)}(t, t_0, \tau_1) = f^{(1)}(t, \tau_1)$.

В следующих двух приближениях получим

$$\begin{aligned} \tilde{f}^{(1)}(t, t_0, \tau_1) &= \\ &= f^{(1)}(t, \tau_1) - 2 \int \left\{ \hat{S}_{12} - 1 \right\} f^{(1)}(t, \tau_1) f^{(1)}(t, \tau_2) d\tau_2 - \\ &- \int \left\{ \hat{G}_{123} - 4(\hat{S}_{12} - 1)(\hat{S}_{13} + \hat{S}_{23} - 2) \right\} f^{(1)}(t, \tau_1) f^{(1)}(t, \tau_2) \times \\ &\times f^{(1)}(t, \tau_3) d\tau_2 d\tau_3 \end{aligned}$$

Теперь остается подставить это выражение в (17.5) и затем в (17.7), сохранив при этом лишь члены не более чем второго порядка малости (члены $\sim (\hat{S}_{12} - 1)^2$ и $\sim \hat{G}_{123}$).

В результате получим окончательно

$$\begin{aligned} f^{(2)}(t, \tau_1, \tau_2) &= \hat{S}_{12} f^{(1)}(t, \tau_1) f^{(1)}(t, \tau_2) + \\ &+ \int \left\{ \hat{R}_{123} f^{(1)}(t, \tau_1) f^{(1)}(t, \tau_2) f^{(1)}(t, \tau_3) \right\} d\tau_3 \end{aligned}$$

где

$$\hat{R}_{123} = \hat{S}_{123} - \hat{S}_{12}\hat{S}_{13} - \hat{S}_{12}\hat{S}_{23} + \hat{S}_{12}$$

Подчеркнем, что порядок следования S -операторов в их произведениях существен.

Оператор $\hat{S}_{12}\hat{S}_{23}$, например, сначала заменяет переменные $\tau_1, \tau_2, \tau_3 \rightarrow \tau_1, \tilde{\tau}_2(\tau_2, \tau_3), \tilde{\tau}_3(\tau_2, \tau_3)$, причем функции $\tilde{\tau}_{2,3}(\tau_2, \tau_3)$ определяются по уравнениям движения взаимодействующих частиц 2 и 3, а затем переменные $\tau_1, \tau_2, \tau_3 \rightarrow \tilde{\tau}_1(\tau_1, \tau_2), \tilde{\tau}_2(\tau_1, \tau_2), \tau_3$ где теперь функции $\tilde{\tau}_{1,2}(\tau_1, \tau_2)$ определяются задачей о движении пары взаимодействующих частиц 1 и 2.

Подставив теперь (17.10) в (16.7) и перейдя везде от функций $f^{(1)}$ к функциям $f = \mathcal{N}f^{(1)}$, найдем кинетическое уравнение в виде

$$\frac{\partial f(t, \tau_1)}{\partial t} + \mathbf{v}_1 \frac{\partial f(t, \tau_1)}{\partial \mathbf{r}_1} = \text{St}^{(2)}f + \text{St}^{(3)}f$$

где

$$\begin{aligned} \text{St}^{(2)}f(t, \tau_1) &= \int \frac{\partial U_{12}}{\partial \mathbf{r}_1} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1} \left\{ \hat{S}_{12} f(t, \tau_1) f(t, \tau_2) \right\} d\tau_2 \\ \text{St}^{(3)}f(t, \tau_1) &= \\ &= \frac{1}{\mathcal{N}} \int \frac{\partial U_{12}}{\partial \mathbf{r}_1} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1} \left\{ \hat{R}_{123} f(t, \tau_1) f(t, \tau_2) f(t, \tau_3) \right\} d\tau_2 d\tau_3 \end{aligned}$$

Первый из этих интегралов есть интеграл двойных, а второй тройных столкновений.

Рассмотрим их структуру детальнее.

В обоих интегралах в подынтегральных выражениях фигурируют функции f , взятые в различных точках пространства.

В интеграле двойных столкновений эффект этой «нелокальности» надо выделить в виде поправки к обычному (больцмановскому) интегралу.

Для этого разложим в нем медленно меняющиеся (на расстояниях $\sim d$) функции f по степеням разности $\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1$

Поскольку эти функции стоят в подынтегральном выражении под знаком оператора \hat{S}_{12} , рассмотрим сначала величины $\hat{S}_{12}\mathbf{r}_1$ и $\hat{S}_{12}\mathbf{r}_2$, в которые этот оператор преобразует переменные \mathbf{r}_1 и \mathbf{r}_2 .

Центр инерции двух частиц $(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)/2$ движется (в задаче двух тел) равномерно; поэтому оператор \hat{S}_{12} эту сумму не меняет.

С учетом этого обстоятельства пишем

$$\begin{aligned}\hat{S}_{12}\mathbf{r}_1 &= \hat{S}_{12}\left(\frac{\mathbf{r}_1+\mathbf{r}_2}{2} + \frac{\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2}{2}\right) = \mathbf{r}_1 + \frac{\mathbf{r}_2-\mathbf{r}_1}{2} - \frac{1}{2}\hat{S}_{12}(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1) \\ \hat{S}_{12}\mathbf{r}_2 &= \mathbf{r}_1 + \frac{\mathbf{r}_2-\mathbf{r}_1}{2} + \frac{1}{2}\hat{S}_{12}(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1)\end{aligned}$$

Разложив теперь функции

$$\begin{aligned}\hat{S}_{12}f(t, \mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1) &= f\left(t, \hat{S}_{12}\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_{10}\right) \\ \hat{S}_{12}f(t, \mathbf{r}_2, \mathbf{p}_2) &= f\left(t, \hat{S}_{12}\mathbf{r}_2, \mathbf{p}_{20}\right)\end{aligned}$$

по $\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1$ с точностью до членов первого порядка, получим

$$\text{St}^{(2)}f = \text{St}_0^{(2)}f + \text{St}_1^{(2)}f$$

где

$$\begin{aligned}\text{St}_0^{(2)}f(t, \mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1) &= \int \frac{\partial U_{12}}{\partial \mathbf{r}_1} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1} \{f(t, \mathbf{r}_1, \mathbf{p}_{10}) f(t, \mathbf{r}_2, \mathbf{p}_{20})\} d\tau_2 \\ \text{St}_1^{(2)}f(t, \mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1) &= \\ &= \frac{1}{2} \int \frac{\partial U_{12}}{\partial \mathbf{r}_1} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1} \left\{ (\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1) \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_1} f(t, \mathbf{r}_1, \mathbf{p}_{10}) f(t, \mathbf{r}_2, \mathbf{p}_{20}) + \right. \\ &+ \left[f(t, \mathbf{r}_1, \mathbf{p}_{10}) \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_1} f(t, \mathbf{r}_1, \mathbf{p}_{20}) - f(t, \mathbf{r}_1, \mathbf{p}_{20}) \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_1} f(t, \mathbf{r}_1, \mathbf{p}_{10}) \right] \times \\ &\quad \left. \times \hat{S}_{12}(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1) \right\} d\tau_2\end{aligned}$$

(дифференцирования по \mathbf{r}_1 производятся при постоянном \mathbf{p}_{10} или \mathbf{p}_{20}). Интеграл (17.16) совпадает с (16.12)¹); в §16 было показано, каким образом (путем выполнения одного из трех интегрирований по пространственным координатам) этот интеграл приводится к обычному больцмановскому виду.

Обратимся к интегралу тройных столкновений (17.14).

Учет «нелокальности» в этом интеграле был бы превышением над принятой здесь точностью, так как сам этот интеграл уже является малой поправкой.

Поэтому в аргументах трех функций f в нем надо положить все радиус-векторы $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3$ одинаковыми (совпадающими с \mathbf{r}_1) и, сверх того, считать, что оператор \hat{R}_{123} на эти переменные вообще не действует²):

$$\begin{aligned}\text{St}^{(3)}f(t, \mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1) &= \\ &= \frac{1}{\mathcal{N}} \int \frac{\partial U_{12}}{\partial \mathbf{r}_1} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1} \left\{ \hat{R}_{123}f(t, \mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1) f(t, \mathbf{r}_1, \mathbf{p}_2) f(t, \mathbf{r}_1, \mathbf{p}_3) \right\} d\tau_2 d\tau_3\end{aligned}$$

Рассмотрим несколько более детально структуру оператора \hat{R}_{123} с целью уяснения характера процессов столкновений, учитываемых интегралом (17.18).

Прежде всего, оператор \hat{R}_{123} (как и оператор \hat{G}_{123} (17.4)) обращается в нуль, если хотя бы одна из трех частиц не взаимодействует с остальными.

В число процессов, для которых $\hat{R}_{123} \neq 0$, входят, однако, не только тройные (в буквальном смысле этого слова) столкновения, но и совокупности нескольких ДВойных. В истинных тройных столкновениях три частицы одновременно вступают в «сферу взаимодействия», как это схематически изображено на рис.

5 а.

Но оператор \hat{R}_{123} отличен от нуля также и для таких процессов «тройных взаимодействий», которые сводятся к трем последовательным двойным столкновениям, причем одна из пар частиц сталкивается между собой дважды; пример такого процесса схематически изображен на рис.

5 б (для этого процесса $\hat{S}_{13} = 1$, так что оператор \hat{R}_{123} сводится к $\hat{S}_{123} - \hat{S}_{12}\hat{S}_{23}^1$).

Более того, оператором \hat{R}_{123} учитываются также и случаи, когда одно (или более) из трех столкновений является «воображаемым», т.

е.

возникающим, лишь если не учитывать влияния на траекторию частиц какого-либо из реальных столкновений.

Пример такого процесса изображен на рис.

5 в: столкновение 1 – 3 имело бы место лишь в отсутствие искажения траектории частицы 3 ее столкновением с частицей 2²) (для этого процесса $\hat{S}_{123} = \hat{S}_{12}\hat{S}_{23}$, но $\hat{S}_{13} \neq 1$, так что \hat{R}_{123} сводится к $-\hat{S}_{12}\hat{S}_{13} + \hat{S}_{12}$)

Подобно тому, как преобразовывался в §16 интеграл $St_0^{(2)}$ может быть выполнено одно из шести интегрирований по координатам в интеграле тройных столкновений; при этом потенциал взаимодействия U_{12} в явном виде исчезает из формул³).

8.3.9 Вириальное разложение кинетических коэффициентов (-)

мотивация

??? эээ

теория

В §7,8 было уже указано, что независимость коэффициентов теплопроводности и вязкости от плотности (или давления) газа является следствием учета одних только парных столкновений молекул.

Именно для таких столкновений их частота (т. е.

число столкновений, испытываемых в 1 с заданной молекулой) пропорциональна плотности N , длина пробега $l \sim 1/N$, а поскольку η и χ пропорциональны Nl , они оказываются независимыми от N .

Получающиеся таким образом значения (обозначим их через η_0 и χ_0) являются, конечно, лишь первыми членами разложения этих величин по степеням плотности (эти разложения называют вириальными).

Уже в следующем приближении появляется зависимость от плотности вида

$$\chi = \chi_0 (1 + \alpha Nd^3), \quad \eta = \eta_0 (1 + \beta Nd^3)$$

где d - параметр порядка величины молекулярных размеров, а α, β - безразмерные постоянные.

Эти первые поправки имеют двоякое происхождение, отраженное в поправочных членах $St^{(3)}$ и $St_1^{(2)}$ в кинетическом уравнении.

Тройные столкновения (частота которых пропорциональна N^2) приводят к уменьшению длины пробега.

Нелокальность же парных столкновений приводит к возможности передачи импульса и энергии через некоторую поверхность без ее фактического пересечения сталкивающимися частицами: частицы сближаются на расстояние $\sim d$ и затем расходятся, оставаясь по разные стороны от поверхности; этот эффект приводит к увеличению потоков импульса и энергии.

Решение задачи о теплопроводности или вязкости с уточненным кинетическим уравнением (17.12) должно строиться по той же схеме, которая была описана в §6-8.

Ищем функцию распределения в виде $f = f_0(1 + \chi/T)$, где f_0 - локально-равновесная функция, а $\chi/T \sim l/L$ - малая добавка.

Интеграл тройных столкновений $St^{(3)}$, как и $St_0^{(2)}$, обращается в нуль функцией f_0 .

Поэтому в нем надо удержать член с χ , в результате чего интеграл $St^{(3)}$ оказывается по отношению к больцмановскому интегралу $St^{(2)}$ поправкой относительного порядка $\sim (d/\bar{r})^3$.

В интеграле же $St_1^{(2)}$, содержащем пространственные производные функции распределения, достаточно положить $f = f_0$; в этом смысле член $St_1^{(2)}$ должен быть отнесен к левой части уравнения, в которой он дает поправку того же относительного порядка $\sim (d/\bar{r})^3$.

Таким образом, оба дополнительных члена в кинетическом уравнении, $St^{(3)}$ и $St_1^{(2)}$, дают вклады одинакового порядка).

Приведем здесь, для справок, результаты решения уточненного кинетического уравнения для теплопроводности и вязкости газа в модели твердых шаров (диаметра d):

$$x = x_0 (1 + 1,2Nd^3), \quad \eta = \eta_0 (1 + 0,35Nd^3)$$

где x_0 и η_0 - значения, полученные в задаче

3§10

(J . V. Sengers, 1966) .

Вводя дальнейшие поправки в кинетическое уравнение (связанное с четверными и т.д. столкновениями), можно было бы в принципе определить и следующие члены вириального разложения кинетических коэффициентов.

неаналитичность и сходимость интегралов

Существенно, однако, что эти члены уже не будут просто целыми степенями N ; функции $x(N)$ и $\eta(N)$ оказываются неаналитическими в точке $N = 0$.

Для выяснения происхождения этой неаналитичности проанализируем вопрос о сходимости интегралов, фигурирующих в излагаемой теории

Рассмотрим интеграл в (17.10), определяющий вклад тройных столкновений в двухчастичную функцию распределения.

Характер сходимости интеграла оказывается различным для различных типов процессов столкновений, учитываемых оператором \hat{R}_{123} .

Рассмотрим для примера процесс типа рис. 5 б. (?????)

Интегрирование производится по фазовому объему $d\tau_3$ при заданных фазовых точках τ_1 и τ_2 .

В качестве переменной, по которой интегрирование производится последним, оставим расстояние r_3 частицы 3 (в момент времени t) от точки, где произошло столкновение 2-3.

Перед этим последним интегрированием подынтегральное выражение будет содержать следующие множители:

1) элемент объема по переменной $r_3 : r_3^2 dr_3$;

2) если следить за движением частицы 3 назад по времени, то будет ясно, что направление ее импульса \mathbf{p}_3 должно лежать в определенном элементе телесных углов для того, чтобы могло произойти столкновение 3-2 - угол, под которым область соударения видна с расстояния r_3 ; отсюда возникает множитель d^2/r_3^2

3) еще один такой множитель возникает в результате дальнейшего ограничения возможных направлений импульса \mathbf{p}_3 , требуемого условием, что «отскачившая» частица 2 должна попасть в сферу соударения с частицей 1.

Таким образом, получается интеграл вида $\int dr_3/r_3^2$, который должен быть взят от расстояния $r_3 \sim d$ до ∞ ; мы видим, что этот интеграл сходится.

Аналогичным образом можно показать, что для процессов столкновения других типов сходимость интеграла оказывается даже более быстрой.

Вклад четверных столкновений выразился бы в (17.10) интегралом аналогичного вида, взятым по фазовому пространству частиц 3 и 4 (снова при заданных τ_1 и τ_2).

Рассмотрим четверное соударение изображенного на рис.

6 типа.

Мы снова оставим расстояние r_3 в качестве переменной последнего интегрирования.

Отличие от предыдущей оценки связано с наличием интегрирования по dr_4 в подынтегральном выражении.

Очевидно, что это интегрирование дает вклад, пропорциональный сечению рассеяния 1-4, т.

е.

$\sim d^2$.

(Второе столкновение 1-2, как и прежде, может быть обеспечено ограничением области интегрирования по направлениям \mathbf{p}_3 .) Из соображений размерности очевидно тогда, что интегрирование по $d\tau_4$ вносит дополнительный вклад порядка $\bar{p}^3 r_3 d^2$.

Интеграл по dr_3 оказывается вида $\int dr_3/r_3$, т.

е.

логарифмически расходится на верхнем пределе.

Обрезая интеграл на некотором расстоянии Λ , получим вклад в функцию $f^{(2)}$, содержащий большой логарифм $\ln(\Lambda/d)$.

Этот логарифм войдет соответственно и в поправку к кинетическим коэффициентам, которая окажется пропорциональной не $(Nd^3)^2$, а $(Nd^3)^2 \ln(\Lambda/d)$. Появление расходящихся членов означает, что четверные столкновения нельзя рассматривать отдельно от столкновений всех более высоких порядков (пятерных и т. д.).

Действительно, расходимость показывает, что существенны большие r_4 .

Но уже при $r_4 \sim l$ частица 4 может столкнуться с какой-либо частицей 5, и т. д.

Отсюда становится ясным путь устранения расходимости: в выражении для функции $f^{(2)}(t, \tau_1, \tau_2)$ надо учесть члены со столкновениями всех порядков, оставив в каждом порядке наиболее быстро расходящиеся интегралы.

Такое суммирование может быть произведено и приводит к результату, который можно было ожидать: произвольный большой параметр Λ под знаком логарифма заменяется на величину порядка длины пробега $l \sim 1/(Nd^2)^{1/2}$.

Таким образом, разложение кинетических коэффициентов имеет вид

$$x = x_0 \left[1 + \alpha_1 Nd^3 + \alpha_2 (Nd^3)^2 \ln \frac{1}{Nd^3} + \dots \right]$$

(и аналогично для η).

8.3.10 Флуктуации функции распределения в равновесном газе (-)

мотивация

а вот хз, зачем это, хотя и интересно для полноты

теория

Определяемая кинетическим уравнением функция распределения \bar{f} дает средние числа молекул, находящихся в элементах фазового объема $d^3x d\Gamma$; для статистически равновесного газа функция $\bar{f}(\Gamma)$ есть независимая от времени и (если нет внешнего поля) от координат \mathbf{r} бoльцмановская функция распределения f_0 .

Естественно возникает вопрос о флуктуациях, испытываемых точной, микроскопической функцией распределения $f(t, \mathbf{r}, \Gamma)$ в ходе ее изменения со временем при движении частиц газа по их точным уравнениям движения ²⁾.

Введем корреляционную функцию флуктуаций (или, как говорят короче, коррелятор)

$$\langle \delta f(t_1, \mathbf{r}_1, \Gamma_1) \delta f(t_2, \mathbf{r}_2, \Gamma_2) \rangle$$

где $\delta f = f - \bar{f}$.

В равновесном газе эта функция зависит только от разности времен $t = t_1 - t_2$; усреднение производится по одному из моментов t_1, t_2 при заданном значении их разности.

Ввиду однородности газа, в виде разности $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ входят в коррелятор также и координаты точек \mathbf{r}_1 и \mathbf{r}_2 .

Поэтому можно, условно положив t_2 и \mathbf{r}_2 равными нулю, представить коррелятор в виде

$$\langle \delta f(t, \mathbf{r}, \Gamma_1) \delta f(0, 0, \Gamma_2) \rangle$$

Ввиду изотропии газа, зависимость этой функции от \mathbf{r} фактически сводится к зависимости от абсолютной величины r .

Если функция (19.2) известна, то ее интегрированием можно найти также и коррелятор плотности числа частиц:

$$\langle \delta N(t, \mathbf{r}) \delta N(0, 0) \rangle = \int \langle \delta f(t, \mathbf{r}, \Gamma_1) \delta f(0, 0, \Gamma_2) \rangle d\Gamma_1 d\Gamma_2$$

Для расстояний r , больших по сравнению с длиной пробега l , коррелятор плотности можно вычислить с помощью гидродинамической теории флуктуаций (см.

IX, §88).

На расстояниях же $\lesssim l$ требуется кинетическое рассмотрение.

Непосредственно из определения (19.1) очевидно, что

$$\langle \delta f(t, \mathbf{r}, \Gamma_1) \delta f(0, 0, \Gamma_2) \rangle = \langle \delta f(-t, -\mathbf{r}, \Gamma_2) \delta f(0, 0, \Gamma_1) \rangle$$

Корреляционная функция обладает также и более глубокой симметрией, выражающей симметрию равновесного состояния системы по отношению к обращению времени.

Обращение времени заменяет более поздний момент времени t на более ранний $-t$, а также меняет значения величин Γ на обращенные Γ^T .

Указанная симметрия выражается поэтому равенством

$$\langle \delta f(t, \mathbf{r}, \Gamma_1) \delta f(0, 0, \Gamma_2) \rangle = \langle \delta f(-t, \mathbf{r}, \Gamma_1^T) \delta f(0, 0, \Gamma_2^T) \rangle$$

При $t = 0$ функция (19.2) связывает флуктуации в различных точках фазового пространства в один и тот же момент времени.

Но корреляции между одновременными флуктуациями распространяются лишь на расстояниях порядка величины радиуса действия молекулярных сил.

Между тем в рассматриваемой теории такие расстояния рассматриваются как равные нулю и, таким образом, одновременный коррелятор обращается в нуль.

Подчеркнем, что это обстоятельство связано именно с равновесностью состояния, относительно которого рассматриваются флуктуации.

В неравновесном случае, как мы увидим в следующем параграфе, одновременные флуктуации тоже коррелированы. В отсутствие корреляции на отличных от нуля расстояниях одновременный коррелятор сводится к δ -функциям, причем коэффициент при этих функциях определяет средний квадрат флуктуации в одной точке фазового пространства (ср.

IX, § 88).

В идеальном равновесном газе средний квадрат флуктуации функции распределения совпадает со средним значением самой этой функции (см.

V, §113) и, таким образом,

$$\langle \delta f(0, \mathbf{r}, \Gamma_1) \delta f(0, 0, \Gamma_2) \rangle = \bar{f}(\Gamma_1) \delta(\mathbf{r}) \delta(\Gamma_1 - \Gamma_2)$$

Неодновременная же корреляция между флуктуациями в различных точках существует уже и в теории, пренебрегающей молекулярными размерами.

Необходимость возникновения этой корреляции очевидна уже из того, что частицы, участвующие в определенный момент во флуктуации в некотором месте фазового пространства, в следующие моменты будут уже находиться в других местах.

Задача о вычислении коррелятора при $t \neq 0$ не может быть решена в общем виде, но может быть сведена к решению определенных уравнений.

Для этого надо вспомнить следующее положение общей теории квазистационарных флуктуаций (см.

V, §118, 119) Пусть $x_a(t)$ - флуктуирующие величины с равными нулю средними значениями).

Предполагается, что если система находится в неравновесном состоянии со значениями x_a , выходящими за пределы их средних флуктуаций (но все же малыми), то процесс релаксации системы к равновесию описывается линейными «уравнениями движения» вида

$$\dot{x}_a = - \sum_b \lambda_{ab} x_b$$

с постоянными коэффициентами λ_{ab} .

Тогда можно утверждать, что корреляторы величин x_a удовлетворяют таким же уравнениям

$$\frac{d}{dt} \langle x_a(t) x_c(0) \rangle = - \sum_b \lambda_{ab} \langle x_b(t) x_c(0) \rangle, \quad t > 0$$

(индекс c в этой системе уравнений свободный).

Решив эти уравнения при $t > 0$, найдем затем значения функций при $t < 0$ согласно свойству симметрии

$$\langle x_a(t) x_b(0) \rangle = \langle x_b(-t) x_a(0) \rangle$$

являющемуся следствием определения корреляторов.

В данном случае роль уравнений движения (19.7) играет линеаризованное уравнение Больцмана для малой добавки δf к равновесной функции распределения \bar{f} .

Таким образом, коррелятор функции распределения должен удовлетворять интегродифференциальному уравнению

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v}_1 \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} - \hat{I}_1 \right) \langle \delta f(t, \mathbf{r}, \Gamma_1) \delta f(0, 0, \Gamma_2) \rangle = 0 \quad \text{при } t > 0, \quad (19.10)$$

где \hat{I}_1 - линейный интегральный оператор, действующий на переменные Γ_1 в следующей за ним функции согласно определению:

$$\hat{I}_1 g(\Gamma_1) = \int w(\Gamma_1, \Gamma; \Gamma'_1, \Gamma') [\bar{f}'_1 g'_1 + \bar{f}' g' - \bar{f}_1 g_1 - \bar{f} g] d\Gamma d\Gamma'_1 d\Gamma'$$

Переменные же Γ_2 в уравнении (19.10) - свободные.

Начальным условием для уравнения служит значение (19.6) коррелятора при $t = 0$, а коррелятор при $t < 0$ определяется затем равенством (19.4) (условие же (19.5) удовлетворяется в результате автоматически).

Формулы (19.10), (19.11), (19.4) и дают ту совокупность уравнений, которые в принципе достаточны для полного определения коррелятора

Обычно представляет интерес не сам коррелятор, а его фурье-образ по координатам и времени, который мы обозначим символом $(\delta f_1 \delta f_2)_{\omega \mathbf{k}}$, где индексы 1 и 2 обозначают аргументы Γ_1 и Γ_2 :

$$(\delta f_1 \delta f_2)_{\omega \mathbf{k}} = \int_{-\infty}^{\infty} dt \int \langle \delta f(t, \mathbf{r}, \Gamma_1) \delta f(0, 0, \Gamma_2) \rangle e^{-i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)} d^3x$$

(спектральная функция флуктуаций, или спектральный коррелятор).

Если флуктуирующую функцию разложить в интеграл Фурье по времени и координатам, то среднее значение произведений ее фурье-компонент связано со спектральным коррелятором формулой

$$\langle \delta f_{\omega \mathbf{k}}(\Gamma_1) \delta f_{\omega' \mathbf{k}'}(\Gamma_2) \rangle = (2\pi)^4 \delta(\omega + \omega') \delta(\mathbf{k} + \mathbf{k}') (\delta f_1 \delta f_2)_{\omega \mathbf{k}}$$

(ср. V, §122) Легко написать уравнение, которое позволяет в принципе определить спектральную функцию флуктуаций без предварительного вычисления пространственно-временного коррелятора.

Разбив область интегрирования по t в (19.12) на две части (от $-\infty$ до 0 и от 0 до ∞) и используя (19.4), получим

$$(\delta f_1 \delta f_2)_{\omega \mathbf{k}} = (\delta f_1 \delta f_2)_{\omega \mathbf{k}}^{(+)} + (\delta f_2 \delta f_1)_{-\omega - \mathbf{k}}^{(+)}$$

где

$$(\delta f_1 \delta f_2)_{\omega \mathbf{k}}^{(+)} = \int_0^{\infty} dt \int \langle \delta f(t, \mathbf{r}, \Gamma_1) \delta f(0, 0, \Gamma_2) \rangle e^{-i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)} d^3x$$

Совершим над уравнением (19.10) одностороннее преобразование Фурье (19.15).

При этом члены с производными по t и по \mathbf{r} интегрируем по частям, учитывая, что коррелятор должен стремиться к нулю при $\mathbf{r} \rightarrow \infty$ и при $t \rightarrow \infty$, а при $t = 0$ должен даваться формулой (19.6).

В результате получим искомое уравнение в виде

$$[i(\mathbf{k}\mathbf{v}_1 - \omega) - \hat{I}_1] (\delta f_1 \delta f_2)_{\omega \mathbf{k}}^{(+)} = \bar{f}(\Gamma_1) \delta(\Gamma_1 - \Gamma_2)$$

Если интересоваться не флуктуациями самой функции распределения, а лишь флуктуациями плотности газа, целесообразно проинтегрировать уравнение (19.16) по $d\Gamma_2$:

$$[i(\mathbf{k}\mathbf{v} - \omega) - \hat{I}](\delta f(\Gamma) \delta N)_{\omega \mathbf{k}}^{(+)} = \bar{f}(\Gamma)$$

Искомая же спектральная функция $(\delta N^2)_{\omega \mathbf{k}}$ получается из решения этого уравнения однократным (а не двукратным, как в (19.3)) интегрированием.

Другой способ нахождения $(\delta N^2)_{\omega \mathbf{k}}$ основан на связи коррелятора плотности с обобщенной восприимчивостью по отношению к слабому внешнему полю вида

$$U(t, \mathbf{r}) = U_{\omega \mathbf{k}} e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)}$$

(см.

IX, §86¹).

Если под влиянием этого поля возникает изменение плотности

$$\delta N_{\omega \mathbf{k}} = \alpha(\omega, \mathbf{k}) U_{\omega \mathbf{k}}$$

то (согласно IX, (86.20)) в классическом пределе спектральный коррелятор плотности

$$(\delta N^2)_{\omega \mathbf{k}} = \frac{2T}{\omega} \text{Im } \alpha(\omega, \mathbf{k})$$

Пусть $\delta f(t, \mathbf{r})$ - изменение функции распределения под влиянием этого же поля.
Оно удовлетворяет кинетическому уравнению

$$\frac{\partial \delta f}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial \delta f}{\partial \mathbf{r}} - \frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial \bar{f}}{\partial \mathbf{v}} = \hat{I} \delta f$$

Фурье-компоненты функции $\delta f(t, \mathbf{r}, \Gamma)$ запишем в виде

$$f_{\omega \mathbf{k}}(\Gamma) = \chi_{\omega \mathbf{k}}(\Gamma) U_{\omega \mathbf{k}}$$

выделив в них внешнее поле.

Тогда для $\chi_{\omega \mathbf{k}}$ имеем уравнение

$$[i(\mathbf{k}\mathbf{v} - \omega) - \hat{I}] \chi_{\omega \mathbf{k}}(\Gamma) = i\mathbf{k} \frac{\partial \bar{f}}{\partial \mathbf{v}}$$

$$[i(\mathbf{k}\mathbf{v} - \omega) - \hat{I}] \chi_{\omega \mathbf{k}}(\Gamma) = i\mathbf{k} \frac{\partial \bar{f}}{\partial \mathbf{v}}$$

По решению этого уравнения искомый спектральный коррелятор определяется однократным интегрированием:

$$(\delta N^2)_{\omega \mathbf{k}} = \frac{2T}{\omega} \text{Im} \int \chi_{\omega \mathbf{k}}(\Gamma) d\Gamma$$

коррелятор плотности в равновесном одноатомном газе в пренебрежении столкновениями

Определим коррелятор плотности в равновесном одноатомном газе в пренебрежении столкновениями.

Для одноатомного газа величинами Γ являются три компоненты импульса \mathbf{p} .

Решение уравнения (19.10) при $\hat{I}_1 = 0$:

$$\langle \delta f(t, \mathbf{r}, \mathbf{p}_1) \delta f(0, 0, \mathbf{p}_2) \rangle = \bar{f}(\mathbf{p}_1) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{v}_1 t) \delta(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2)$$

Его фурье-компонента:

$$(\delta f_1 \delta f_2)_{\omega \mathbf{k}} = 2\pi \bar{f}(\mathbf{p}_1) \delta(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2) \delta(\omega - \mathbf{k}\mathbf{v}_1)$$

Интегрирование этих выражений (с максвелловской функцией \bar{f}) дает для коррелятора плотности:

$$\begin{aligned} \langle \delta N(t, \mathbf{r}) \delta N(0, 0) \rangle &= \bar{N} \left(\frac{m}{2\pi T} \right)^{3/2} \frac{1}{t^3} \exp\left(-\frac{m\mathbf{r}^2}{2Tt^2}\right), \\ (\delta N^2)_{\omega \mathbf{k}} &= \frac{\bar{N}}{k} \left(\frac{2\pi m}{T} \right)^{1/2} \exp\left(-\frac{m\omega^2}{2Tk^2}\right) \end{aligned}$$

То же для интеграла столкновений вида $\hat{I}_1 g = -g/\tau$ с постоянным временем τ

2. То же для интеграла столкновений вида $\hat{I}_1 g = -g/\tau$ с постоянным временем τ .

Р е ш е н и е.

Уравнение (19.16) сводится к алгебраическому. Определив из него $(\delta f_1 \delta f_2)_{\omega \mathbf{k}}^{(+)}$, найдем затем по (19.14):

$$(\delta f_1 \delta f_2)_{\omega \mathbf{k}} = \frac{2\tau \bar{f}(\mathbf{p}_1)}{1 + \tau^2 (\mathbf{k}\mathbf{v}_1 - \omega)^2} \delta(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2)$$

Отметим, что наличие даже малого числа столкновений меняет асимптотическое поведение спектрального коррелятора плотности при больших частотах, $\omega \gg k\bar{v}$, т. е.

для флуктуаций с фазовой скоростью, много большей тепловой скорости молекул. Действительно, в этом пределе

$$(\delta N^2)_{\omega \mathbf{k}} = \frac{2\bar{N}}{\tau\omega^2}$$

т. е. коррелятор убывает с увеличением частоты по степенному закону вместо экспоненциального в (2).

8.3.11 Флуктуации функции распределения в неравновесном газе (-)

мотивация

сперва равновесный газ, конечно, заучить нужно.

обзор примеров

теория

Пусть газ находится в стационарном, но неравновесном состоянии с некоторой функцией распределения $\bar{f}(\mathbf{r}, \Gamma)$, удовлетворяющей кинетическому уравнению

$$\mathbf{v} \frac{\partial \bar{f}}{\partial \mathbf{r}} = \text{St} \bar{f}$$

Функция \bar{f} может сильно отличаться от равновесной функции распределения f_0 , так что интеграл столкновений $\text{St} \bar{f}$ не предполагается линеаризованным по разности $\bar{f} - f_0$.

Стационарное неравновесное состояние должно поддерживаться в газе внешними воздействиями: в газе может иметься поддерживаемый внешними источниками градиент температуры, газ может совершать стационарное движение (не сводящееся к движению как целого) и т. п.

Поставим задачу о вычислении флуктуаций функции распределения $f(t, \mathbf{r}, \Gamma)$ относительно $\bar{f}(\mathbf{r}, \Gamma)$.

Эти флуктуации будут снова характеризоваться коррелятором (19.1), в котором усреднение производится обычным образом по времени при заданной разности $t = t_1 - t_2$, и коррелятор зависит только от t .

Ввиду неоднородности распределения $\bar{f}(\mathbf{r}, \Gamma)$, однако, коррелятор будет зависеть теперь от координат \mathbf{r}_1 и \mathbf{r}_2 по отдельности, а не только от их разности.

Свойство (19.4) запишется теперь в виде

$$\langle \delta f_1(t) \delta f_2(0) \rangle = \langle \delta f_2(-t) \delta f_1(0) \rangle$$

где

$$f_1(t) \equiv f(t, \mathbf{r}_1, \Gamma_1), \quad f_2(0) \equiv f(0, \mathbf{r}_2, \Gamma_2)$$

Соотношение же (19.5), связанное с обращением времени, в неравновесном случае, вообще говоря, отсутствует.

Коррелятор функции распределения по-прежнему удовлетворяет тому же уравнению (19.10):

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v}_1 \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_1} - \hat{I}_1 \right) \langle \delta f_1(t) \delta f_2(0) \rangle = 0$$

где \hat{I}_1 - линейный интегральный оператор (19.11), действующий на переменные Γ_1).

Вопрос же о начальном условии к этому уравнению, т.

е.

о виде одновременного коррелятора, значительно более сложен, чем в равновесном случае, где он давался просто выражением (19.6).

В неравновесном газе одновременный коррелятор сам определяется из некоторого кинетического уравнения, вид которого можно установить, воспользовавшись связью корреляционной функции с двухчастичной функцией распределения $\bar{f}^{(2)}$, введенной в §16.

В стационарном состоянии функция $\bar{f}^{(2)}(\mathbf{r}_1, \Gamma_1; \mathbf{r}_2, \Gamma_2)$, как и $\bar{f}(\mathbf{r}, \Gamma)$, не зависит явно от времени.

Для вывода этой связи замечаем, что ввиду бесконечной малости фазового объема $d\tau = d^3x d\Gamma$ в нем может находиться одновременно не более одной частицы²⁾.

Поэтому среднее число $\bar{f}d\tau$ есть в то же время вероятность частице находиться в элементе $d\tau$ (вероятность же нахождения в нем сразу двух частиц есть величина более высокого порядка малости).

Отсюда же следует, что среднее значение произведения чисел частиц в двух элементах $d\tau_1$ и $d\tau_2$ совпадает с вероятностью одновременного нахождения в каждом из них по одной частице.

Для заданной пары частиц это есть, по определению двухчастичной функции распределения, произведение $\bar{f}_{12}^{(2)} d\tau_1 d\tau_2$.

Но поскольку пара частиц может быть выбрана из (очень большого) полного числа частиц $\mathcal{N}(\mathcal{N} - 1) \approx \mathcal{N}^2$ способами, то

$$\langle f_1 d\tau_1 \cdot f_2 d\tau_2 \rangle = \mathcal{N}^2 \bar{f}_{12}^{(2)} d\tau_1 d\tau_2$$

Получающееся таким образом равенство $\langle f_1 f_2 \rangle = \mathcal{N}^2 \bar{f}_{12}^{(2)}$ относится, однако, лишь к различным точкам фазового пространства.

Переход же к пределу $\mathbf{r}_1, \Gamma_1 \rightarrow \mathbf{r}_2, \Gamma_2$ требует учета того, что если $d\tau_1$ и $d\tau_2$ совпадают, то атом, находящийся в $d\tau_1$, тем самым находится и в $d\tau_2$.

Соотношение, учитывающее это обстоятельство, имеет вид

$$\langle f_1 f_2 \rangle = \mathcal{N}^2 \bar{f}_{12}^{(2)} + \bar{f}_1 \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \delta(\Gamma_1 - \Gamma_2)$$

Действительно, умножим это равенство на $d\tau_1 d\tau_2$ и проинтегрируем по некоторому малому объему $\Delta\tau$.

Первый член справа дает при этом малую величину второго порядка ($\sim (\Delta\tau)^2$); член же с δ -функциями дает $\bar{f}\Delta\tau$, т. е.

величину первого порядка.

Мы получим, следовательно,

$$\left\langle \left(\int_{\Delta\tau} f d\tau \right)^2 \right\rangle = \bar{f} \Delta\tau$$

как и должно быть, принимая во внимание, что с точностью до величин первого порядка в малом объеме $\Delta\tau$ может находиться лишь 0 или 1 частица.

Подставив (20.4) в определение одновременного коррелятора

$$\langle \delta f_1(0) \delta f_2(0) \rangle = \langle f_1(0) f_2(0) \rangle - \bar{f}_1 \bar{f}_2$$

получим искомую связь между ним и двухчастичной функцией распределения:

$$\langle \delta f_1(0) \delta f_2(0) \rangle = \mathcal{N}^2 \bar{f}_{12}^{(2)} - \bar{f}_1 \bar{f}_2 + \bar{f}_1 \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \delta(\Gamma_1 - \Gamma_2)$$

В равновесном идеальном газе двухчастичная функция распределения сводится к произведению $\bar{f}_{12}^{(2)} = \bar{f}_1 \bar{f}_2 / \mathcal{N}^2$, и тогда (20.5) сводится к (19.6).

В любом случае $\bar{f}_{12}^{(2)}$ стремится к указанному произведению при увеличении расстояния между точками 1 и 2 так что

$$\langle \delta f_1(0) \delta f_2(0) \rangle \rightarrow 0 \text{ при } |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| \rightarrow \infty$$

Двухчастичная функция распределения удовлетворяет кинетическому уравнению, аналогичному уравнению Больцмана.

Это уравнение можно было бы вывести из уравнения (16.9) для $\bar{f}^{(2)}$ подобно тому, как уравнение для одночастичной функции было выведено из (16.7)¹).

Мы, однако, дадим здесь вывод уравнения для $\bar{f}^{(2)}$, аналогичный основанному на наглядных физических соображениях выводу уравнения Больцмана в §3.

Будем рассматривать в качестве неизвестной не самую функцию $\bar{f}^{(2)}$, а разность

$$\varphi(\mathbf{r}_1, \Gamma_1; \mathbf{r}_2, \Gamma_2) = \mathcal{N}^2 \bar{f}_{12}^{(2)} - \bar{f}_1 \bar{f}_2$$

обращающуюся в нуль при $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| \rightarrow \infty$ (коррелятор без последнего члена).

Эта величина является малой в обычном

в теории флуктуаций смысле - порядка $1/\mathcal{N}$ по сравнению с $\bar{f}_1 \bar{f}_2$. В отсутствие столкновений функция φ удовлетворяет уравнению, выражающему собой просто теорему Лиувилля - постоянство $\bar{f}^{(2)}$ вдоль фазовой траектории пары частиц: $\frac{d\bar{f}^{(2)}}{dt} = \frac{d\varphi}{dt} = \mathbf{v}_1 \frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{r}_1} + \mathbf{v}_2 \frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{r}_2} = 0$. Изменение же φ за счет столкновений связано с процессами двоякого рода.

Столкновения частиц 1 и 2 со всеми остальными частицами, но не друг с другом, приводят к появлению в правой части уравнения (20.8) членов $\hat{I}_1 \varphi + \hat{I}_2 \varphi$, где \hat{I}_1 и \hat{I}_2 - линейные интегральные операторы (19.11), действующие соответственно на переменные Γ_1 и Γ_2 .

Столкновения же частиц 1 и 2 друг с другом играют особую роль; они приводят к одновременному «перескоку» обеих частиц. В точности те же соображения, что и при выводе (3.7), дают в правой части (20.8) член вида $\delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \text{St}_{12} \bar{f}$, где

$$\text{St}_{12} \bar{f} = \int w(\Gamma_1, \Gamma_2; \Gamma'_1 \Gamma'_2) (\bar{f}'_1 \bar{f}'_2 - \bar{f}_1 \bar{f}_2) d\Gamma'_1 d\Gamma'_2$$

(в этом интеграле флуктуациями можно пренебречь); множитель $\delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ выражает тот факт, что столкновения испытывают частицы, находящиеся в одной точке пространства).

Окончательно приходим к следующему уравнению:

$$\mathbf{v}_1 \frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{r}_1} + \mathbf{v}_2 \frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{r}_2} - \hat{I}_1 \varphi - \hat{I}_2 \varphi = \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \text{St}_{12} \bar{f}$$

Решив это уравнение, мы получим согласно (20.5) функцию, играющую роль начального условия к уравнению (20.3) при $t = 0^2$.

Без правой части однородное уравнение (20.10) имеет решение

$$\varphi = f_{01} \Delta f_{02} + f_{02} \Delta f_{01}, \quad \Delta f_0 = \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{N}} \Delta \mathcal{N} + \frac{\partial f_0}{\partial T} \Delta T + \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{v}} \Delta \mathbf{v}$$

отвечающее произвольным малым изменениям числа частиц, температуры и макроскопической скорости в равновесном распределении f_0 .

Это «паразитное» решение, однако, исключается условием $\varphi \rightarrow 0$ при $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| \rightarrow \infty$.

Поэтому в равновесном случае, когда интеграл St_{12} тождественно обращается в нуль, из уравнения (20.10) следует $\varphi = 0$ и мы возвращаемся к начальному условию (19.6). Правая часть уравнения (20.10), т.

е.

парные столкновения между частицами в заданных состояниях Γ_1 и Γ_2 , является, таким образом, источником одновременной корреляции флуктуаций в неравновесном газе.

Приводя к одновременному изменению чисел заполнения двух состояний, парные столкновения порождают корреляцию между этими числами.

В равновесном состоянии, ввиду точной компенсации прямых и обратных парных столкновений, этот механизм неэффективен и одновременные корреляции отсутствуют.

Если распределение \bar{f} не зависит от координат \mathbf{r} (как это может быть при поддержании неравновесности внешним полем), то можно поставить вопрос о флуктуациях функции распределения, усредненной по всему объему газа, т.

е.

о флуктуациях функции

$$f(t, \Gamma) = \frac{1}{\mathcal{V}} \int f(t, \mathbf{r}, \Gamma) d^3x$$

(которую мы обозначим той же буквой f , но без аргумента \mathbf{r}).

Соответствующая корреляционная функция удовлетворяет уравнению, отличающемуся от (20.3) отсутствием члена с производной по координатам:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{F}_1 \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1} - \hat{I}_1 \right) \langle \delta f(t, \Gamma_1) \delta f(0, \Gamma_2) \rangle = 0 \text{ при } t > 0$$

в левой части добавлен член, связанный с силой \mathbf{F} , действующей на частицы во внешнем поле.

Одновременный же коррелятор

$$\begin{aligned} \langle \delta f(0, \Gamma_1) \delta f(0, \Gamma_2) \rangle &= \mathcal{N}^2 \bar{f}^{(2)}(\Gamma_1, \Gamma_2) - \bar{f}(\Gamma_1) \bar{f}(\Gamma_2) + \frac{\bar{f}(\Gamma_1)}{\mathcal{V}} \delta(\Gamma_1 - \Gamma_2) \equiv \\ &\equiv \varphi(\Gamma_1, \Gamma_2) + \frac{\bar{f}(\Gamma_1)}{\mathcal{V}} \delta(\Gamma_1 - \Gamma_2) \end{aligned}$$

удовлетворяет уравнению

$$\left[\mathbf{F}_1 \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1} + \mathbf{F}_2 \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_2} - (\hat{I}_1 + \hat{I}_2) \right] \varphi(\Gamma_1, \Gamma_2) = \text{St}_{12} \varphi(\Gamma_1, \Gamma_2)$$

Если газ находится в замкнутом сосуде, то это уравнение должно решаться при дополнительном условии, выражающем собой заданность (т. е. отсутствие флуктуаций) полного числа частиц в газе:

$$\int \langle \delta f(0, \Gamma_1) \delta f(0, \Gamma_2) \rangle d\Gamma_1 = \int \langle \delta f(0, \Gamma_1) \delta f(0, \Gamma_2) \rangle d\Gamma_2 = 0$$

Это условие должно выполняться и в равновесном случае.

Между тем выражение $\bar{f}(\Gamma_1) \delta(\Gamma_1 - \Gamma_2) / \mathcal{V}$, соответствующее коррелятору (19.6), ему не удовлетворяет.

Правильное выражение можно получить за счет произвола (20.11); подобрав должным образом параметр $\Delta \mathcal{N}$, получим

$$\langle \delta f(0, \Gamma_1) \delta f(0, \Gamma_2) \rangle = \frac{1}{\mathcal{V}} \bar{f}(\Gamma_1) \delta(\Gamma_1 - \Gamma_2) - \frac{1}{\mathcal{N}} \bar{f}(\Gamma_1) \bar{f}(\Gamma_2)$$

Отметим, что этот коррелятор содержит также и не δ -функциональный член.

8.4 Типичные гидродинамические модели

8.4.1 уравнения Навье-Стокса

главные формулы

обзор применений

Вывод уравнений Навье-Стокса

8.4.2 Перенос и перемешивание в случайных потоках

(эту главу перенесу в другие места!)

перенос в двух словах

Понятие о хаотическом потоке

Примеры хаотических течений

Перенос примеси потоком

Диффузия примеси

Размешивание примеси хаотическим потоком

Уравнение переноса пассивного скаляра

Уравнение переноса пассивного скаляра, испытующего распад и подпитываемого накачкой, имеет вид

$$\partial_t \theta + (v \nabla) \theta = -\gamma \theta + f$$

где γ - скорость распада скаляра.

Можно считать накачку случайной по времени y имеющей некоторую корреляцию в пространстве, так что

$$\langle f(t, r_1) f(t', r_2) \rangle = \delta(t - t') \chi(r_1 - r_2)$$

Мы предполагаем, что накачка изотропна, так что функция $\chi(r)$ зависит на самом деле только от абсолютного значения вектора r и убывает на некотором масштабе L .

Исследуем, как будет устроена корреляционная функция пассивного скаляра на расстояниях, много меньших корреляционной длины поля скорости жидкости.

На таких расстояниях можно считать профиль поля скорости линейным, так что

$$\langle (v^i(t, r_1) - v^i(t, r_2)) (v^j(t', r_1) - v^j(t', r_2)) \rangle = D (2r^2 \delta^{ij} - r^i r^j) \delta(t - t'),$$

где $r = r_1 - r_2$.

Вид пространственной зависимости корреляционной функции однозначно фиксируется требованиями

- i) линейности по координате профиля поля скорости;
- ii) бездивергентностью поля скорости;
- iii) изотропностью статистики поля скорости.

Перейдём в систему координат, начало которой движется вместе с некоторым зафиксированным элементом жидкости.

В этой системе координат скорость в окрестности начала координат задаётся матрицей σ^{ij} градиента поля скорости,

$$v^i = \sigma^{ij} r^j$$

Корреляционная функция случайного процесса σ^{ij} вытекает из корреляционной функции поля скорости

$$\langle \sigma^{ij}(t) \sigma^{lk}(t') \rangle = D (4\delta^{il}\delta^{jk} - \delta^{ik}\delta^{jl} - \delta^{ij}\delta^{lk}) \delta(t - t')$$

Уравнение на скаляр в выбранной нами системе отсчёта имеет вид

$$\partial_t \theta = [\sigma^{ij} r^j \nabla_i - \gamma] \theta + f$$

Формально, эволюцию θ можно записать в виде

$$\theta(t) = \hat{\mathcal{U}}(t, t_0) \theta(t_0) + \int_{t_0}^t dt' \mathcal{U}(t, t') f(t')$$

$$\mathcal{U}(t, t_0) = \mathcal{T} \exp \left[\int_{t_0}^t (\sigma^{ij}(t') r^j \nabla_i - \gamma) dt' \right]$$

где \mathcal{T} - оператор временного упорядочения, который расставляет операторы в порядке убывания их временного аргумента.

Уравнение на парную корреляционную функцию (лол, откуда 8?)

$$\begin{aligned} \partial_t F_2(r) &\equiv \partial_t \langle \theta(t, 0) \theta(t, r) \rangle = \\ &= (D (2r^2 \partial_r^2 + 8r \partial_r) - 2\gamma) F_2(r) + \chi(r) \end{aligned}$$

Точки парной корреляционной функции мы выбираем из соображений удобства: исходно задача была трансляционно-инвариантной, но мы специально выбрали систему координат, в которой проще проводить вычисления.

Мы также учли, что для изотропного случая парная корреляционная функция зависит только от абсолютного значения r .

Граничными условиями является конечность функции F_2 в нуле и стремление к нулю на бесконечности.

Метод получения уравнения (6.8) следующий: надо во временную производную от корреляционной функции подставить производные от θ в начале координат и в точке r , произведя усреднение по накачке и по флуктуациям скорости.

Вклад от накачки получается следующим образом (выписываем только релевантные слагаемые):

$$\begin{aligned} \theta(t, r) &= \int dt' f(t', r) \\ \partial_t F_2(r) &= \left\langle f(t, 0) \int^t dt' f(t', r) + f(t, r) \int^t dt' f(t', 0) \right\rangle = \chi(r), \end{aligned} \quad (8.2)$$

поскольку мы полагаем, что $\int^0 dt \delta(t) = 1/2$.

Слагаемое в (6.8), пропорциональное амплитуде флуктуаций скорости D , можно получить следующим образом.

В представлении (6.7) удержим только решение, зависящее от начального условия в момент времени t_0 , а в нём только вклад от скорости.

Нас интересует производная по времени: нулевой член разложения \mathcal{T} -экспоненты поэтому нам не интересен.

Первый член разложения обращается после усреднения в ноль, а второй член разложения как раз приводит к ненулевому вкладу.

размешивание скаляра полем скорости

Пассивный скаляр размешивается крупномасштабным полем скорости; при этом имеются и накачка, и объемное поглощение:

$$\partial_t \theta + (\mathbf{v} \nabla) \theta - \gamma \theta = f(\mathbf{x}, t)$$

$$\langle f(\mathbf{x}, t) f(\mathbf{x}', t') \rangle = \chi(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta(t - t')$$

$$v_\alpha(\mathbf{x}, t) = \sigma_{\alpha\beta}(t) x_\beta$$

где d - размерность пространства и функция $\chi(r)$ имеет характерный масштаб L , \mathcal{G} - константа размерности с^{-1} , определяющая силу шума.

Определить одновременную корреляционную функцию пассивного скаляра $F(r) = \langle \theta(\mathbf{r}) \theta(0) \rangle$ на расстояниях $r \ll L$

8.5 Неравновесная плазма

(лл10 куча всего)

(соответственно куча статей и пойдет из этой главы, огромнейшая будет, супер подробно плазма пройдена будет)

(электродинамику собираю в дополнениях!!!! тут ее слишком много для кинетики)

8.5.1 обзор кинетики плазмы

какие в ней разделы есть?

что дает?

обзор свойств плазмы

Во избежание непринципиальных усложнений мы будем (где это понадобится) считать плазму двухкомпонентной - содержащей лишь электроны (заряд $-e$) и положительные ионы одного сорта с зарядом ze .

спектр плазмонов имеет вид:

типы плазмы

есть максвелловская плазма, лоренцева.

кот знает, в чем их разница?

связь плазмы с другими подходами

я так понимаю, что плазма это электроны те же, только при некоторых определенных условиях.

(???)

так что такое плазма?

плазма это ионизированный газ.

все что ли?

обзор уравнений Власова

главная идея власова состоит в том, что

(???)

Самосогласованная замкнутая система уравнений Власова для определения функций распределения и полей \mathbf{E} и \mathbf{B} имеет вид ниже.

Кинетические уравнения для функции распределения электронов с зарядом $(-e)$ и функции распределения ионов с зарядом Ze

$$\begin{aligned}\frac{\partial n}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial n}{\partial \mathbf{r}} - e \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} [\mathbf{v} \times \mathbf{B}] \right) \frac{\partial n}{\partial \mathbf{p}} &= 0 \\ \frac{\partial n_i}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial n_i}{\partial \mathbf{r}} + Ze \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} [\mathbf{v} \times \mathbf{B}] \right) \frac{\partial n_i}{\partial \mathbf{p}} &= 0\end{aligned}$$

Плотность заряда $\rho(\mathbf{r}, t)$ и плотность тока $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$ выразим через функции распределения

$$\begin{aligned}\rho &= e \int (Zn_i - n) d\Gamma_p \\ \mathbf{j} &= e \int \mathbf{v} (Zn_i - n) d\Gamma_p\end{aligned}$$

Чтобы получить замкнутую систему уравнений, мы должны включить в рассмотрение уравнения Максвелла, определяющие эволюцию электрического и магнитного поля под действием электрических зарядов и токов

$$\begin{aligned}\operatorname{div} \mathbf{E} &= 4\pi\rho, & \operatorname{div} \mathbf{B} &= 0 \\ \operatorname{rot} \mathbf{E} &= -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, & \operatorname{rot} \mathbf{B} &= \frac{4\pi}{c} \mathbf{j} + \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}\end{aligned}$$

самосогласованность

вывод уравнения выражения для диэлектрической проницаемости плазмы

(задача про плазму!)

объяснение отражения длинноволновых электромагнитных волн от ионосферы земли

(??!!)

(задача про плазму!)

8.5.2 метод теории ферми жидкости для плазмы

Обсудим известный из статистической физики метод ферми-жидкости с точки зрения применения к плазме.

(из Левитова Шитова, а также более подробно в дополнениях. нормально - в записи по статфизу)

8.5.3 Бесстолкновительная плазма

мотивация

тензор диэлектрической проницаемости бесстолкновительной плазмы

(задача 16)

закон дисперсии

(задача 16)

теория**8.5.4 (!) Самосогласованное поле**

(тут кст еще и Власова в конце мы получили)

мотивация**самосогласованное поле в двух словах**

(там получили уравнения)

Эти три пары уравнений оставляют связанную систему, определяющих одновременно как функции распределения f_e, f_i , так и поля \mathbf{E}, \mathbf{B} ; определяемые таким образом поля называют самосогласованными.

теория

Широкую область применения кинетической теории представляет плазма, под которой мы будем понимать полностью ионизованный газ).

Термодинамическая теория равновесного состояния плазмы рассмотрена в других томах этого курса (см. V, §78 – 80, IX, §85).

Во избежание непринципиальных усложнений мы будем (где это понадобится) считать плазму двухкомпонентной - содержащей лишь электроны (заряд $-e$) и положительные ионы одного сорта с зарядом ze .

Как и для обычных газов, условие применимости метода кинетического уравнения к плазме требует ее достаточной разреженности; газ должен лишь слабо отклоняться от идеальности.

Ввиду медленности убывания кулоновских сил, однако, это условие для плазмы более сильное, чем для газа из нейтральных частиц.

Не делая пока различия между частицами с различными зарядами, напомним условие слабой неидеальности плазмы в виде

$$T \gg e^2/\bar{r} \sim e^2 N^{1/3}$$

где T - температура плазмы, N - полное число частиц в единице объема, а $\bar{r} \sim N^{-1/3}$ - среднее расстояние между ними.

(норм размерность?)

Это условие выражает собой малость средней энергии взаимодействия двух ионов по сравнению с их средней кинетической энергией.

Выразим это условие еще и в другом виде, введя так называемый дебаевский радиус плазмы a , определенный согласно

$$a^{-2} = \frac{4\pi}{T} \sum_a N_a (z_a e)^2$$

где суммирование производится по всем родам ионов;

напомним (см. V, §78), что a определяет расстояние, на котором экранируется кулоновское поле заряда в плазме.

Введя $a \sim \left(\frac{T}{4\pi N e^2}\right)^{1/2}$ в (27.1), получим

$$e^2 N^{1/3} T \sim \frac{\bar{r}^2}{4\pi a^2} \ll 1$$

в разреженной плазме среднее расстояние между частицами должно быть мало по сравнению с дебаевским радиусом, т. е. «ионное облако» вокруг заряда должно действительно содержать много частиц.

Малое отношение (27.3) играет для плазмы роль «газового параметра».

Далее плазма будет предполагаться классической, т. е.

подразумевается выполненным лишь очень слабое условие - температура плазмы должна быть высока по сравнению с температурой вырождения ее электронной компоненты:

$$T \gg \hbar^2 N^{2/3} / m$$

где m - масса электрона (ср. V, §80).

Кинетическое уравнение для каждого сорта частиц в плазме (электронов и ионов) имеет вид

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \dot{\mathbf{p}} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = St f$$

где f - функция распределения данных частиц по координатам и импульсам, St - их интеграл столкновений (с частицами всех сортов).

При этом производная $\dot{\mathbf{p}}$ определяется силой, действующей на частицу.

Эта сила в свою очередь выражается через напряженности электрического и магнитного полей, создаваемых всеми остальными частицами в точке нахождения данной частицы.

Здесь возникает, однако, следующий вопрос.

В случае нейтральных частиц (атомов или молекул), благодаря быстрому убыванию сил взаимодействия, заметные изменения в их движении, интерпретируемые как столкновения, происходят лишь на малых прицельных расстояниях (порядка величины самих атомных размеров).

В промежутках же между такими столкновениями частицы движутся как свободные; именно поэтому в левой части кинетического уравнения для обычных газов полагается $\dot{\mathbf{p}} = 0$.

В плазме же, ввиду дальнегодействующего характера кулоновских сил, заметное изменение движения частиц происходит даже на больших прицельных расстояниях; экранирование кулоновских сил в плазме происходит лишь на расстояниях $\sim a$, которые согласно условию (27.3) велики даже по сравнению с межчастичными расстояниями (см. V, §78, а также задачу 1 к §31????).

Не все эти случаи, однако, должны интерпретироваться в кинетическом уравнении как столкновения.

В кинетической теории хаотические столкновения представляют собой тот механизм, который приводит к приближению к состоянию равновесия с соответствующим возрастанием энтропии системы. (?)

Между тем столкновения на больших ($\sim a$) прицельных расстояниях не могут служить таким релаксационным механизмом.

Дело в том, что взаимодействие двух заряженных частиц на таких расстояниях представляет собой в действительности коллективный эффект, в котором участвует большое число частиц.

Соответственно и то эффективное поле, которым можно описать это взаимодействие, создается большим числом частиц, т. е.

имеет макроскопический характер.

Тем самым весь процесс приобретает макроскопически достоверный, а не случайный характер;

такие процессы не могут приводить к возрастанию энтропии системы.

(??????? что??)

Они должны быть исключены поэтому из понятия столкновений, учитываемых в правой части кинетических уравнений.

Такому выделению отвечает представление точных микроскопических значений электрического (\mathbf{e}) и магнитного (\mathbf{h}) полей, действующих на некоторую частицу в плазме, в виде

$$\mathbf{e} = \mathbf{E} + \mathbf{e}', \quad \mathbf{h} = \mathbf{B} + \mathbf{h}'$$

где \mathbf{E} и \mathbf{B} - значения полей, усредненные по областям, содержащим много частиц, - областей с размерами, большими по сравнению с расстояниями между частицами (и в то же время малыми по сравнению с дебаевским радиусом).

Члены же \mathbf{e}' и \mathbf{h}' описывают тогда случайные флуктуации полей, которые и приводят к случайным изменениям движения частиц, т. е.

к столкновениям.

По своему точному смыслу \mathbf{E} и \mathbf{B} в (27.6) - средние значения полей в месте нахождения заданной частицы.

Но в силу предполагаемой разреженности плазмы можно пренебречь корреляцией между одновременными положениями частиц в ней.

Тогда точка нахождения каждой заданной частицы ничем не выделена, так что под \mathbf{E} и \mathbf{B} можно понимать просто поля, усредненные в обычном для макроскопической электродинамики смысле.

Эти поля и будут определять лоренцеву силу, которая должна быть подставлена в уравнение (27.

5) вместо $\dot{\mathbf{r}}$.

условия применения бесстолкновительной плазмы

В этой главе мы будем рассматривать явления, в которых несущественны столкновения между частицами плазмы;

в таких случаях говорят о бесстолкновительной плазме.

Точные условия возможности пренебрежения столкновениями зависят, вообще говоря, от конкретной постановки задачи.

Но обычно необходимое условие состоит в требовании малости эффективной частоты столкновений ν (величина, обратная среднему времени свободного пробега частицы) по сравнению с частотой ω изменения макроскопических полей \mathbf{E} и \mathbf{B} в данном процессе:

$$\nu \ll \omega.$$

В силу этого условия интеграл столкновений в кинетическом уравнении оказывается малым по сравнению с производной $\partial f / \partial t$.

Столкновениями можно пренебречь также и в случае, если средняя длина пробега частиц $l \sim \bar{v} / \nu$ велика по сравнению расстоянием L , на котором меняется поле («длина волны» поля).

Если обозначить $1/L \sim k$, то это условие запишется в виде

$$\nu \ll k\bar{v}.$$

При этом интеграл столкновений окажется малым по сравнению с членом $\mathbf{v} \nabla f$ в левой части кинетического уравнения.

После пренебрежения интегралом столкновений кинетические уравнения для функций распределения электронов (f_e) и ионов (f_i) принимают вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_e}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f_e}{\partial \mathbf{r}} - e \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} [\mathbf{v} \mathbf{B}] \right) \frac{\partial f_e}{\partial \mathbf{p}} &= 0 \\ \frac{\partial f_i}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f_i}{\partial \mathbf{r}} + ze \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} [\mathbf{v} \mathbf{B}] \right) \frac{\partial f_i}{\partial \mathbf{p}} &= 0 \end{aligned}$$

К этим уравнениям надо присоединить систему усредненных уравнений Максвелла:

$$\begin{aligned}\operatorname{rot} \mathbf{E} &= -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, & \operatorname{div} \mathbf{B} &= 0 \\ \operatorname{rot} \mathbf{B} &= \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}, & \operatorname{div} \mathbf{E} &= 4\pi\rho,\end{aligned}$$

где ρ и \mathbf{j} - средние плотность зарядов и плотность тока, выражающиеся через функции распределения очевидными формулами

$$\begin{aligned}\rho &= e \int (zf_i - f_e) d^3p \\ \mathbf{j} &= e \int (zf_i - f_e) \mathbf{v} d^3p\end{aligned}$$

Эти три пары уравнений оставляют связанную систему, определяющих одновременно как функции распределения f_e, f_i , так и поля \mathbf{E}, \mathbf{B} ; определяемые таким образом поля называют самосогласованными.

Самосогласованное поле было введено в кинетические уравнения А. А. Власовым (1937);

систему уравнений (27.9) – (27.11) называют уравнениями Власова.

(!!!!)

В соответствии со сказанным выше, эволюция функций распределения в бесстолкновительной плазме с самосогласованным полем не связана с увеличением энтропии и потому сама по себе не может привести к установлению статистического равновесия.

(????!)

Это очевидно и прямо из вида уравнений (27.9), в которых \mathbf{E} и \mathbf{B} выступают формально лишь как внешние поля, наложенные на плазму.

Каждое из кинетических уравнений (27. 9) имеет вид

$$\frac{df}{dt} = 0$$

где полная производная означает дифференцирование вдоль траектории частиц.

Общее решение такого уравнения есть произвольная функция от всех интегралов движения частицы в полях \mathbf{E} и \mathbf{B} .

связь с самосогласованным полем статистической физики

интересно, какая она?

с с.ф. еще ее пройти бы нужно...

8.5.5 (!!) Пространственная дисперсия в плазме

мотивация

теория

Перепишем уравнения (27.

10) в виде, более обычном для макроскопической электродинамики, введя в них наряду с напряженностью \mathbf{E} также и электрическую индукцию \mathbf{D} .

При этом мы определим вектор электрической поляризации \mathbf{P} соотношениями

$$\frac{\partial \mathbf{P}}{\partial t} = \mathbf{j}, \quad \operatorname{div} \mathbf{P} = -\rho$$

непротиворечивость этих двух формул обеспечивается уравнением непрерывности $\operatorname{div} \mathbf{j} = -\partial \rho / \partial t$ (мы вернемся еще к этому определению ниже в этом параграфе).

Тогда уравнения (27.

10) примут вид

$$\begin{aligned} \operatorname{rot} \mathbf{E} &= -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, & \operatorname{div} \mathbf{B} &= 0 \\ \operatorname{rot} \mathbf{B} &= \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}, & \operatorname{div} \mathbf{D} &= 0. \end{aligned}$$

В слабых полях связь индукции \mathbf{D} с напряженностью \mathbf{E} линейна.

Но уже в обычных средах эта связь не имеет мгновенного характера по времени:

значение $\mathbf{D}(t, \mathbf{r})$ в некоторый момент времени t зависит, вообще говоря, от значений $\mathbf{E}(t, \mathbf{r})$ не только в тот же, но и во все предшествующие моменты времени (см. VIII, §58).

В плазме к этому добавляется еще и нелокальность связи: значение $\mathbf{D}(t, \mathbf{r})$ в некоторой точке пространства \mathbf{r} зависит от значений $\mathbf{E}(t, \mathbf{r})$ не только в той же точке, но, вообще говоря, и во всем объеме плазмы.

Это свойство связано с тем, что «свободное» (т. е.

без столкновений) движение частиц в плазме определяется значениями поля на всей их траектории.

Наиболее общая линейная связь между функциями $\mathbf{D}(t, \mathbf{r})$ и $\mathbf{E}(t, \mathbf{r})$ может быть записана в виде

$$D_\alpha(t, \mathbf{r}) = E_\alpha(t, \mathbf{r}) + \int_{-\infty}^t \int K_{\alpha\beta}(t - t', \mathbf{r}, \mathbf{r}') E_\beta(t', \mathbf{r}') d^3x' dt'$$

Для пространственно-однородной плазмы ядро интегрального оператора $K_{\alpha\beta}$ зависит только от разности пространственных аргументов $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$.

Введя обозначения $\mathbf{r} - \mathbf{r}' = \boldsymbol{\rho}$, $t - t' = \tau$, перепишем эту связь в виде

$$D_\alpha(t, \mathbf{r}) = E_\alpha(t, \mathbf{r}) + \int_0^\infty \int K_{\alpha\beta}(\tau, \boldsymbol{\rho}) E_\beta(t - \tau, \mathbf{r} - \boldsymbol{\rho}) d^3\rho d\tau$$

Как обычно, путем разложения в ряд или интеграл Фурье можно представить поле в виде совокупности плоских волн, в которых \mathbf{E} и \mathbf{D} пропорциональны $e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)}$. Для таких волн связь $\mathbf{D}_c \mathbf{E}$ принимает вид

$$D_\alpha = \varepsilon_{\alpha\beta}(\omega, \mathbf{k}) E_\beta$$

где тензор диэлектрической проницаемости

$$\varepsilon_{\alpha\beta}(\omega, \mathbf{k}) = \delta_{\alpha\beta} + \int_0^\infty \int K_{\alpha\beta}(\tau, \boldsymbol{\rho}) e^{i(\omega\tau - \mathbf{k}\boldsymbol{\rho})} d^3\rho d\tau$$

Из этого определения непосредственно следует, что

$$\varepsilon_{\alpha\beta}(-\omega, -\mathbf{k}) = \varepsilon_{\alpha\beta}^*(\omega, \mathbf{k})$$

Таким образом, нелокальность связи между \mathbf{E} и \mathbf{D} приводит к тому, что диэлектрическая проницаемость плазмы оказывается функцией не только от частоты, но и от волнового вектора; об этой последней зависимости говорят как о пространственной дисперсии, подобно тому, как зависимость от частоты называют временной (или частотной) дисперсией.

Вернувшись к уравнениям (28.1), (28.2), напомним, что при формулировке уравнений Максвелла для переменных полей в обычных средах наряду с диэлектрической

поляризацией \mathbf{P} вводится также и намагниченность \mathbf{M} , причем средний микроскопический ток разлагается на две части $\partial\mathbf{P}/\partial t$ и $c \operatorname{rot} \mathbf{M}$; в плоской волне эти выражения сводятся к $-i\omega\mathbf{P}$ и $ic[\mathbf{kM}]$.

Но при наличии пространственной дисперсии, когда все величины все равно зависят от \mathbf{k} , такое разделение нецелесообразно.

Отметим также, что, если ток \mathbf{j} и плотность зарядов ρ целиком включены в определение поляризации \mathbf{P} (как это сделано в (28.

1)), последняя зависит, вообще говоря, как от электрического поля \mathbf{E} , так и от магнитного поля \mathbf{B} .

Но поле \mathbf{B} можно выразить через \mathbf{E} согласно первой паре уравнений Максвелла (28.

2), содержащей только эти две величины, т.

е.

(для плоской волны) согласно $[\mathbf{kE}] = \omega\mathbf{B}/c$, $\mathbf{kB} = 0$. Тогда и поляризация \mathbf{P} окажется выраженной только через \mathbf{E} , что и подразумевается в определении $\varepsilon_{\alpha\beta}$ согласно (28.3) – (28.5). Зависимость от волнового вектора вносит в функции $\varepsilon_{\alpha\beta}(\omega, \mathbf{k})$ выделенное направление – направление ее аргумента \mathbf{k} . Поэтому при наличии пространственной дисперсии диэлектрическая проницаемость является тензором даже в изотропной среде.

Общий вид такого тензора можно представить в форме

$$\varepsilon_{\alpha\beta}(\omega, \mathbf{k}) = \varepsilon_t(\omega, k) \left(\delta_{\alpha\beta} - \frac{k_\alpha k_\beta}{k^2} \right) + \varepsilon_l(\omega, k) \frac{k_\alpha k_\beta}{k^2}$$

При умножении на E_β первый член в (28.

7) дает в индукцию \mathbf{D} вклад, перпендикулярный волновому вектору, а второй член вклад, параллельный \mathbf{k} .

Для полей \mathbf{E} , перпендикулярных \mathbf{k} или направленных по \mathbf{k} , связь между \mathbf{D} и \mathbf{E} сводится соответственно к $D = \varepsilon_t \mathbf{E}$ или $\mathbf{D} = \varepsilon_l \mathbf{E}$. Скалярные функции ε_t и ε_l называют соответственно поперечной и продольной проницаемостями.

Они зависят от двух независимых переменных – частоты ω и абсолютной величины волнового вектора k . При $\mathbf{k} \rightarrow 0$ выделенное направление исчезает, и тогда тензор $\varepsilon_{\alpha\beta}$ должен сводиться к виду $\varepsilon(\omega)\delta_{\alpha\beta}$, где $\varepsilon(\omega)$ – обычная скалярная проницаемость, учитывающая лишь частотную дисперсию.

Соответственно предельные значения функций ε_t и ε_l одинаковы и равны

$$\varepsilon_t(\omega, 0) = \varepsilon_l(\omega, 0) = \varepsilon(\omega)$$

Согласно (28.

6) скалярные функции ε_l и ε_t обладают свойством

$$\varepsilon_l(-\omega, k) = \varepsilon_l^*(\omega, k), \quad \varepsilon_t(-\omega, k) = \varepsilon_t^*(\omega, k)$$

Пространственная дисперсия не влияет на свойства ε_l и ε_t как функций комплексной переменной ω .

Для этих функций остаются в силе все известные результаты (см.

VIII, §62), относящиеся к проницаемости $\varepsilon(\omega)$ обычных сред без пространственной дисперсии.

В этой главе мы будем рассматривать только изотропную плазму.

Подчеркнем, что это предполагает не только отсутствие внешнего магнитного поля, но и изотропию функции распределения частиц по импульсам (в невозмущенной полем плазме).

В противном случае появляются новые выделенные направления и тензорная структура $\varepsilon_{\alpha\beta}$ усложняется.

Уже было указано, что происхождение пространственной дисперсии в плазме связано с зависимостью «свободного» движения частиц от значений поля вдоль их траектории.

Фактически, конечно, существенное влияние на движение частицы в каждой точке ее траектории оказывают значения поля не на всей траектории, а лишь на некоторых ее отрезках не слишком большой длины.

Порядок величины этих длин может определяться двумя механизмами: столкновениями, нарушающими свободное движение по траектории, или усреднением осциллирующего поля за время пролета частицы по траектории.

Для первого механизма характерным расстоянием является длина свободного пробега частицы $l \sim \bar{v}/\nu$, а для второго - расстояние \bar{v}/ω , на которое частица, двигаясь со средней скоростью \bar{v} , перемещается за время одного периода поля.

В выражении (28).

3) дальности корреляции между значениями **D** и **E** в различных точках пространства соответствуют расстояния $r_{\text{кор}}$, на которых существенно убывает функция $K_{\alpha\beta}(\tau, \rho)$. Можно утверждать, следовательно, что порядок величины этих расстояний дается меньшей из двух величин, l или \bar{v}/ω (причем надо брать ее для тех частиц - электронов или ионов, для которых она имеет большее значение).

Если $\nu \ll \omega$, то меньшей является величина \bar{v}/ω и тогда

$$r_{\text{кор}} \sim \bar{v}/\omega.$$

Пространственная дисперсия значительна при $kr_{\text{кор}} \gtrsim 1$ и исчезает при $kr_{\text{кор}} \ll 1$; в последнем случае в (28).

5) можно заменить $e^{-i\mathbf{k}\rho} \approx 1$ и интеграл перестает зависеть от $\mathbf{k} \cdot \mathbf{C}r_{\text{кор}}$ из (28).

10) мы находим, следовательно, что пространственная дисперсия существенна для волн, фазовая скорость которых (ω/k) сравнима или меньше средней скорости частиц в плазме.

В обратном предельном случае при

$$\omega \gg k\bar{v}$$

пространственная дисперсия несущественна.

Важно, что значения $r_{\text{кор}}$ в Плазме могут быть велики. По сравнению со средними расстояниями между частицами ($\sim N^{-1/3}$). Именно это условие делает возможным макроскопическое описание пространственной дисперсии в терминах диэлектрической проницаемости даже тогда, когда дисперсия значительна.

Напомним (см.

VIII, §83), что в обычных средах роль длины корреляции играют атомные размеры и потому уже условие применимости макроскопической теории требует соблюдения неравенства $kr_{\text{кор}} \ll 1$ (длина волны должна быть велика по сравнению с атомными размерами); именно поэтому в таких средах пространственная дисперсия (проявляющаяся, например, в так называемой естественной оптической активности) всегда оказывается лишь малой поправкой.

поиск закона дисперсии продольных волн

(?????!!! см задачу про плазмы)

8.5.6 (+)16 Бесстолкновительная плазма

мотивация

проработаю ее подробно, потому что она в задании.

8.5.7 диэлектрическая проницаемость и восприимчивость плазмы

(!!) теория ландау

потом ее приведу, пока нет времени на нее.

итоговые свойства плазмы

????

диэлектрическая проницаемость имеет вид:

$$\varepsilon_{\alpha\beta} = \varepsilon_l \frac{k_\alpha k_\beta}{k^2} + \varepsilon_t \left(\delta_{\alpha\beta} - \frac{k_\alpha k_\beta}{k^2} \right)$$

(?)

бывает вырожденная и невырожденная плазма.

это определяется тем, больше температура, чем энергия ферми, или меньше.

(это потом подумаю)

вывод в двух словах

????

задача 16 дз, Бурмистров 25

Найти пространственно-частотную дисперсию диэлектрической проницаемости $\varepsilon_{\alpha\beta}(\omega, k)$ в бесстолкновительной изотропной плазме, когда столкновения между частицами плазмы не играют существенной роли.

В первом приближении полностью пренебречь движением положительных ионов благодаря сильному неравенству в соотношении между массами иона и электрона $M \gg m$.

подготовка параметров и обсуждение границ применимости

Пусть $n(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ - функция распределения частиц, и $dN = n(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) d^3r d\Gamma_p$ - число частиц, координаты и импульсы которых в момент времени t лежат в интервалах $\mathbf{r} \div \mathbf{r} + d\mathbf{r}$ и $\mathbf{p} \div \mathbf{p} + d\mathbf{p}$.

С учетом двух проекций спина $d\Gamma_p = 2d^3p/(2\pi\hbar)^3$.

Запишем кинетическое уравнение

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial n}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{F} \frac{\partial n}{\partial \mathbf{p}} = \text{St}[n]$$

Здесь \mathbf{v} - скорость частицы и $\mathbf{F} = q(\mathbf{E} + [\mathbf{v} \times \mathbf{B}]/c)$ - сила Лоренца, действующая на частицу с зарядом q .

Рассматривая плазму как бесстолкновительную, мы должны пренебречь столкновительным членом $\text{St}[n]$, который при малых отклонениях $\delta n = n - n_0$ от равновесной функции распределения $n_0(\mathbf{p})$, примерно равен $\delta n/\tau$, где τ - характерное время столкновений.

Возможность такого приближения возникает, если

$$\frac{\partial \delta n}{\partial t} \sim \omega \delta n \gg \frac{\delta n}{\tau} \quad \text{или} \quad v \frac{\partial \delta n}{\partial r} \sim v \frac{\delta n}{L} \gg \frac{\delta n}{\tau}.$$

Здесь ω - характерная частота и L - характерная длина, на которых во времени и в пространстве меняются электрическое \mathbf{E} и магнитное \mathbf{B} поля.

Таким образом, необходимо реализовать высокочастотную ситуацию $\omega \tau \gg 1$ или большую длину пробега частиц плазмы $l = v \tau \gg L$.

основные уравнения для Плазмы

Итак, в бесстолкновительной плазме мы имеем следующие кинетические уравнения для функции распределения электронов с зарядом $(-e)$ и функции распределения ионов с зарядом Ze

$$\begin{aligned} \frac{\partial n}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial n}{\partial \mathbf{r}} - e \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} [\mathbf{v} \times \mathbf{B}] \right) \frac{\partial n}{\partial \mathbf{p}} &= 0 \\ \frac{\partial n_i}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial n_i}{\partial \mathbf{r}} + Ze \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} [\mathbf{v} \times \mathbf{B}] \right) \frac{\partial n_i}{\partial \mathbf{p}} &= 0 \end{aligned}$$

Плотность заряда $\rho(\mathbf{r}, t)$ и плотность тока $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$ выразим через функции распределения

$$\begin{aligned} \rho &= e \int (Zn_i - n) d\Gamma_p \\ \mathbf{j} &= e \int \mathbf{v} (Zn_i - n) d\Gamma_p \end{aligned}$$

Чтобы получить замкнутую систему уравнений, мы должны включить в рассмотрение уравнения Максвелла, определяющие эволюцию электрического и магнитного поля под действием электрических зарядов и токов

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \mathbf{E} &= 4\pi \rho, \quad \operatorname{div} \mathbf{B} = 0 \\ \operatorname{rot} \mathbf{E} &= -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \quad \operatorname{rot} \mathbf{B} = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j} + \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \end{aligned}$$

Все вместе уравнения выше составляют самосогласованную замкнутую систему уравнений Власова для определения функций распределения и полей \mathbf{E} и \mathbf{B} .

малые отклонения от равновесного состояния

Так как в нашем приближении мы исключили движение ионов, то ионная функция распределения остается равновесной $n_i = n_{i0}$.

Электронную функцию представим в виде $n = n_0 + \delta n$.

В силу электронейтральности и отсутствия электрических токов в равновесии имеем

$$\begin{aligned} e \int (Zn_{i0} - n_0) d^3p &= 0, \\ e \int \mathbf{v} (Zn_{i0} - n_0) d^3p &= 0. \end{aligned}$$

Тогда

$$\rho = -e \int \delta n d\Gamma_p \quad \text{и} \quad \mathbf{j} = -e \int \mathbf{v} \delta n d\Gamma_p$$

Рассмотрим малые отклонения от равновесия $\mathbf{E}_0 = \mathbf{B}_0 = 0$.

В линейном приближении по всем отклонениям от равновесных значений мы найдем

$$\frac{\partial \delta n}{\partial t} + v \frac{\partial \delta n}{\partial r} - e \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} [\mathbf{v} \times \mathbf{B}] \right) \frac{\partial n_0}{\partial p} = 0$$

Поскольку $\partial n_0(\varepsilon_p)/\partial p = v \partial n_0/\partial \varepsilon$, то член с магнитным полем полностью выпадает и тогда

$$\frac{\partial \delta n}{\partial t} + v \frac{\partial \delta n}{\partial r} = e(v\mathbf{E}) \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon}$$

Если электрическое поле содержит одну гармонику:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_{\mathbf{k}, \omega} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r} - i\omega t),$$

то в силу линейности уравнения и $\delta n(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = \delta n_{\mathbf{k}, \omega}(\mathbf{p}) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r} - i\omega t)$, мы получим

$$(\omega - kv)\delta n_{\mathbf{k}, \omega}(\mathbf{p}) = ie(v\mathbf{E}_{\mathbf{k}, \omega}) \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon}$$

При решении этого уравнения происходит деление на нуль и возникает особая точка в виде простого полюса.

формула Сохоцкого в помощь

В этой связи сделаем следующее отступление.

Уравнение

$$xy(x) = 1,$$

вообще говоря, имеет целый ряд решений в силу тождества $x\delta(x) = 0$

$$y(x) = \mathcal{P} \frac{1}{x} + b\delta(x)$$

где $\mathcal{P}(1/x)$ - главное значение интеграла от $1/x$ и b - произвольное число.

Соответственно, уравнение на $\delta n_{\mathbf{k}, \omega}$ также имеет не единственное решение.

Для выбора решения, имеющего физический смысл, обратим внимание, что возмущение функции распределения $\delta n_{\mathbf{k}, \omega}$ электрическим полем $\mathbf{E}_{\mathbf{k}, \omega}$ представляет собой запаздывающий отклик на внешнее воздействие.

Тогда, согласно физическим принципам, отклик $\delta n_{\mathbf{k}, \omega}$ должен быть аналитической функцией частоты в верхней полуплоскости комплексной переменной ω и, следовательно, полюсная особенность $\delta n_{\mathbf{k}, \omega}$ может находиться только в нижней полуплоскости комплексной переменной ω .

Этому условию удовлетворяет решение

$$\delta n_{\mathbf{k}, \omega}(p) = \frac{ie(vE_{\mathbf{k}, \omega})}{\omega - kv + i\delta} \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} = ie(vE_{\mathbf{k}, \omega}) \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} \left(\mathcal{P} \frac{1}{\omega - kv} - i\pi\delta(\omega - kv) \right)$$

с полюсом в точке $\omega = kv - i\delta$ в нижней полуплоскости комплексной переменной ω .

Последнее равенство соответствует формуле Сохоцкого

$$\frac{1}{x + i\delta} = \mathcal{P} \frac{1}{x} - i\pi\delta(x)$$

Поляризация

Поляризация для плазмы имеет вид:

$$P_\alpha = \frac{e^2}{\omega} E_\beta \int \frac{v_\alpha v_\beta}{\omega - kv + i\delta} \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} d\Gamma_p$$

Поляризацию электронной компоненты $\mathbf{P}_{\mathbf{k},\omega}$ проще найти с помощью соотношения между током и поляризацией

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \partial \mathbf{P}(\mathbf{r}, t) / \partial t$$

или для фурье-компонент $\mathbf{j}_{\mathbf{k},\omega} = -i\omega \mathbf{P}_{\mathbf{k},\omega}$.

Таким образом, подставляя ток,

$$\omega \mathbf{P}_{\mathbf{k},\omega} = e^2 \int \mathbf{v} (\mathbf{v} \mathbf{E}_{\mathbf{k},\omega}) \frac{\partial n_0 / \partial \varepsilon}{\omega - \mathbf{k} \mathbf{v} + i\delta} d\Gamma_p$$

Или в компонентах:

$$P_\alpha = \frac{e^2}{\omega} E_\beta \int \frac{v_\alpha v_\beta}{\omega - kv + i\delta} \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} d\Gamma_p$$

Восприимчивость и диэлектрическая проницаемость

Восприимчивость $\chi_{\alpha\beta}(\omega, k)$ имеет вид:

$$\frac{e^2}{\omega} \int \frac{v_\alpha v_\beta}{\omega - kv + i\delta} \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} d\Gamma_p$$

который легко найти из соотношения

$$P_\alpha \equiv \chi_{\alpha\beta} E_\beta$$

Диэлектрическая проницаемость $\varepsilon_{\alpha\beta}$ имеет вид:

$$\varepsilon_{\alpha\beta}(\omega, k) = \left(1 + \frac{4\pi e^2}{\omega^2} \int d\Gamma_p s v^2 A(s) \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} \right) \delta_{\alpha\beta} + \left(\frac{4\pi e^2}{\omega^2} \int d\Gamma_p s v^2 B(s) \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} \right) \frac{k_\alpha k_\beta}{k^2}$$

Она находится с помощью восприимчивости:

$$\varepsilon_{\alpha\beta}(\omega, k) = \delta_{\alpha\beta} + 4\pi \chi_{\alpha\beta}(\omega, k) = \delta_{\alpha\beta} + \frac{4\pi e^2}{\omega} \int \frac{v_\alpha v_\beta}{\omega - kv + i\delta} \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} d\Gamma_p,$$

а также преобразования интеграла.

Вычисление интеграла удобно провести с помощью следующего приема.

Введем единичные векторы \mathbf{l} и \mathbf{e} вдоль вектора скорости \mathbf{v} и волнового вектора \mathbf{k} , т.е. $\mathbf{v} = v\mathbf{l}$ и $\mathbf{k} = k\mathbf{e}$.

Тогда имеем

$$\varepsilon_{\alpha\beta}(\omega, \mathbf{k}) = \delta_{\alpha\beta} + \frac{4\pi e^2}{\omega^2} \int d\Gamma_p s v^2 \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} \int \frac{d\Omega_p}{4\pi} \frac{l_\alpha l_\beta}{s - \mathbf{l} \mathbf{e} + i\delta},$$

где $s = \frac{\omega}{vk}$.

Интеграл можно записать как

$$\int \frac{d\Omega_p}{4\pi} \frac{l_\alpha l_\beta}{s - \mathbf{l} \mathbf{e} + i\delta} = A(s) \delta_{\alpha\beta} + B(s) e_\alpha e_\beta.$$

Действительно, ведь интегрирование по пространственному углу вектора \mathbf{p} приведет к некоторому тензору второго ранга, который зависит от двух индексов α и β , но всего имеется только два независимых тензора второго ранга: $\delta_{\alpha\beta}$ и $e_\alpha e_\beta$.

(тут пока не проверял, но суть понятна)

Осталось найти скалярные функции $A(s)$ и $B(s)$. Для этого вычислим интеграл два раза. Один раз для компонент $\alpha = \beta = z$ и второй раз для свертки.

Выберем ось z вдоль вектора \mathbf{e} . Тогда мы найдем

$$\begin{aligned} A \cdot 1 + B &= \int \frac{d\Omega}{4\pi} \frac{l_2^2}{s - le + i\delta} = \frac{1}{2} \int_0^\pi \sin \vartheta d\vartheta \frac{\cos^2 \vartheta}{s - \cos \vartheta + i\delta} = -sW(s) \\ 3A + B &= \int \frac{d\Omega}{4\pi} \frac{l_\alpha^2}{s - le + i\delta} = \frac{1}{2} \int_0^\pi \sin \vartheta d\vartheta \frac{1}{s - \cos \vartheta + i\delta} = \frac{1 - W(s)}{s} \end{aligned}$$

где функция $W(s)$ равна

$$W(s) = 1 - \frac{s}{2} \ln \frac{s+1}{s-1+i\delta}$$

Система из двух уравнений на $A(s)$ и $B(s)$ легко решается

$$\begin{aligned} A(s) &= \frac{1 - W(s) + s^2 W(s)}{2s} = \frac{s}{2} \left(1 + \frac{1 - s^2}{2s} \ln \frac{s+1}{s-1+i\delta} \right) \\ B(s) &= \frac{-1 + W(s) - 3s^2 W(s)}{2s} = -\frac{s}{2} \left(3 + \frac{1 - 3s^2}{2s} \ln \frac{s+1}{s-1+i\delta} \right) \end{aligned}$$

В результате находим диэлектрическую проницаемость $\varepsilon_{\alpha\beta}$

$$\varepsilon_{\alpha\beta}(\omega, k) = \left(1 + \frac{4\pi e^2}{\omega^2} \int d\Gamma_p s v^2 A(s) \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} \right) \delta_{\alpha\beta} + \left(\frac{4\pi e^2}{\omega^2} \int d\Gamma_p s v^2 B(s) \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} \right) \frac{k_\alpha k_\beta}{k^2}$$

появление затухания Ландау

При $s > 1$ или $v < \omega/k$ функция $W(s)$ действительная.

При $s < 1$ или $v > \omega/k$ функция $W(s)$ содержит мнимую часть $\text{Im } W = \pi s/2$.

Эта особенность, которая возникает при скорости частицы v , превышающей фазовую скорость ω/k , приводит к мнимой составляющей в диэлектрической проницаемости и специфическому затуханию в плазме затуханию Ландау.

(?? ну то есть у нас ничего не затухало, а когда мы начали увеличивать частоту, так что она превысила скорость электронов, то внезапно волны стали затухать?)

выделение продольной и поперечной компоненты

Разделим диэлектрическую проницаемость $\varepsilon_{\alpha\beta}$ на продольную и поперечную компоненты:

$$\varepsilon_{\alpha\beta} = \varepsilon_l \frac{k_\alpha k_\beta}{k^2} + \varepsilon_t \left(\delta_{\alpha\beta} - \frac{k_\alpha k_\beta}{k^2} \right)$$

Смысл такого представления следующий. Если электрическое поле $\mathbf{E}_l = E\mathbf{k}/k$ - продольное, т.е. направлено вдоль вектора \mathbf{k} , то вектор электрической индукции \mathbf{D} также направлен вдоль \mathbf{E}_l и определяется продольной компонентой диэлектрической проницаемости

$$\mathbf{D} = \varepsilon_l \mathbf{E}_l$$

Для поперечного электрического поля $\mathbf{kE}_t = 0$.

Тогда легко проверить, что вектор электрической индукции \mathbf{D} полностью определяется только поперечной компонентой диэлектрической проницаемости

$$\mathbf{D} = \varepsilon_t \mathbf{E}_t$$

Для продольной ε_l компоненты диэлектрической проницаемости находим окончательно:

$$\begin{aligned} \varepsilon_l &= 1 + \frac{4\pi e^2}{k^2} \int d\Gamma_p \frac{A(s) + B(s)}{s} \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} = \\ &= 1 - \frac{4\pi e^2}{k^2} \int \left(1 - \frac{s}{2} \ln \frac{s+1}{s-1+i\delta} \right) \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} \nu(\varepsilon) d\varepsilon; \end{aligned}$$

Аналогично для поперечной ε_t

$$\begin{aligned} \varepsilon_t &= 1 + \frac{4\pi e^2}{k^2} \int d\Gamma_p \frac{A(s)}{s} \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} = \\ &= 1 + \frac{2\pi e^2}{k^2} \int \left(1 + \frac{1-s^2}{2s} \ln \frac{s+1}{s-1+i\delta} \right) \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} \nu(\varepsilon) d\varepsilon. \end{aligned}$$

Здесь $\nu(\varepsilon)$ - плотность состояний, т.е. $d\Gamma_p = \nu(\varepsilon) d\varepsilon$, скорость электронов $v = v(\varepsilon)$ и параметр s равен $s = \omega/vk$.

8.5.8 плазма в графене

часть задачи 16 дз, также задача 28 бурмистров

Интересно посмотреть, как наша теория применяется в графене.

По сути для этого следует просто подставить свойства графена в формулы выше. (?)

актуальные статистические свойства графена

Вспомним необходимые свойства, чтобы использовать их далее.

В графене, то есть в монослое графита, зависимость энергии электронов от импульса $\mathbf{p} = (p_x, p_y)$ описывается безмассовым дираковским спектром

$$\varepsilon_p = v\sigma \cdot \mathbf{p},$$

где v - скорость электронов и $\sigma = (\sigma_x, \sigma_y)$ - матрицы Паули, и соответственно электронный спектр равен $\varepsilon_p = \pm v|\mathbf{p}|$.

Плотность состояний $g(\varepsilon)$ определяется интегралом

$$g(\varepsilon) = \nu \int \frac{d^2 p}{(2\pi\hbar)^2} [\delta(\varepsilon - vp) + \delta(\varepsilon + vp)] = \nu \frac{|\varepsilon|}{2\pi\hbar^2 v^2}$$

где $\nu = 2 \times 2$ - кратность вырождения спектра по спину электрона и двум подзонам.

продольная диэлектрическая проницаемость плазменных колебаний в графене (??)

Найдем продольную диэлектрическую проницаемость $\varepsilon_l(\omega, k)$ продольных плазменных колебаний (плазмонов) в графене.

Нам известно выражение для продольной диэлектрической проницаемости двумерного слоя электронов

$$\varepsilon_l(\omega, k) = 1 + \frac{2\pi e^2}{k} \int \frac{\partial n_0(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} A(s) \frac{\nu d^2 p}{(2\pi\hbar)^2}$$

где $n_0(\varepsilon) = 1/(1 + e^{(\varepsilon - \mu)/T})$ - функция распределения Ферми, $\nu = 2 \times 2$, а функцию $A(s)$, равную

$$A(s) = \begin{cases} -1 + s/\sqrt{s^2 - 1}, & s > 1, \\ -1 - is/\sqrt{1 - s^2}, & s < 1, \end{cases}$$

можно вынести из под знака интеграла, так как ее аргумент $s = \omega/vk$ не зависит от импульса p .

В результате после перехода от интегрирования по импульсу к интегрированию по энергии с введением плотности состояний $g(\varepsilon)$, получим для диэлектрической проницаемости

$$\begin{aligned} \varepsilon_l(\omega, k) &= 1 + \frac{2\pi e^2}{k} A\left(\frac{\omega}{vk}\right) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial n_0(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} g(\varepsilon) d\varepsilon = \\ &= 1 - \frac{2\pi e^2}{k} A\left(\frac{\omega}{vk}\right) \frac{\nu}{2\pi \hbar^2 v^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon}{4T} \frac{|\varepsilon|}{\text{ch}^2 \frac{\varepsilon - \mu}{2T}} = \\ &= 1 - \frac{4e^2 T}{\hbar^2 v^2 k} A\left(\frac{\omega}{vk}\right) \ln\left(2 \text{ch} \frac{\mu}{2T}\right) \end{aligned}$$

где учтено было известное значение плотности состояний: $g(\varepsilon) = \nu \frac{|\varepsilon|}{2\pi \hbar^2 v^2}$

дисперсия плазменных колебаний в графене

Дисперсию плазмонов находим из уравнения $\varepsilon_l(\omega, k) = 0$, решение которого несложно:

$$\omega^2 = \frac{\kappa k}{1 + v^2 k/4\kappa} + v^2 k^2,$$

где $\kappa = \frac{2e^2 T}{\hbar^2} \ln\left(2 \text{ch} \frac{\mu}{T}\right)$.

длинноволновая область

В наиболее интересной длинноволновой области $k \ll \kappa/v^2$ плазменные колебания (плазмоны) имеют ту же корневую зависимость от волнового вектора

$$\omega(k) = \sqrt{\kappa k}$$

как и для обычных двумерных систем, но с температурной зависимостью κ при $\mu \lesssim T$.
и что с ней?

8.5.9 спектр и затухание

(см Бурмистров задача 26 про плазму. до этого еще какая-то важная теория должна быть)

(кст, еще есть Левитов Шитов задача 44, там ферми жидкость и поляризационный оператор, но это в другом уже месте)

(кстати, в дз это вроде не нужно)

анализ продольной компоненты

Начнем с анализа продольной компоненты диэлектрической восприимчивости $\varepsilon_l(\omega, \mathbf{k})$.

В области высоких $\omega \gg vk$ частот мы можем разложить подынтегральное выражение по $1/s \ll 1$ и найти приближенно

$$\varepsilon_l(\omega \gg vk) = 1 + \frac{4\pi e^2}{\omega^2} \int_0^\infty \left(\frac{1}{3s^2} + \frac{1}{5s^4} + \dots \right) \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} \nu(\varepsilon) d\varepsilon = \quad (8.3)$$

$$= 1 + \frac{4\pi e^2}{3\omega^2} \int_0^\infty v^2 \left(1 + \frac{3}{5} \frac{k^2 v^2}{\omega^2} + \dots \right) \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} \nu(\varepsilon) d\varepsilon \quad (8.4)$$

Для дальнейших преобразований мы воспользуемся следующим соотношением

$$\int \varepsilon^r \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} d\Gamma_p = \int_0^\infty \varepsilon^r \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} \nu(\varepsilon) d\varepsilon = - \left(r + \frac{1}{2} \right) \int_0^\infty \varepsilon^{r-1} n_0(\varepsilon) d\Gamma_p =$$

где $r > -1/2$, которое получается за счет интегрирования по частям и учета того, что для спектра $\varepsilon = mv^2/2$ плотность состояний $\nu(\varepsilon) \sim \varepsilon^{1/2}$.

(? у меня почти получилось доказать это)

Заменим в выражении $\varepsilon_l(\omega \gg vk)$ скорость v на ε , домножив и разделив на $m/2$, и запишем выражение через так называемую плазменную частоту $\Omega^2 = \frac{4\pi n e^2}{m}$:

$$\varepsilon_l(\omega \gg vk) \approx 1 - \frac{\Omega^2}{\omega^2} \left(1 + \frac{k^2 \langle v^2 \rangle}{\omega^2} \right);$$

Здесь в плазменной частоте плотность электронов n введена как обычно $n = \int d\Gamma_p n_0(\varepsilon)$, а угловые скобки обозначают здесь и ниже следующее усреднение с функцией распределения n_0 :

$$\langle (\dots) \rangle = \frac{\int d\Gamma_p (\dots) n_0(\varepsilon)}{\int d\Gamma_p n_0(\varepsilon)}.$$

мнимая часть продольной компоненты диэлектрической проницаемости

(? тут я не знаю, откуда формула ниже, ну и ладно)

Вычисление мнимой части продольной компоненты диэлектрической проницаемости удастся провести в аналитическом виде

$$\text{Im } \varepsilon_l = -\pi \frac{4\pi e^2}{k^2} \int_{v>\omega/k} \frac{\omega}{2vk} \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} d\Gamma_p = \omega \frac{\Omega^2}{k^2} \frac{m^3}{nk} \frac{n_0(m\omega^2/2k^2)}{2\pi\hbar^3}$$

(??)

наверное, это значит, что затухание именно такой содержит множитель.
или еще где-то это нужно.

область низких частот

Для области низких ($\omega \ll vk$) частот, используя разложение подынтегрального выражения при $s \ll 1$, получим

$$\varepsilon_l(\omega \ll vk) \approx 1 - \frac{4\pi e^2}{k^2} \int d\Gamma_p \left(1 + i \frac{\pi s}{2} \right) \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} = 1 + \frac{\Omega^2}{k^2} \left\langle \frac{1}{v^2} \right\rangle + i\omega \frac{\Omega^2}{k^2} \frac{m^3}{nk} \frac{n_{0(\varepsilon=0)}}{2\pi\hbar^3}$$

дебаевское экранирование

(? суть не оч понял)

Суть его в том, что потенциал поля спадает по экспоненциальному закону, с показателем равным обратному так называемому радиусу Дебая.

Действительно.

Экранирование электрического заряда в плазме определяется статической диэлектрической проницаемостью, равной

$$\varepsilon_l(0, k) = 1 + \frac{1}{k^2 r_D^2},$$

где введен дебаевский радиус $r_D^{-2} = \Omega^2 \langle \frac{1}{v^2} \rangle$.

Действительно, фурье-компонента потенциала φ_k для точечного заряда величиной q равна

$$\varphi_k = \frac{4\pi q}{k^2 \varepsilon(0, k)} = \frac{4\pi q}{k^2 + r_D^{-2}}$$

Соответствующее пространственное поведение потенциала отвечает дебаевскому экранированию

$$\varphi(r) = \frac{q}{r} e^{-r/r_D}$$

Простое вычисление дает

$$r_D^2 = \begin{cases} \frac{T}{4\pi n e^2}, & T \gg \varepsilon_F \quad (\text{невыврожденная плазма}) \\ \frac{\varepsilon_F}{6\pi n e^2} = \frac{1}{4\pi e^2 \nu(\varepsilon_F)}, & T \ll \varepsilon_F \quad (\text{вырожденная плазма}), \end{cases}$$

где ε_F - энергия Ферми и T - температура.

условия существования продольных колебаний

Рассмотрим возможность существования продольных колебаний в плазме.

Если электрическое поле $\mathbf{E}_l(\mathbf{r}, t) \sim \mathbf{E}_l \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r} - i\omega t)$ - продольное, т.е. $\mathbf{E}_l = E\mathbf{k}/k$, то имеем $\text{rot } \mathbf{E}_l = i[\mathbf{k} \times \mathbf{E}_l] = 0$ и, следовательно, $\partial \mathbf{B}/\partial t = -i\omega \mathbf{B} = 0$.

Значит, магнитное поле отсутствует $\mathbf{B} = 0$, а значит $\text{rot } \mathbf{B} = 0$ дает $\partial \mathbf{D}/\partial t = -i\omega \mathbf{D} = 0$, т.е. $\mathbf{D} = 0$.

С другой стороны, для продольного поля вектор электрической индукции равен

$$\mathbf{D} = \varepsilon_l(\omega, \mathbf{k}) \mathbf{E}_l = 0.$$

Получаем условие нетривиальных решений:

$$\varepsilon_l(\omega, k) = 0$$

которое определяет дисперсию продольных плазменных колебаний.

спектр плазмонов квадратичный

Подставляя в это уравнение продольную диэлектрическую проницаемость, найденную выше, имеем

$$1 - \frac{\Omega^2}{\omega^2} \left(1 + \frac{k^2 \langle v^2 \rangle}{\omega^2} \right) = 0 \quad \text{или} \quad \omega^2 \approx \Omega^2 + k^2 \langle v^2 \rangle \quad \text{и} \quad \omega \approx \Omega + \frac{k^2 \langle v^2 \rangle}{2}$$

Второе слагаемое, зависящее от волнового вектора k , мало по сравнению с плазменной частотой Ω . Таким образом, в плазме существуют слабодисперсионные продольные плазменные (ленгмюровские) волны или плазмоны.

условие существования поперечных колебаний

оно имеет вид:

$$k^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon_t(\omega, k)$$

действительно.

Поперечные колебания электрического поля $\mathbf{E}_t(\mathbf{r}, t) \sim \mathbf{E}_t \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r} - i\omega t)$ подразумевают равенство $k\mathbf{E}_t = 0$. Так как $\mathbf{D}_t = \varepsilon_t \mathbf{E}_t$, то и для вектора индукции также будет $k\mathbf{D}_t = 0$.

Согласно уравнениям Максвелла для фурье-компонент электрического и магнитного полей мы найдем

$$\begin{cases} \operatorname{rot} \mathbf{E}_t = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, & \operatorname{div} \mathbf{B} = 0, \\ \operatorname{rot} \mathbf{B} = \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{D}_t}{\partial t}, & \operatorname{div} \mathbf{D}_t = 0, \end{cases} \implies \begin{cases} \mathbf{k} \times \mathbf{E}_t = \frac{\omega}{c} \mathbf{B}, & \mathbf{k} \mathbf{B} = 0 \\ \mathbf{k} \times \mathbf{B} = -\frac{\omega}{c} \mathbf{D}_t, & \mathbf{k} \mathbf{D}_t = 0. \end{cases}$$

Отсюда, исключая магнитное поле \mathbf{B} , получим

$$\mathbf{k} \times [\mathbf{k} \times \mathbf{E}_t] = \mathbf{k} (k E_t) - k^2 \mathbf{E}_t = \frac{\omega}{c} [\mathbf{k} \times \mathbf{B}] = -\frac{\omega^2}{c^2} \mathbf{D}_t = -\frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon_t \mathbf{E}_t$$

Чтобы существовало нетривиальное решение $\mathbf{E}_t \neq 0$, необходимо удовлетворить следующее дисперсионное уравнение

$$k^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon_t(\omega, k)$$

спектр высокочастотных поперечных высокочастотных колебаний

Оказывается, они имеют такую же зависимость, как и в вакууме.

Для высокочастотных ($\omega \gg vk$) поперечных колебаний учет пространственной дисперсии в диэлектрической проницаемости ε_t не существен в силу $v \ll c$ и можно положить $\varepsilon_t(\omega, k) \approx \varepsilon_t(\omega, 0) = 1 - \Omega^2/\omega^2$.

Это дает

$$\omega^2 = \Omega^2 + c^2 k^2$$

При $\omega \gg \Omega$ влияние плазмы не сказывается и $\omega = ck$ как в вакууме. Частоты $\omega < \Omega$ отвечают мнимым значениям волнового вектора k .

Физически это означает, колебания с такими частотами затухают и не могут распространяться вглубь плазмы.

мнимая часть поперечной компоненты диэлектрической проницаемости

В заключение выпишем мнимую часть поперечной компоненты диэлектрической проницаемости

$$\operatorname{Im} \varepsilon_t = -\pi \frac{e^2}{k^2} \int_{v > \omega/k} \frac{v^2 k^2 - \omega^2}{2\omega v k} \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} d\Gamma_p = \frac{\pi \Omega^2}{2\omega k} \left\langle \frac{1}{v} \right\rangle \frac{m\omega^2/2k^2}{\int_0^\infty n_0(\varepsilon) d\varepsilon}.$$

В области низких ($\omega \ll vk$) частот действительная часть поперечной компоненты диэлектрической проницаемости ε_t приближенно равна

$$\operatorname{Re} \varepsilon_t(\omega \ll vk) \approx 1 - \frac{1}{k^2 r_D^2}$$

Основной вклад в поперечную компоненту диэлектрической проницаемости ε_t связан с ее мнимой частью, которую можно оценить как

$$\operatorname{Im} \varepsilon_t(\omega \ll vk) \approx \frac{\pi \Omega^2}{2\omega k} \left\langle \frac{1}{v} \right\rangle \sim \frac{\Omega}{\omega k r_D}$$

Подстановка приближенного значения ε_t в дисперсионное уравнение дает

$$k^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \left(i \frac{\pi \Omega^2}{2\omega k} \left\langle \frac{1}{v} \right\rangle \right)$$

Отсюда находим закон для дисперсии длинноволновых ($kr_D \ll 1$) поперечных колебаний

$$\omega = -i \frac{2}{\pi} \frac{c^2 k^3}{\Omega^2 \langle v^{-1} \rangle}$$

Чисто мнимое значение частоты означает, что такие плазменные колебания являются апериодическими и сильно затухающими.

8.5.10 (!!) Затухание Ландау

мотивация

интересное свойство плазмы.
не знаю, зачем оно нужно?
и что особенного в нем?

качественное объяснение затухания Ландау

просто такое затухание есть.

Затухание Ландау — затухание, обусловленное взаимодействием резонансных частиц с электромагнитными волнами, возникающими в плазме.

Волна в плазме затухает по мере распространения, несмотря на отсутствие парных столкновений.

Качественное объяснение явления состоит в том, что энергия волны поглощается электронами, которые движутся со скоростями, близкими к фазовой скорости волны — т.н. «резонансные» электроны.

Такие электроны оказываются «заперты» в потенциальной яме периодического потенциала волны, чем и обусловлено значительное взаимодействие с волной.

(тут нарисован гауссиан)

график изображает распределение электронов по скоростям (в проекции на направление распространения волны) в бесстолкновительной плазме.

Как видно, число «резонансных» электронов (заштрихованные полосы) со скоростями выше фазовой скорости волны V_{ph} меньше, чем со скоростями ниже V_{ph} .

При прохождении волны более медленные частицы отбирают у неё энергию и ускоряются, а более быстрые, напротив, замедляются и сообщают дополнительную энергию волне (см. нижний рисунок).

Вследствие упомянутого неравенства количества частиц с разными скоростями в общем балансе потеря энергии волной при взаимодействии с медленными частицами плазмы превышает «подкачку» энергии от более быстрых частиц, и в результате происходит ослабление волны.

8.5.11 типичная модель плазменных колебаний

Задача 44 левитов шитов, часть задачи 16 дз на + балл, пока не готов ее рассказывать.

итоговые свойства модели

закон дисперсии при малых k есть

$$\omega^2(\mathbf{k}) = \omega_0^2 + \frac{3}{5} \mathbf{k}^2 v_F^2 + O\left(\frac{(k v_F)^4}{\omega_0^4}\right)$$

эффект динамической экранировки затравочного взаимодействия

Рассмотрим диаграммы на рис. ниже при конечной передаваемой частоте ω и импульсе \mathbf{k} .

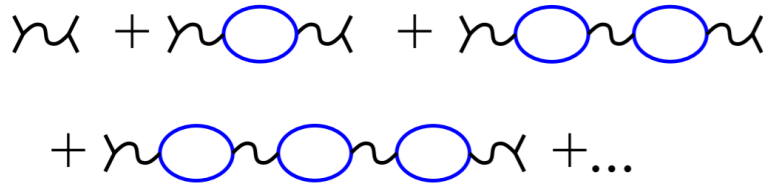


Figure 1

Говорят, что сумма этих диаграмм описывает эффект динамической экранировки затравочного взаимодействия $V_{\mathbf{k}}$, изображенного волнистой линией.

Закон дисперсии коллективных возбуждений $\omega(\mathbf{k})$ определяется полюсами заэкранированного взаимодействия.

поляризационный оператор

(??? что он есть такое???)

Найдем поляризационный оператор $\Pi(\omega, \mathbf{k})$ при $|\mathbf{k}| \ll p_0, \omega \ll E_F$.

Считая затравочное взаимодействие кулоновским, $V_{\mathbf{k}} = 4\pi e^2/k^2$, просуммируем ряд и получим заэкранированное взаимодействие $V_{\omega, \mathbf{k}}$.

Покажем, что в этом приближении закон дисперсии плазменных волн $\omega(\mathbf{k})$ дается соотношением (8.14), полученным из кинетического уравнения ферми-жидкости.

Определите поведение $\omega(\mathbf{k})$ при малых и больших k .

Этот ряд суммируется, как геометрическая прогрессия:

$$V_{\omega, \mathbf{k}} = V_{\mathbf{k}} + V_{\mathbf{k}}^2 \Pi(\omega, \mathbf{k}) + V_{\mathbf{k}}^3 \Pi^2(\omega, \mathbf{k}) + \dots = \frac{V_{\mathbf{k}}}{1 - V_{\mathbf{k}} \Pi(\omega, \mathbf{k})}$$

Поляризационный оператор есть (???)

$$\Pi(\omega, \mathbf{k}) = 2i \int G(\varepsilon_-, \mathbf{p}_-) G(\varepsilon_+, \mathbf{p}_+) \frac{d^3 p d\varepsilon}{(2\pi\hbar)^4}$$

где $\varepsilon_{\pm} = \varepsilon \pm \omega/2, \mathbf{p}_{\pm} = \mathbf{p} \pm \mathbf{k}/2$, а множитель 2 возникает при суммировании по спинам.

Интегрируя по частоте ε , находим

$$\Pi(\omega, \mathbf{k}) = 2 \int \frac{n(\mathbf{p}_-) - n(\mathbf{p}_+)}{\omega - \xi(\mathbf{p}_+) + \xi(\mathbf{p}_-)} \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3},$$

где $n(\mathbf{p})$ - распределение Ферми (ср. с выводом (7.85)).

Рассмотрим случай малых $|\mathbf{k}| \ll p_0$.

Приближенно можно записать

$$n(\mathbf{p}_-) - n(\mathbf{p}_+) = k \cos \theta \delta(|\mathbf{p}| - p_0)$$

где θ - угол между векторами \mathbf{p} и \mathbf{k} .

Теперь из-за δ -функции интеграл в (8.44) оказывается ограничен на поверхность ферми-сферы:

$$\Pi(\omega, \mathbf{k}) = 2\nu_0 \int_0^\pi \frac{k v_F \cos \theta}{\omega - k v_F \cos \theta} d \cos \theta$$

Интегрируя по θ , находим

$$\Pi(\omega, \mathbf{k}) = 2\nu_0 \left(\frac{s}{2} \ln \frac{s+1}{s-1} - 1 \right)$$

где $s = \omega/kv_F$.

Мы убеждаемся, что уравнение $V_{\mathbf{k}}\Pi(\omega, \mathbf{k}) = 1$, определяющее полюс заэкранированного взаимодействия $V_{\omega, \mathbf{k}}$, тождественно соотношению (8.14), выведенному из кинетического уравнения ферми-жидкости.

Закон дисперсии плазмона при малых k можно получить, разложив выражение (8.47) по $1/s$:

$$\Pi(\omega, \mathbf{k}) = 2\nu_0 \left(\frac{1}{3s^2} + \frac{1}{5s^4} + \dots \right)$$

Тогда уравнение $V_{\mathbf{k}}\Pi(\omega, \mathbf{k}) = 1$ принимает вид

$$\frac{\omega_0^2}{\omega^2} \left(1 + \frac{3}{5} \frac{k^2 v_F^2}{\omega^2} \right) = 1$$

где $\omega_0^2 = 4\pi n e^2 / m$ ($n = p_0^3 / (3\pi^2)$ - плотность частиц).

Следовательно, закон дисперсии при малых k есть

$$\omega^2(\mathbf{k}) = \omega_0^2 + \frac{3}{5} k^2 v_F^2 + O \left(\frac{(kv_F)^4}{\omega_0^4} \right)$$

Закон дисперсии при больших k можно определить, заметив, что выражение (8.47) стремится к бесконечности при $s \rightarrow 1$.

Поэтому уравнение $V_{\mathbf{k}}\Pi(s) = 1$ имеет решение при произвольно большом \mathbf{k} , причем $s \rightarrow 1$ при $k \rightarrow \infty$.

Это означает, что $\omega(\mathbf{k})$ приближается к $v_F k$ при больших k , все время оставаясь выше границы квазичастичного континуума $\omega(k) = v_F k$.

Точка окончания спектра

Оказывается, что закон дисперсии плазменных волн заканчивается при некотором k_{\max} , вливаясь в континуум квазичастичных возбуждений.

Чтобы исследовать этот эффект с помощью диаграмм, показанных на рис.

8.3, необходимо найти поляризационный оператор более точно, чем это было сделано в части а).

Найдем поляризационный оператор при произвольных ω и k .

Решая уравнение $V_{\mathbf{k}}\Pi(\omega, \mathbf{k}) = 1$, определим точку окончания спектра k_{\max}, ω_{\max} .

Дело в том, что поляризационный оператор (8.44) на самом деле остается конечным на границе континуума.

Расходимость же $\Pi(s \rightarrow 1) \rightarrow \infty$, полученная в части а), есть следствие принятого приближения (8.45).

Конечность поляризационного оператора приводит к тому, что уравнение $V_{\mathbf{k}}\Pi(\omega, \mathbf{k}) = 1$ не имеет решений за пределами квазичастичного континуума при достаточно больших $|\mathbf{k}|$.

Найдем $\Pi(\omega, \mathbf{k})$ точно, не используя приближение (8.45).

Для этого перепишем выражение (8.44) в виде

$$\Pi(\omega, \mathbf{k}) = 2 \int \left(\frac{n(\mathbf{p})}{\omega - \mathbf{k}^2/2m - \mathbf{k}\mathbf{v}} - \frac{n(\mathbf{p})}{\omega + \mathbf{k}^2/2m - \mathbf{k}\mathbf{v}} \right) \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3}$$

где $\mathbf{v} = \mathbf{p}/m$.

В этом выражении удобно сначала проинтегрировать по компонентам \mathbf{p} , перпендикулярным вектору \mathbf{k} .

Получается

$$\Pi(\omega, \mathbf{k}) = 2 \int_{-p_0}^{p_0} \left(\frac{\pi(p_0^2 - p_x^2)}{\omega - k^2/2m - kp_x/m} - \frac{\pi(p_0^2 - p_x^2)}{\omega + k^2/2m - kp_x/m} \right) \frac{dp_x}{(2\pi\hbar)^3}$$

где p_x есть компонента \mathbf{p} вдоль \mathbf{k} .

Оставшееся интегрирование по p_x выполняется элементарно.

Результат удобно записать в виде

$$\Pi(\omega, \mathbf{k}) = \frac{\nu}{8a} (F(s-a) - F(s+a)), \quad a = \frac{k}{2p_0}, s = \frac{\omega}{v_F k},$$

где $F(u) = \int_{-1}^1 \frac{1-x^2}{u-x} dx = 2u + (1-u^2) \ln \frac{u+1}{u-1}$.

Выражение выше определяет точный поляризационный оператор.

Проверим, что при $k \ll p_0$ получается выражение (8.47), найденное выше.

Действительно, при $a = k/2p_0 \rightarrow 0$ выражение (8.53) упрощается:

$$\Pi(\omega, \mathbf{k}) = -\frac{\nu}{4} F'(s) = -\frac{\nu}{4} \left(4 - 2s \ln \frac{s+1}{s-1} \right)$$

что совпадает с (8.47).

Теперь воспользуемся выражениями (8.53), (8.54) и определим точку окончания спектра плазмонов.

Граница квазичастичного континуума есть $\omega = v_F k + k^2/2m$.

Это условие можно записать как $s - a = 1$.

Поэтому точка окончания спектра, если таковая имеется, должна удовлетворять уравнению

$$\frac{\nu}{8a} (F(1) - F(1+2a)) = \frac{k^2}{4\pi e^2}$$

Это уравнение нетрудно переписать, введя $x^2 = 4\pi e^2 \nu$:

$$(1+a) \ln \frac{1+a}{a} - 1 = \frac{2k^2}{x^2}$$

Покажем, что в интервале $0 < a \leq 1$ у уравнения (8.57) всегда имеется ровно одно решение.

Действительно, левая часть (8.57) при $0 < a < 0.5$ монотонно убывает от ∞ до значения порядка единицы, в то время как правая часть (8.57) монотонно возрастает от 0 до значения порядка p_0^2/x^2 .

В то же время $e^2/\hbar v_F \ll 1$, поскольку мы занимаемся теорией возмущений в пределе большой плотности.

Поэтому $p_0^2/x^2 \gg 1$, и значит у уравнения (8.57) имеется корень, причем ровно один.

Из сказанного также следует, что решение лежит в области $a \ll 1$.

Поэтому уравнение (8.57) можно упростить, отбросив в левой части малые члены.

Получаем $\ln(2p_0/ek) = 2k^2/x^2$, где $e = 2,71828\dots$

С логарифмической точностью решение этого уравнения есть

$$k_{\max} = x \left(\frac{1}{2} \ln \frac{p_0}{x} \right)^{1/2}$$

Находим частоту при $k = k_{\max}$:

$$\omega_{\max} = v_F k_{\max} = \omega_0 \left(\frac{3}{2} \ln \frac{p_0}{x} \right)^{1/2}$$

При $e^2/\hbar v_F \ll 1$ частота в точке окончания спектра $\omega_0 \leq \omega_{\max} \ll \varepsilon_F$.

Подчеркнем еще раз, что ключевым обстоятельством является отсутствие расходимости $\Pi(\omega, \mathbf{k})$ на границе квазичастичного спектра.

Оценить величину поляризационного оператора можно и не вычисляя $\Pi(\omega = v_F |\mathbf{k}|)$ точно.

Достаточно заметить, что ширина пояса, в котором сосредоточена функция $n(\mathbf{p}_-) - n(\mathbf{p}_+)$ при малых \mathbf{k} порядка $|\mathbf{k}|$.

Поэтому δ -функция в (8.45) имеет ненулевую «ширину» порядка $|\mathbf{k}|$.

В результате, при $s = \omega/v_F k = 1$ логарифмическая расходимость выражения (8.47) обрезается на $s - 1 \approx k/p_0$, и получается $\Pi(\omega = v_F |\mathbf{k}|) = \nu_0 \ln(p_0/k)$.

Нетрудно видеть, что уравнение $V_{\mathbf{k}} \Pi = 1$ с логарифмической точностью совпадает с (8.57).

$\omega(\mathbf{k})$ имеет известный вид

(????)

Покажем, что уравнение для частоты плазменных волн $\omega(\mathbf{k})$ совпадает с соотношением

$$1 = V_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{p} \in R_k} \frac{2\omega_{\mathbf{p},\mathbf{k}}}{\omega^2 - \omega_{\mathbf{p},\mathbf{k}}^2},$$

полученным в результате диагонализации гамильтониана $\mathcal{H}_{\text{РПА}}$ Электрон-дырочных пар.

Рассмотрим теперь коллективные моды, пользуясь представлением осцилляторов электрон-дырочных пар.

Гамильтониан $\mathcal{H}_{\text{РПА}}$, даваемый суммой (8.23) и (8.24), квадратичен.

Поэтому диагонализация производится так же, как в задаче о многомерном классическом осцилляторе.

Уравнения на собственные значения имеют вид

$$\omega^2 \varphi_{\mathbf{p},\mathbf{k}} = \omega_{\mathbf{p},\mathbf{k}}^2 \varphi_{\mathbf{p},\mathbf{k}} + 2\omega_{\mathbf{p},\mathbf{k}}^{1/2} V_{\mathbf{k}} \left(\sum_{\mathbf{p}' \in R_k} \omega_{\mathbf{p}',\mathbf{k}}^{1/2} \varphi_{\mathbf{p}',\mathbf{k}} \right)$$

Находим

$$\varphi_{\mathbf{p},\mathbf{k}} = \frac{2\omega_{\mathbf{p},\mathbf{k}}^{1/2}}{\omega^2 - \omega_{\mathbf{p},\mathbf{k}}^2} V_{\mathbf{k}} \left(\sum_{\mathbf{p}' \in R_k} \omega_{\mathbf{p}',\mathbf{k}}^{1/2} \varphi_{\mathbf{p}',\mathbf{k}} \right)$$

Умножая эти равенства на $\omega_{\mathbf{p},\mathbf{k}}^{1/2}$ и суммируя по \mathbf{k}, \mathbf{p} и спинам, получаем уравнение самосогласования:

$$1 = 2V_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{p} \in R_k} \frac{2\omega_{\mathbf{p},\mathbf{k}}}{\omega^2 - \omega_{\mathbf{p},\mathbf{k}}^2}$$

(коэффициент 2 перед $V_{\mathbf{k}}$ - спиновое вырождение).

Итак, мы убедились в справедливости соотношения (8.26).

Проверим теперь, что оно совпадает с $1 = V_{\mathbf{k}} \Pi(\omega, \mathbf{k})$.

Для этого в выражении (8.44) для поляризационного оператора разделим область интегрирования по \mathbf{p} на две под-области: $n(\mathbf{p}_-) > n(\mathbf{p}_+) = 0$ и $n(\mathbf{p}_-) < n(\mathbf{p}_+) = 1$.

Простым сдвигом $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} + \mathbf{k}/2$ в первом случае, и $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} - \mathbf{k}/2$ - во втором, получаем области R_k и R_{-k} .

Делая в интеграле по R_{-k} замену $\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}, \mathbf{p} \rightarrow -\mathbf{p}$, не меняющую результата, приводим поляризационный оператор (8.44) к виду:

$$\Pi(\omega, \mathbf{k}) = 2 \sum_{\mathbf{p} \in R_k} \left(\frac{1}{\omega - \omega_{\mathbf{p}, \mathbf{k}}} - \frac{1}{\omega + \omega_{\mathbf{p}, \mathbf{k}}} \right)$$

Таким образом, действительно, соотношение $1 = V_{\mathbf{k}} \Pi(\omega, \mathbf{k})$, полученное суммированием диаграмм, есть не что иное, как (8.62).

В заключение отметим, что хотя точный поляризационный оператор (8.53), (8.54) и может оказаться полезным в некоторых случаях, обычно бывает совершенно достаточно пользоваться выражением (8.47), соответствующим приближению кинетического уравнения ферми-жидкости.

8.5.12 (!) Столкновения в плазме

вкратце

э

теория

э

8.5.13 (!) Интеграл столкновений Ландау

вкратце

э

теория

э

8.5.14 (!) Передача энергии между электронами и ионами

вкратце

э

теория

э

8.5.15 (!) Длина пробега частиц в плазме

вкратце

э

теория

э

8.5.16 (!) Лоренцева плазма

вкратце

э

теория

э

8.5.17 Плазменное эхо - проявление затухания Ландау

вроде уже ранее касался я этого???

обзор плазменного эхо

теория

Термодинамически обратимый характер затухания Ландау проявляется в своеобразных нелинейных явлениях, называемых плазменным эхом.

Эти явления возникают в результате тех незатухающих осцилляций функции распределения (34.16), которые остаются после бесстолкновительной релаксации возмущений плотности (и поля) в плазме.

Они имеют по существу кинематическое происхождение, не связанное с существованием в плазме самосогласованного электрического поля.

Мы проиллюстрируем его сначала на примере газа из незаряженных частиц без столкновений.

Пусть в начальный момент времени в газе задано возмущение, в котором функция распределения, оставаясь по скоростям максвелловской в каждой точке пространства, меняется вдоль оси x по периодическому закону

$$\delta f = A_1 \cos k_1 x \cdot f_0(p) \text{ при } t = 0$$

(в этом параграфе $p = mv$ будет обозначать x -компоненту импульса; функция распределения предполагается уже проинтегрированной по p_y и p_z).

По такому же закону меняется вдоль оси x (в тот же момент $t = 0$) и возмущение плотности газа, т.

е.

интеграл $\int \delta f \cdot dp$.

В последующие моменты времени возмущение (??)

8.5.18 обзор приложений кинетики плазмы

пока хз, где это нужно.

пока набор разных просто задач интересных, потом соберу их в новую структуру или вынесу в отдельную запись.

задача о вхождении ракеты в атмосферу

говорят, там как раз интеграл столкновений и рассматриваем

9 Другое о плазме

тут то, что я вряд ли буду проходить вскоре
все, что использую - в главе выше.

9.0.1 Диэлектрическая проницаемость максвелловской плазмы

Применим формулу (29.10) к электронной плазме с равновесным (максвелловским) распределением электронов

$$f(p_x) = \frac{N_e}{(2\pi m T_e)^{1/2}} \exp\left(-\frac{p_x^2}{2m T_e}\right)$$

где T_e - температура электронного газа (имея в виду включить ниже в рассмотрение также и ионную компоненту плазмы, будем сразу же отличать индексом e величины, относящиеся к электронам).

Находим

$$\varepsilon_l(\omega, k) = 1 + \frac{1}{(ka_e)^2} \left[1 + F\left(\frac{\omega}{\sqrt{2}kv_{Te}}\right) \right]$$

где функция $F(x)$ определена интегралом

$$F(x) = \frac{x}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-z^2} dz}{z - x - i0} = \frac{x}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-z^2} dz}{z - x} + i\sqrt{\pi} x e^{-x^2}$$

и введены параметры

$$v_{Te} = \sqrt{\frac{T_e}{m}}, \quad a_e = \sqrt{\frac{T_e}{4\pi N_e e^2}}$$

Величина v_{Te} есть некоторая средняя тепловая скорость электронов; a_e - дебаевский радиус, определенный по заряду и плотности электронов.

Предельные выражения функции $F(x)$ для больших и малых значений x легко найти непосредственно из определения (31.3).

При $x \gg 1$ пишем

$$\frac{x}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-z^2} dz}{z - x} = -\frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-z^2} \left(1 + \frac{z}{x} + \frac{z^2}{x^2} + \dots \right) dz$$

Интегралы от нечетных по x членов обращаются в нуль, а остальные дают

$$F(x) + 1 \approx -\frac{1}{2x^2} - \frac{3}{4x^4} + i\sqrt{\pi} x e^{-x^2}, \quad x \gg 1$$

При $x \ll 1$ производим сначала замену переменной интегрирования $z = u + x$, после чего разлагаем по степеням x :

$$\frac{x}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-z^2} dz}{z - x} = \frac{x e^{-x^2}}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-u^2 - 2ux} \frac{du}{u} \approx \frac{x}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-u^2} \left(\frac{1}{u} - 2x \right) du$$

Главное значение интеграла от первого (нечетного по u) члена обращается в нуль, а с учетом второго члена находим

$$F(x) \approx -2x^2 + i\sqrt{\pi} x, \quad x \ll 1$$

С помощью этих формул можно написать предельные выражения диэлектрической проницаемости.

При больших $\frac{\omega}{kv_{Te}} \gg 1$ частотах имеем

$$\varepsilon_l = 1 - \frac{\Omega_e^2}{\omega^2} \left(1 + \frac{3k^2 v_{Te}^2}{\omega^2} \right) + i \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{\omega \Omega_e^2}{(kv_{Te})^3} \exp \left(-\frac{\omega^2}{2k^2 v_{Te}^2} \right),$$

где введен параметр $\Omega_e = \frac{v_{Te}}{a_e} = \sqrt{\frac{4\pi N_e e^2}{m}}$ - так называемая плазменная (или ленгмюровская) частота для электронов.

Как и следовало, в случае $\omega/(kv_{Te}) \gg 1$ пространственная дисперсия приводит лишь к малым поправкам в диэлектрической проницаемости, причем мнимая часть ε_l оказывается экспоненциально малой - результат того, что в максвелловском распределении лишь экспоненциально малая доля электронов имеет скорости $v_x = \omega/k \gg v_{Te}$.

Независящее от k предельное значение диэлектрической проницаемости

$$\varepsilon(\omega) = 1 - (\Omega_e/\omega)^2$$

Это выражение относится как к продольной, так и к поперечной проницаемости (см. (28.8)).

Его легко получить с помощью простых рассуждений, без использования кинетического уравнения.

Действительно, при $k \rightarrow 0$ поле волны можно считать однородным, и тогда уравнение движения электрона $m\dot{\mathbf{v}} = -e\mathbf{E}$ дает $\mathbf{v} = \frac{e\mathbf{E}}{im\omega}$,

так что создаваемая электронами плотность тока

$$\mathbf{j} = -\frac{e^2 N_e}{im\omega} \mathbf{E}$$

9.0.2 (!) Продольные плазменные волны

9.0.3 (!) Ионно-звуковые волны

9.0.4 (!) Релаксация начального возмущения

9.0.5 Адиабатический захват электронов

9.0.6 Квазинейтральная плазма

Уравнения динамики плазмы допускают далеко идущее упрощение для категории явлений, в которых характерные масштабы длин и времени удовлетворяют следующим условиям.

Характерный размер неоднородностей в плазме L предполагается большим по сравнению с электронным дебаевским радиусом:

$$\frac{a_e}{L} \ll 1$$

Скорость же процесса предполагается определяющейся движением ионов, так что характерный масштаб скорости дается величиной v_{Ti} , малой по сравнению со скоростями электронов.

Движение ионов приводит к медленному изменению электрического потенциала, за которым адиабатически следует распределение электронов.

Пусть δN_e и δN_i - изменения плотностей электронов и ионов в возмущенной плазме.

Эти изменения создают в плазме среднюю плотность некомпенсированного заряда: $\delta\rho = e(z\delta N_i - \delta N_e)$.

Потенциал создаваемого этими зарядами электрического поля определяется уравнением Пуассона

$$\Delta\varphi = -4\pi e(z\delta N_i - \delta N_e)$$

По порядку величины $\Delta\varphi \sim \varphi/L^2$.

Поэтому

$$\left| \frac{z\delta N_i - \delta N_e}{\delta N_e} \right| \sim \frac{1}{4\pi e L^2} \left| \frac{\varphi}{\delta N_e} \right|$$

$$\left| \frac{z\delta N_i - \delta N_e}{\delta N_e} \right| \sim \frac{1}{4\pi e L^2} \left| \frac{\varphi}{\delta N_e} \right|$$

Если поле слабо ($e\varphi \ll T_e$), то изменение электронной плотности

$$\delta N_e \sim \frac{e\varphi N_e}{T_e}$$

(ср.

(36.11)) и тогда

$$\left| \frac{z\delta N_i - \delta N_e}{\delta N_e} \right| \sim \frac{a_e^2}{L^2} \ll 1$$

Это неравенство остается справедливым и в случае сильного возмущения, когда $e\varphi \sim T_e$; при этом $\delta N_e \sim N_e$ и из (37.3) снова следует (37.4).

Таким образом, возникающая при возмущении некомпенсированная плотность зарядов оказывается малой по сравнению с возмущениями плотностей зарядов электронов и ионов в отдельности; в таких случаях говорят о квазинейтральной плазме.

Это свойство позволяет при изучении рассматриваемого круга явлений определять распределение потенциала в плазме, просто исходя из «уравнения квазинейтральности»

$$N_e = zN_i$$

совместно с кинетическим уравнением для ионов и с уравнением, выражающим «адиабатическое» распределение электронов).

Разумеется, в начальный момент времени - если рассматривается задача с начальными условиями - плотности электронов могут быть заданы произвольно и не обязательно удовлетворяют неравенству (37.4).

Возникающее при этом большое электрическое поле приведет, однако, к движению электронов, которое быстро, за характерные «электронные» времена, восстановит квазинейтральность (в диффузионном случае этот процесс прослежен в §25).

9.0.7 Гидродинамика двухтемпературной плазмы

9.0.8 Солитоны в слабо диспергирующей среде

9.0.9 Другое о плазме

(нужно будет - увеличу раздел, пока что мне это не нужно было.)

Диэлектрическая проницаемость вырожденной бесстолкновительной плазмы
Плазма в магнитном поле

Диэлектрическая проницаемость бесстолкновительной холодной плазмы

Функция распределения в магнитном поле

Диэлектрическая проницаемость магнитоактивной максвелловской плазмы

типичное описание магнитоактивной плазмы Электронный вклад в тензор диэлектрической проницаемости вычисляется по функции распределения согласно формуле

$$P_{\alpha} = \frac{\varepsilon_{\alpha\beta} - \delta_{\alpha\beta}}{4\pi} E_{\beta} = \frac{e}{i\omega} \int v_{\alpha} \delta f d^3p$$

(и аналогично, с заменой $e \rightarrow -ze$ - ионный вклад).

Для максвелловской плазмы интегрирование по d^3p в этом выражении может быть выполнено в явном виде.

Функция δf дается интегралом (53.12), причем согласно определению (53.10):

$$Q = -\frac{e\mathbf{E}\mathbf{v}}{\omega_{Be}T} f_0$$

Перепишем этот интеграл в более компактном виде, введя вместо векторов $\mathbf{k} = (k_z, \mathbf{k}_{\perp})$ и $\mathbf{E} = (E_z, \mathbf{E}_{\perp})$ векторы

$$\mathbf{K} = \left(k_z \tau, 2\tilde{\mathbf{k}}_{\perp} \sin \frac{\tau}{2} \right), \quad \tilde{\mathbf{E}} = (E_z, \tilde{\mathbf{E}}_{\perp})$$

где $\tilde{\mathbf{k}}_{\perp}$ - вектор \mathbf{k}_{\perp} , повернутый на угол $\tau/2$ (в плоскости, перпендикулярной \mathbf{B}_0), а $\tilde{\mathbf{E}}_{\perp}$ - вектор \mathbf{E}_{\perp} , повернутый на угол τ .

Тогда δf примет вид

$$\delta f = -\frac{e}{T\omega_{Be}} \int_0^{\infty} \exp \left\{ \frac{i}{\omega_{Be}} (\omega\tau - \mathbf{K}\mathbf{v}) \right\} f_0(p) (\tilde{\mathbf{E}}\mathbf{v}) d\tau$$

где $f_0(p)$ - максвелловская функция распределения.

Это выражение подставим в (54.1) и заменим переменную интегрирования $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$ согласно

$$\mathbf{v} = \mathbf{u} - \frac{i\mathbf{K}T}{m\omega_{Be}}$$

Интегрирование по d^3u производится элементарно, и в результате находим

$$\mathbf{P} = \frac{ie^2 N_e}{m\omega\omega_{Be}} \int_0^{\infty} \left(\tilde{\mathbf{E}} - \frac{T}{m\omega_{Be}^2} (\tilde{\mathbf{E}}\mathbf{K})\mathbf{K} \right) \exp \left[-\frac{i\omega\tau}{\omega_{Be}} - \frac{\mathbf{K}^2 T}{2m\omega_{Be}^2} \right] d\tau$$

При этом, согласно определению (54.3):

$$\mathbf{K}^2 = k_z^2 \tau^2 + 4k_{\perp}^2 \sin^2 \frac{\tau}{2}$$

Расписав выражение (54.4) в компонентах, найдем компоненты тензора $\varepsilon_{\alpha\beta}$.

При этом условимся о выборе осей координат: ось z - по \mathbf{B}_0 , ось x - по \mathbf{k}_{\perp} , ось y - по $[\mathbf{B}_0 \mathbf{k}_{\perp}]$ (рис.

15).

После простых вычислений получим

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\alpha\beta} - \delta_{\alpha\beta} &= \frac{i\Omega_e^2}{\omega\omega_{Be}} \int_0^{\infty} x_{\alpha\beta} \times \\ &\times \exp \left\{ i\tau \frac{\omega + i0}{\omega_{Be}} - \frac{1}{2} k_z^2 r_{Be}^2 \tau^2 - 2k_{\perp}^2 r_{Be}^2 \sin^2 \frac{\tau}{2} \right\} d\tau \end{aligned}$$

.....

примеры

Затухание Ландау в магнитоактивной плазме

Электромагнитные волны в магнитоактивной холодной плазме

Влияние теплового движения на распространение электроэлектромагнитных волн в магнитоактивной плазме

Уравнения гидродинамики магнитоактивной плазмы

Кинетические коэффициенты плазмы в сильном магнитном поле

Дрейфовое приближение

Part VI

Кинетика в твердых телах

(!!!! очень важно проверить, чтобы не было чего-то лишнего!!!! потому что тут много написано, но это все больше к твердому телу относится, а не к кинетике. Соответственно, отсюда это удалить нужно!)

10 Типичные кинетические явления в твердых телах

10.1 Электрические кинетические явления в металлах

Первое, что хочется научиться делать с твердыми телами - это считать разные электрические явления. Поэтому научимся это делать.

10.1.1 электрические параметры

Для электрических явлений вводятся некоторые параметры, которые ранее не были нужны. Приведем их обзор, чтобы ориентироваться в их смысле и свойствах.

электрический ток и его плотность

Плотность электрического тока имеет вид:

$$j^\alpha = -2e \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} v^\alpha \delta f$$

$\Pi_{\alpha\beta}$ - тензор плотности потока импульса

!! посчитать его хотя бы раз!!!

По определению тензор плотности потока

$$\Pi_{\alpha\beta} = \int p_\alpha v_\beta f d\Gamma = \int m v_\alpha v_\beta f d\Gamma$$

показывает, сколько α -ой компоненты импульса переносится молекулами в β -ом направлении ??? в 1 с через единичную площадку, ??? перпендикулярную оси x_β .

Связан с плотностью тока и удельной поляризацией так:

???

... см про плазму задачу (????)

используется в уравнении для потока импульса:

$$\frac{\partial j_i}{\partial t} + \frac{\partial \Pi_{ik}}{\partial x_k} = 0$$

??

удельная поляризация

коэффициент температуропроводности Q или коэффициент Зеебека

проводимость тензорная (!!!)

(важная тема из задавальника кст)

сечение рассеяния**магнитосопротивление**

Магнитосопротивление

$$\Delta\rho_{xx}(B) = \rho_{xx}(B) - \rho_{xx}(0)$$

свойства...

10.1.2 теория Друде**мотивация**

вроде одна из первых теорий, с которой познакомится следует.

итоговые формулы

Кинетическое уравнение Больцмана в приближении времени релаксации приводит для проводимости электронного газа к формуле Друде:

$$\sigma = \frac{ne_0^2\tau}{m^*}$$

σ - электрическая удельная проводимость n - концентрация электронов e_0 - элементарный заряд τ - время релаксации по импульсам (время, за которое электрон «забывает» о том, в какую сторону двигался) m^* - эффективная масса электрона. Ниже приведён вывод этого выражения для классического случая без учёта реального потенциала рассеяния.

Эта формула применима также к электронному и дырочному газу в полупроводниках (Формулу можно записать в другом виде для вырожденного электронного или дырочного газа $\sigma = e_0^2 D g$, где D - коэффициент диффузии электронов или дырок, а g - плотность электронных или дырочных состояний, причём все физические величины берутся на поверхности Ферми).

Плотности состояний в двумерном проводнике

$$g = g_s g_v \frac{m^*}{2\pi\hbar^2}$$

где g_s - спиновое вырождение, g_v - долинное вырождение, m^* - эффективная масса и не зависит от энергии.

$g_s = 2$ а долинное вырождение для GaAs $g_v = 1$ Для носителей тока с параболическим законом дисперсии (энергия отсчитывается от дна зоны проводимости)

$$E_F = \frac{mv_F^2}{2}$$

где v_F - скорость носителей на уровне Ферми, и $g = n/E_F$, можно получить выражение Друде для двумерно электронного газа

$$\sigma = e_0^2 D \frac{n}{E_F} = \frac{2e_0^2 n D}{m^* v_F^2} = \frac{n e_0^2 2D}{m^* v_F^2} = \frac{n e_0^2}{m^*} \tau$$

вывод**10.1.3 закон Ома****формулировка**

потом запишу

границы применимости

актуально их четко понять

обзор обобщений

тоже интересно

10.1.4 кинетические уравнения для электронов

Заготовим уравнения, которые будем далее использовать для моделей.

10.1.5 разные эффекты в двух словах

мб потом удалю, просто пока их не проработал еще.

Электрон-электронные столкновения и их вклад в сопротивление металла

тема мб окажется не малой, посмотрим.

Интеграл столкновений при рассеянии электронов в металле на фононах в приближении Блоха и зависимость электросопротивления и теплопроводности от температуры.

Тензор электропроводности металла в магнитном поле.

Эффект Холла

быстро разберусь, но сперва с теорией в твердом теле и ЭСС, там все-таки основы (многое позже в запись про твердое тело добавлю)

обзор кинетических явлений в металлах

Обсудим, какие вообще могут быть задачи.

(потом это напишу как следует!!)

Может быть, что есть в металле примесь.

Может быть, что в металле есть колебания, тогда электроны будут взаимодействовать с фононами.

Может быть, что есть магнитное поле.

10.1.6 модель рассеяния электронов на случайном потенциале

интересная задача, которая хорошо иллюстрирует методы кинетики.

10.1.7 Тензор проводимости и закон Ома $\rho_{\alpha\beta}(\omega, B)$

(подумаю, мб вставляю попозже, если это не так уж актуальная задача, все-таки в оригинале эта тема далеко не первая)

итоговые формулы(?!!)

Проводимость имеет вид:

$$\sigma_{\alpha\beta}(\omega, B) = ne^2\tau \begin{pmatrix} \frac{(1-i\omega\tau)/m_x^*}{(1-i\omega\tau)^2+(\omega_c\tau)^2} & \mp \frac{\omega_c\tau/\sqrt{m_x^*m_y^*}}{(1-i\omega\tau)^2+(\omega_c\tau)^2} & 0 \\ \pm \frac{\omega_c\tau/\sqrt{m_x^*m_y^*}}{(1-i\omega\tau)^2+(\omega_c\tau)^2} & \frac{(1-i\omega\tau)/m_y^*}{(1-i\omega\tau)^2+(\omega_c\tau)^2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{(1-i\omega\tau)m_z^*} \end{pmatrix}$$

где $\omega_c \equiv \frac{eB}{m_{\perp}^* c}$, а также $m_{\perp}^* \equiv \sqrt{m_x^* m_y^*}$ - циклотронная частота.
закон Ома - см далее.

δf из уравнения Власова

Все наши параметры выражаются через δf , так что его следует определить, делается это, как всегда, через кинетические уравнения.

В присутствии внешнего магнитного поля \mathbf{B} линеаризованное уравнение Больцмана имеет вид:

$$\frac{\partial \delta f}{\partial t} - e \mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\mathcal{E}} \frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon} - \frac{e}{\hbar c} \mathbf{v} \times \mathbf{B} \cdot \frac{\partial \delta f}{\partial \mathbf{k}} = \mathcal{L} \delta f$$

Получим точное решение для тау-приближения $\mathcal{L} \delta f = -\delta f/\tau$ и приближения эффективной массы,

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \pm \frac{1}{2} \hbar^2 m_{\alpha\beta}^{-1} k^{\alpha} k^{\beta}$$

поэтому

$$v^{\alpha} = \pm \hbar m_{\alpha\beta}^{-1} k^{\beta}$$

где знак “+” для электронов, а знак “-” для дырок.

При $\mathcal{E}(t) = \mathcal{E} e^{-i\omega t}$ найдем решение в виде

$$\delta f(\mathbf{k}, t) = \mathbf{k} \cdot \mathbf{A}(\varepsilon) e^{-i\omega t} \equiv \delta f(\mathbf{k}) e^{-i\omega t}$$

где $\mathbf{A}(\varepsilon)$ это векторная функция от ε , которую будем определять.

Имеем:

$$(\tau^{-1} - i\omega) k^{\mu} A^{\mu} - \frac{e}{\hbar c} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} v^{\alpha} B^{\beta} \frac{\partial}{\partial k^{\gamma}} (k^{\mu} A^{\mu}) = e \mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\mathcal{E}} \frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon}$$

где $\epsilon_{\alpha\beta\gamma}$ это тензор Леви-Чивиты.

Заметим, что

$$\begin{aligned} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} v^{\alpha} B^{\beta} \frac{\partial}{\partial k^{\gamma}} (k^{\mu} A^{\mu}) &= \epsilon_{\alpha\beta\gamma} v^{\alpha} B^{\beta} \left(A^{\gamma} + k^{\mu} \frac{\partial A^{\mu}}{\partial k^{\gamma}} \right) \\ &= \epsilon_{\alpha\beta\gamma} v^{\alpha} B^{\beta} \left(A^{\gamma} + \hbar k^{\mu} v^{\gamma} \frac{\partial A^{\mu}}{\partial \varepsilon} \right) \\ &= \epsilon_{\alpha\beta\gamma} v^{\alpha} B^{\beta} A^{\gamma} \end{aligned}$$

за счет асимметричности тензора Леви-Чивиты $\epsilon_{\alpha\beta\gamma} v^{\alpha} v^{\gamma} = 0$.

теперь подставим $\hbar k^{\alpha} = \pm m_{\alpha\beta} v^{\beta}$, and match the coefficients of v^{α} in each term of the Boltzmann equation.

Получим

$$\left[(\tau^{-1} - i\omega) m_{\alpha\beta} \pm \frac{e}{c} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} B^{\gamma} \right] A^{\beta} = \pm \hbar e \frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon} \mathcal{E}^{\alpha}$$

Поскольку неизвестно, как решать это уравнение, просто определим функцию

$$\Gamma_{\alpha\beta} \equiv (\tau^{-1} - i\omega) m_{\alpha\beta} \pm \frac{e}{c} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} B^{\gamma},$$

которая будет отражать все неизвестные параметры. Теперь запишем решение в виде

$$\delta f = e v^{\alpha} m_{\alpha\beta} \Gamma_{\beta\gamma}^{-1} \mathcal{E}^{\gamma} \frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon}$$

плотность тока и тензор проводимости: начало вывода

Теперь мы можем получить плотность тока и тензор проводимости.

Плотность электрического тока имеет вид:

$$\begin{aligned} j^\alpha &= -2e \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} v^\alpha \delta f \\ &= +2e^2 \mathcal{E}^\gamma \int_{\hat{\Omega}} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} v^\alpha v^\nu m_{\nu\beta} \Gamma_{\beta\gamma}^{-1}(\varepsilon) \left(-\frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon} \right) \end{aligned}$$

где мы делаем поправку на зависящее от энергии время релаксации $\tau(\varepsilon)$.

Note that $\Gamma_{\alpha\beta}(\varepsilon)$ is energydependent due to its dependence on τ .

Проводимость имеет вид:

$$\begin{aligned} \sigma_{\alpha\beta}(\omega, B) &= 2\hbar^2 e^2 m_{\alpha\mu}^{-1} \left\{ \int_{\hat{\Omega}} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} k^\mu k^\nu \left(-\frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon} \right) \Gamma_{\nu\beta}^{-1}(\varepsilon) \right\} \\ &= \pm \frac{2}{3} e^2 \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \varepsilon g(\varepsilon) \Gamma_{\alpha\beta}^{-1}(\varepsilon) \left(-\frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon} \right) \end{aligned}$$

where the chemical potential is measured with respect to the band edge.

Поэтому,

$$\sigma_{\alpha\beta}(\omega, \mathbf{B}) = ne^2 \langle \Gamma_{\alpha\beta}^{-1} \rangle,$$

где среднее значение определено как

$$\langle \Gamma_{\alpha\beta}^{-1} \rangle \equiv \frac{\int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \varepsilon g(\varepsilon) \left(-\frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon} \right) \Gamma_{\alpha\beta}^{-1}(\varepsilon)}{\int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \varepsilon g(\varepsilon) \left(-\frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon} \right)}$$

Величина n это плотность носителей,

$$n = \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon g(\varepsilon) \times \begin{cases} f^0(\varepsilon) & \text{(electrons)} \\ \{1 - f^0(\varepsilon)\} & \text{(holes)} \end{cases}$$

For the sake of simplicity, let us assume an energy-independent scattering time, or that the temperature is sufficiently low that only $\tau(\varepsilon_F)$ matters, and we denote this scattering time simply by τ .

удельное сопротивление

В итоге получаем удельное сопротивление ρ как обратную проводимость $(\sigma_{\alpha\beta})^{-1} = (ne^2 \Gamma_{\alpha\beta}^{-1})^{-1}$

$$\rho_{\alpha\beta} = \frac{1}{ne^2} \Gamma_{\alpha\beta} = \frac{1}{ne^2} \left[(\tau^{-1} - i\omega) m_{\alpha\beta} \pm \frac{e}{c} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} B^\gamma \right]$$

Запишем сопротивление в компонентах.

Будем предполагать, что \mathbf{B} направлено вдоль одной из главных осей тензора эффективной массы $m_{\alpha\beta}$, который мы определяем как $\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{y}}, \hat{\mathbf{z}}$, в этом случае

$$\rho_{\alpha\beta}(\omega, B) = \frac{1}{ne^2} \begin{pmatrix} (\tau^{-1} - i\omega) m_x^* & \pm eB/c & 0 \\ \mp eB/c & (\tau^{-1} - i\omega) m_y^* & 0 \\ 0 & 0 & (\tau^{-1} - i\omega) m_z^* \end{pmatrix}$$

где $m_{x,y,z}^*$ are the eigenvalues of $m_{\alpha\beta}$ and B lies along the eigenvector $\hat{\mathbf{z}}$.

Заметим, что $\rho_{xx}(\omega, B) = \frac{m_x^*}{ne^2\tau} (1 - i\omega\tau)$ независима от B .

Следовательно, магнитосопротивление

$$\Delta\rho_{xx}(B) = \rho_{xx}(B) - \rho_{xx}(0)$$

vanishes: $\Delta\rho_{xx}(B) = 0$.

While this is true for a single parabolic band, deviations from parabolicity and contributions from other bands can lead to a nonzero magnetoresistance.

плотность тока и тензор проводимости: получение итоговых формул

Тензор проводимости $\sigma_{\alpha\beta}$ есть обратная матрица от $\rho_{\alpha\beta}$.

Используя выражение для обратной матрицы, $\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}^{-1} = 1/(ad - bc) \begin{pmatrix} d & -b \\ -c & a \end{pmatrix}$, получаем

$$\sigma_{\alpha\beta}(\omega, B) = ne^2\tau \begin{pmatrix} \frac{(1-i\omega\tau)/m_x^*}{(1-i\omega\tau)^2+(\omega_c\tau)^2} & \mp \frac{\omega_c\tau/\sqrt{m_x^*m_y^*}}{(1-i\omega\tau)^2+(\omega_c\tau)^2} & 0 \\ \pm \frac{\omega_c\tau/\sqrt{m_x^*m_y^*}}{(1-i\omega\tau)^2+(\omega_c\tau)^2} & \frac{(1-i\omega\tau)/m_y^*}{(1-i\omega\tau)^2+(\omega_c\tau)^2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{(1-i\omega\tau)m_z^*} \end{pmatrix}$$

где $\omega_c \equiv \frac{eB}{m_{\perp}^*c}$, а также $m_{\perp}^* \equiv \sqrt{m_x^*m_y^*}$ — циклотронная частота.

Поэтому диагональные проводимости равны:

$$\sigma_{xx}(\omega, B) = \frac{ne^2\tau}{m_x^*} \frac{1 - i\omega\tau}{1 + (\omega_c^2 - \omega^2)\tau^2 - 2i\omega\tau} \quad (10.1)$$

$$\sigma_{zz}(\omega, B) = \frac{ne^2\tau}{m_z^*} \frac{1}{1 - i\omega\tau} \quad (10.2)$$

Заметим, что $\sigma_{xx,yy}$ являются независимыми от поля, в отличие от соответствующих компонент тензора удельного сопротивления.

(???)

Также мы получили, зная вид всех коэффициентов, что

$$j_{\alpha}(\omega) = \sigma_{\alpha\beta}(\omega, \mathbf{B})E_{\beta}(\omega)$$

выполнение принципе Онзагера в случае электронов

Частный случай соотношений Онзагера:

$$\sigma_{\alpha\beta}(\omega, B) = \sigma_{\beta\alpha}(\omega, -B).$$

ток $j_{\alpha} = \sigma_{\alpha\beta} \otimes E_{\beta}$

Докажем, что

$$j_{\alpha} = \sigma_{\alpha\beta} \otimes E_{\beta}.$$

(???)

Произведем преобразование Фурье:

$$j_{\alpha}(t) = \int_{\mathbb{R}} j_{\alpha}(\omega) \exp(-i\omega t) \frac{d(\omega)}{2\pi}$$

Далее подставим

$$j_{\alpha}(\omega) = \sigma_{\alpha\beta}(\omega, \mathbf{B})E_{\beta}(\omega)$$

и сделаем преобразования

$$\begin{aligned}
 j_{\alpha}(t) &= \int_{\mathbb{R}} \sigma_{\alpha\beta}(\omega, \mathbf{B}) E_{\beta}(\omega) \exp(-i\omega t) \frac{d(\omega)}{2\pi} \\
 &= \int_{\mathbb{R}} \frac{d(\omega)}{2\pi} \sigma_{\alpha\beta}(\omega, \mathbf{B}) \int_{\mathbb{R}} d(t') E_{\beta}(t') \exp(i\omega(t' - t)) = \\
 &= \int_{\mathbb{R}} d(t') \left(\int_{\mathbb{R}} \frac{d(\omega)}{2\pi} \sigma_{\alpha\beta}(\omega, \mathbf{B}) \exp(i\omega(t' - t)) \right) E_{\beta}(t') = \\
 &= \int_{\mathbb{R}} d(t') \sigma_{\alpha\beta}(t' - t) E_{\beta}(t').
 \end{aligned}$$

Например,

$$j_z \propto \int_{\mathbb{R}} \frac{d(\omega)}{2\pi} \frac{1}{1 - i\omega\tau} \exp(-i\omega t) = \theta(t) \frac{1}{\tau} \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right)$$

10.1.8 Диффузия и модель Лоренца

(пишу по Аровасу 5.6.1)

суть модели Лоренца

??!!!

что там мы ...

почти дошел.

случаи применения модели Лоренца (!?)

казалось бы, модель Друде уже есть и многое уже есть, чт еще нужно?

время релаксации и тау приближение это одно и то же (???)

мб это одно и то же?

связь времени релаксации и тау приближения

главная идея, как решать на больших временах

Мы видели, что времени релаксации недостаточно, а как тогда иначе?

(тут место вкратце главной идеи. пока что я тупой и не понял это.)

недостаточность приближения времени релаксации для описания диффузии

Приближение времени релаксации не способно сохранять любой интеграл столкновений (?).

Например, в случае гидродинамических процессов, таких как диффузия, оно неприменимо.

Это происходит потому что если записать решение уравнения Больцмана в терминах отклонения от равновесного распределения $\delta\tilde{n}(\mathbf{v}, t) = \tilde{n}(\mathbf{v}, t) - \tilde{n}_0(\mathbf{v})$, то из решения

$$\delta\tilde{n}(\mathbf{v}, t) = \delta\tilde{n}(\mathbf{v}, 0)e^{-t/\tau}$$

видно, что $\tilde{n}(\mathbf{v}, t)$ экспоненциально спадает до нуля с постоянной времени τ , поэтому общее число частиц экспоненциально уменьшается до N_0 .

Чтобы увидеть это, опишем систему функцией распределения $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$, зависящей от координат, скорости и времени, а не координат, импульса и времени, как раньше. (? зачем?)

При отсутствии внешних сил уравнение Больцмана в приближении времени релаксации имеет вид

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} = -\frac{f - f^0}{\tau}$$

Плотность частиц в пространстве скоростей задается

$$\tilde{n}(\mathbf{v}, t) = \int d^3r f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$$

В равновесии это распределение Максвелла, умноженное на общее число частиц:

$$\tilde{n}_0(\mathbf{v}) = N P_M(\mathbf{v}).$$

Число частиц можно получить, проинтегрировав еще по скоростям, $N(t) = \int d^3v \tilde{n}(\mathbf{v}, t)$, и как функция времени оно должно быть постоянным.

Проинтегрировав уравнение Больцмана, можно перейти к функции распределения $\tilde{n}(\mathbf{v}, t)$: (???? почему там второй член л.ч. зануляется??)

$$\frac{\partial \tilde{n}}{\partial t} = -\frac{\tilde{n} - \tilde{n}_0}{\tau}$$

Введем отклонение от равновесного распределения $\delta \tilde{n}(\mathbf{v}, t) = \tilde{n}(\mathbf{v}, t) - \tilde{n}_0(\mathbf{v})$, и, используя его, напишем решение:

$$\delta \tilde{n}(\mathbf{v}, t) = \delta \tilde{n}(\mathbf{v}, 0) e^{-t/\tau}$$

Таким образом, $\tilde{n}(\mathbf{v}, t)$ экспоненциально спадает до нуля с постоянной времени τ , поэтому общее число частиц экспоненциально уменьшается до N_0 .

Что физически не происходит, потому что при диффузии частицы пролетают вперед и их число меняется.

Модель Лоренца - Модифицирование уравнение Больцмана и его решения

Чтобы исправить эти нефизические расходимости, рассмотрим модифицированное уравнение Больцмана:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} = \frac{1}{\tau} \left[-f + \int \frac{d\hat{\mathbf{v}}}{4\pi} f \right].$$

Запишем его в форме

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} = \frac{1}{\tau} (\mathbb{P} - 1)f,$$

(????) где \mathbb{P} проекционный оператор на пространство изотропных функций \mathbf{v} , то есть он действует на любую функцию $F(\mathbf{v})$ как (???? потом мб пойму, пока не понятно)

$$\mathbb{P}F = \int \frac{d\hat{\mathbf{v}}}{4\pi} F(\mathbf{v})$$

Заметим, что $\mathbb{P}F$ это функция скорости $v = |\mathbf{v}|$.

это модель Лоренца.

В этой модели можно найти (???) $\partial_t \tilde{n} = 0$.

решение модели Лоренца с помощью преобразования Лапласа

Как и для многих дифференциальных уравнений, решаем его с помощью преобразования Фурье

$$\hat{f}(\mathbf{k}, \mathbf{v}, s) = \int_0^\infty dt e^{-st} \int d^3r e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$$

то есть проинтегрируем это уравнение, получаем: (???)

$$(s + i\mathbf{v} \cdot \mathbf{k} + \tau^{-1}) \hat{f}(\mathbf{k}, \mathbf{v}, s) = \tau^{-1} \mathbb{P} \hat{f}(\mathbf{k}, \mathbf{v}, s) + f(\mathbf{k}, \mathbf{v}, t = 0)$$

(?????)

Величина $\hat{f}(\mathbf{k}, \mathbf{v}, s)$ уже выражается:

$$\hat{f}(\mathbf{k}, \mathbf{v}, s) = \frac{\tau^{-1}}{s + i\mathbf{v} \cdot \mathbf{k} + \tau^{-1}} \mathbb{P} \hat{f}(\mathbf{k}, \mathbf{v}, s) + \frac{f(\mathbf{k}, \mathbf{v}, t = 0)}{s + i\mathbf{v} \cdot \mathbf{k} + \tau^{-1}},$$

и в ней осталось только найти $\mathbb{P} \hat{f}(\mathbf{k}, \mathbf{v}, s)$.

И подействуем \mathbb{P} , (???? тут оказывается, что двойное действие на себя такое же, как единичное, что супер странно, но потом подумаю)

$$\mathbb{P} \hat{f}(\mathbf{k}, \mathbf{v}, s) = \left[\int \frac{d\hat{\mathbf{v}}}{4\pi} \frac{\tau^{-1}}{s + i\mathbf{v} \cdot \mathbf{k} + \tau^{-1}} \right] \mathbb{P} \hat{f}(\mathbf{k}, \mathbf{v}, s) + \int \frac{d\hat{\mathbf{v}}}{4\pi} \frac{f(\mathbf{k}, \mathbf{v}, t = 0)}{s + i\mathbf{v} \cdot \mathbf{k} + \tau^{-1}}$$

теперь мы получаем (???? я тут просто не знаю, что это такое?)

$$\int \frac{d\hat{\mathbf{v}}}{4\pi} \frac{\tau^{-1}}{s + i\mathbf{v} \cdot \mathbf{k} + \tau^{-1}} = \int_{-1}^1 dx \frac{\tau^{-1}}{s + i v k x + \tau^{-1}} = \frac{1}{v k} \tan^{-1} \left(\frac{v k \tau}{1 + \tau s} \right).$$

Короче, абсолютно хз, как приходим, но пока что итог такой:

$$\mathbb{P} f(\mathbf{k}, \mathbf{v}, s) = \left[1 - \frac{1}{v k \tau} \tan^{-1} \left(\frac{v k \tau}{1 + \tau s} \right) \right]^{-1} \int \frac{d\hat{\mathbf{v}}}{4\pi} \frac{f(\mathbf{k}, \mathbf{v}, t = 0)}{s + i\mathbf{v} \cdot \mathbf{k} + \tau^{-1}}$$

Теперь можем записать решение Лоренцевой модификации уравнения Больцмана как:

$$\hat{f}(\mathbf{k}, \mathbf{v}, s) = \frac{\tau^{-1}}{s + i\mathbf{v} \cdot \mathbf{k} + \tau^{-1}} \left[1 - \frac{1}{v k \tau} \tan^{-1} \left(\frac{v k \tau}{1 + \tau s} \right) \right]^{-1} \int \frac{d\hat{\mathbf{v}}}{4\pi} \frac{f(\mathbf{k}, \mathbf{v}, t = 0)}{s + i\mathbf{v} \cdot \mathbf{k} + \tau^{-1}} + \frac{f(\mathbf{k}, \mathbf{v}, t = 0)}{s + i\mathbf{v} \cdot \mathbf{k} + \tau^{-1}}$$

случай простейших начальных условий

Посмотрим, как общее решение модели Лоренца

Теперь можем записать решение Лоренцевой модификации уравнения Больцмана как:

$$\hat{f}(\mathbf{k}, \mathbf{v}, s) = \frac{\tau^{-1}}{s + i\mathbf{v} \cdot \mathbf{k} + \tau^{-1}} \left[1 - \frac{1}{v k \tau} \tan^{-1} \left(\frac{v k \tau}{1 + \tau s} \right) \right]^{-1} \int \frac{d\hat{\mathbf{v}}}{4\pi} \frac{f(\mathbf{k}, \mathbf{v}, t = 0)}{s + i\mathbf{v} \cdot \mathbf{k} + \tau^{-1}} + \frac{f(\mathbf{k}, \mathbf{v}, t = 0)}{s + i\mathbf{v} \cdot \mathbf{k} + \tau^{-1}}$$

упрощается в простом случае.

(??) Простейший случай - локализация координаты r и скорости v :

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t = 0) = \delta(\mathbf{v} - \mathbf{v}_0)$$

С такой функцией распределения интеграл имеет вид:

$$\int \frac{d\hat{\mathbf{v}}}{4\pi} \frac{f(\mathbf{k}, \mathbf{v}, t = 0)}{s + i\mathbf{v} \cdot \mathbf{k} + \tau^{-1}} = \frac{1}{s + i\mathbf{v}_0 \cdot \mathbf{k} + \tau^{-1}} \cdot \frac{\delta(\mathbf{v} - \mathbf{v}_0)}{4\pi v_0^2}$$

Также можно разложить в ряд (?)

$$1 - \frac{1}{vk\tau} \tan^{-1} \left(\frac{vk\tau}{1 + \tau s} \right) = s\tau + \frac{1}{3}k^2v^2\tau^2 + \dots$$

Поэтому решение запишем

$$\hat{f}(\mathbf{k}, \mathbf{v}, s) = \frac{\tau^{-1}}{s + i\mathbf{v} \cdot \mathbf{k} + \tau^{-1}} \cdot \frac{\tau^{-1}}{s + i\mathbf{v}_0 \cdot \mathbf{k} + \tau^{-1}} \cdot \frac{1}{s + \frac{1}{3}v_0^2k^2\tau + \dots} \cdot \frac{\delta(v - v_0)}{4\pi v_0^2} + \frac{\delta(\mathbf{v} - \mathbf{v}_0)}{s + i\mathbf{v}_0 \cdot \mathbf{k} + \tau^{-1}} \quad (10.3)$$

Нам интересен предел больших времен $t \gg \tau$ for $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$.

(??) В таком случае преобладает $s \sim t^{-1}$, и примем, (???) что τ^{-1} преобладает над s и $i\mathbf{v} \cdot \mathbf{k}$.

Тогда первые множители становятся единицей, последнее слагаемое просто откидываем, а в знаменателе оставляем первые члены, в итоге функция распределения:

$$\hat{f}(\mathbf{k}, \mathbf{v}, s) \approx \frac{1}{s + \frac{1}{3}v_0^2k^2\tau} \cdot \frac{\delta(v - v_0)}{4\pi v_0^2}$$

(????!!! тут нужно сесть и проинтегрировать, вроде это просто, потом сделаю) Производя обратное преобразование Фурье, получаем:

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = (4\pi Dt)^{-3/2} e^{-r^2/4Dt} \cdot \frac{\delta(v - v_0)}{4\pi v_0^2}$$

где константа диффузии имеет вид:

$$D = \frac{1}{3}v_0^2\tau$$

Наша система единиц это $[D] = L^2/T$.

Для функции распределения нужно просто проинтегрировать по скоростям:

$$n(\mathbf{r}, t) = \int d^3v f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = (4\pi Dt)^{-3/2} e^{-r^2/4Dt}$$

Учтено, что $\int d^3r n(\mathbf{r}, t) = 1$ в любое время.

Полное число частиц сохраняется!

10.2 Термоэлектрические явления

Обсудим, как связаны электрические и тепловые явления в твердых телах.

10.2.1 основные уравнения и соотношения для термоэлектричества

по сути это главное и это всегда используем.

основные уравнения

$$\begin{aligned}\mathbf{J}_e &= \sigma \boldsymbol{\varepsilon} - \beta \nabla T, \\ \mathbf{J}_Q &= \chi \boldsymbol{\varepsilon} - \kappa \nabla T, \\ \Pi &= T\alpha\end{aligned}$$

они имеют вид:

$$\begin{aligned}\vec{J} &= e^2 K_0 \vec{\varepsilon} - \frac{e}{T} K_1 \vec{\nabla} T \\ \vec{J}_Q &= e K_1 \vec{\varepsilon} - \frac{1}{T} K_2 \vec{\nabla} T\end{aligned}$$

где вводятся $K_l = \frac{2}{(2\pi\hbar)^3} \frac{1}{3} \int d\vec{p} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon_j} \right) \tau_{\vec{p}} v^2 (\varepsilon_{\vec{p}} - \zeta)^l$, $l = 0, 1, 2$

Если вкратце, они получаются, расписывая по определению

$$\begin{aligned}\beta &= \frac{2e}{2\pi\hbar} \int d\varepsilon \frac{\varepsilon - \mu}{T} \left(-\frac{\partial}{\partial \varepsilon} f^{(0)} \right) \mathcal{T} \approx \frac{e}{T} K_1, \\ \chi &= \frac{2e}{2\pi\hbar} \int d\varepsilon (\varepsilon - \mu) \left(-\frac{\partial}{\partial \varepsilon} f^{(0)} \right) \mathcal{T} \approx e K_1 \\ \kappa &= \frac{2}{2\pi\hbar T} \int d\varepsilon (\varepsilon - \mu)^2 \left(-\frac{\partial}{\partial \varepsilon} f^{(0)} \right) \mathcal{T} = \frac{K_2}{T}\end{aligned}$$

кинетические коэффициенты в общем виде через функции K_l

в итоге они имеют вид:

$$\begin{aligned}\rho &= \frac{1}{e^2 K_0}, \quad \alpha = \frac{K_1}{e T K_0} \\ \tilde{\kappa} &= \frac{K_2 K_0 - K_1^2}{T K_0} \\ \mathbf{J}_e &= \sigma \boldsymbol{\varepsilon} - \beta \nabla T, \\ \mathbf{J}_Q &= \chi \boldsymbol{\varepsilon} - \kappa \nabla T \\ \boldsymbol{\varepsilon} &= \rho \mathbf{J}_e + \alpha \nabla T, \\ \mathbf{J}_Q &= \Pi \mathbf{J}_e - \tilde{\kappa} \nabla T, \\ \rho &= \sigma^{-1}, \alpha = \sigma^{-1} \beta, \\ \Pi &= \chi \rho = T\alpha, \\ \tilde{\kappa} &= \kappa - \chi \alpha = \kappa - \chi \beta / \sigma \\ \vec{J} &= e^2 K_0 \vec{\varepsilon} - \frac{e}{T} K_1 \vec{\nabla} T \\ \vec{J}_Q &= e K_1 \vec{\varepsilon} - \frac{1}{T} K_2 \vec{\nabla} T \\ \rho &= \frac{1}{e^2 K_0}, \quad \alpha = \frac{K_1}{e T K_0} \\ \tilde{\kappa} &= \frac{K_2 K_0 - K_1^2}{T K_0}\end{aligned}$$

упрощение выражений для K_l

для вычисления этих кинетических коэффициентов необходимо вычислить интегралы K_l .

оказывается, их можно более просто записать в виде:

действительно:

Переходя к интегрированию по энергии в формуле

$$K_l = \frac{2}{(2\pi\hbar)^3} \frac{1}{3} \int d\vec{p} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon_p} \right) \tau_{\vec{p}} v^2 (\varepsilon_p - \zeta)^l, \quad l = 0, 1, 2$$

после выполнения интегрирования по полярному и азимутальному углам в сферической системе координат имеем

$$K_l = \frac{2(2m)^{1/2}}{3\pi^2\hbar^3} \int_0^\infty d\varepsilon_{\vec{p}} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon_{\vec{p}}} \right) \tau_{\vec{p}} \varepsilon_{\vec{p}}^{3/2} (\varepsilon_{\vec{p}} - \zeta)^l$$

Интегралы по энергии, содержащие функцию Ферми или ее производные, могут быть сведены к так называемым интегралам Ферми $F_p(\zeta/k_B T)$ индекса p :

$$F_p \left(\frac{\zeta}{k_B T} \right) = \int_0^\infty \frac{x^p}{\exp(x - \zeta/k_B T) + 1} dx$$

$$-\frac{\partial f_0(\varepsilon_{\vec{p}} - \zeta)}{\partial \varepsilon_{\vec{p}}} \simeq \delta(\varepsilon_{\vec{p}} - \zeta)$$

В общем случае строится разложение подынтегральной функции по малому параметру kT/ζ .

Как правило, достаточно удержать два первых члена разложения

$$\int_0^\infty d\varepsilon_{\vec{p}} \Phi(\varepsilon_{\vec{p}}) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon_{\vec{p}}} \right) \simeq \Phi(\zeta) + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \frac{\partial^2 \Phi(\varepsilon_{\vec{p}})}{\partial \varepsilon_{\vec{p}}^2} \Big|_{\varepsilon_{\vec{p}}=\zeta} + \dots$$

Тогда, в случае сильного вырождения,

$$\int_0^\infty d\varepsilon_{\vec{p}} \Phi(\varepsilon_{\vec{p}}) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon_{\vec{p}}} \right) \simeq \Phi(\zeta) + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \frac{\partial^2 \Phi(\varepsilon_{\vec{p}})}{\partial \varepsilon_{\vec{p}}^2} \Big|_{\varepsilon_{\vec{p}}=\zeta} + \dots$$

$$K_l = \frac{2(2m)^{1/2}}{3\pi^2\hbar^3} \int_0^\infty d\varepsilon_{\vec{p}} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon_{\vec{p}}} \right) \tau_{\vec{p}} \varepsilon_{\vec{p}}^{3/2} (\varepsilon_{\vec{p}} - \zeta)^l$$

Получаем:

$$K_0 = \frac{n}{m} \tau_{\vec{p}}(\zeta),$$

$$K_1 = \frac{\pi^2}{3} \frac{n}{m} \frac{(k_B T)^2}{\zeta} \left[\zeta \frac{\partial \tau_{\vec{p}}(\zeta)}{\partial \zeta} + \frac{3}{2} \tau_{\vec{p}}(\zeta) \right]$$

$$K_2 = \frac{\pi^2}{3} (k_B T)^2 K_0$$

кинетические коэффициенты в нормальном виде

их итоговый вид:

$$\rho = \frac{m}{e^2 n \tau_{\vec{p}}(\zeta)}$$

$$\alpha = \sigma^{-1} \beta = \frac{\pi^2}{3e} \frac{T}{\zeta} \frac{\left[\zeta \frac{\partial \tau_{\vec{p}}(\zeta)}{\partial \zeta} + \frac{3}{2} \tau_{\vec{p}}(\zeta) \right]}{\tau_{\vec{p}}(\zeta)}$$

$$\tilde{\kappa} \approx \frac{\pi^2 \sigma}{3e^2} T = \kappa$$

действительно:

$$\rho = \frac{1}{e^2 K_0} = \frac{m}{e^2 n \tau_{\vec{p}}(\zeta)}$$

$$\alpha = \frac{K_1}{e T K_0} = \frac{\frac{\pi^2}{3} \frac{n}{m} \frac{T^2}{\zeta} \left[\zeta \frac{\partial \tau_{\vec{p}}(\zeta)}{\partial \zeta} + \frac{3}{2} \tau_{\vec{p}}(\zeta) \right]}{e T \frac{n \tau_{\vec{p}}(\zeta)}{m}} = \frac{\pi^2}{3e} \frac{T}{\zeta} \frac{\left[\zeta \frac{\partial \tau_{\vec{p}}(\zeta)}{\partial \zeta} + \frac{3}{2} \tau_{\vec{p}}(\zeta) \right]}{\tau_{\vec{p}}(\zeta)}$$

$$\tilde{\kappa} = \frac{K_2 K_0 - K_1^2}{T K_0} = \frac{K_2}{T} \left(1 - \frac{K_1^2}{K_2 K_0} \right) = \frac{\frac{\pi^2}{3} T^2 \sigma}{T e^2} \left(1 - \frac{K_1^2}{K_2 K_0} \right) \approx \frac{\pi^2 \sigma}{3 e^2} T = \kappa$$

посмотрим чуть подробнее на последнее:

$$\begin{aligned} \tilde{\kappa} &= \frac{K_2 K_0 - K_1^2}{T K_0} = \kappa \left(1 - \frac{K_1^2}{K_2 K_0} \right) = \kappa \left(1 - \frac{\left(\frac{\pi^2}{3} \frac{n}{m} \frac{T^2}{\zeta} \left[\zeta \frac{\partial \tau_{\bar{p}}(\zeta)}{\partial \zeta} + \frac{3}{2} \tau_{\bar{p}}(\zeta) \right] \right)^2}{\frac{\pi^2}{3} T^2 \left(\frac{n}{m} \tau_{\bar{p}}(\zeta) \right)^2} \right) = \\ &= \kappa \left(1 - \frac{\pi^2}{3} \frac{\left(\frac{T}{\zeta} \left[\zeta \frac{\partial \tau_{\bar{p}}(\zeta)}{\partial \zeta} + \frac{3}{2} \tau_{\bar{p}}(\zeta) \right] \right)^2}{(\tau_{\bar{p}}(\zeta))^2} \right) = \kappa \left(1 - \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{T}{\zeta} \right)^2 \left(\frac{\zeta \frac{\partial \tau_{\bar{p}}(\zeta)}{\partial \zeta} + \frac{3}{2} \tau_{\bar{p}}(\zeta)}{\tau_{\bar{p}}(\zeta)} \right)^2 \right) \end{aligned}$$

Но у нас всегда $T \ll \zeta$, так что действительно, приближение работает.

матрица кинетических коэффициентов

из них можно составить матрицу:

$$L_{ik}^{\alpha\alpha} = \begin{pmatrix} T\sigma & T^2\beta \\ T\chi & T^2\kappa \end{pmatrix}$$

где $\chi = T\beta$.

(тут я так и не понял, почему именно такой порядок, пока просто принимаю, что матрица такая)

Более явно:

$$L_{ik}^{\alpha\alpha} = \begin{pmatrix} T\sigma & T^2\beta \\ T\chi & T^2\kappa \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T\sigma_D & T^2\beta \\ T\chi & T^3 \frac{\pi^2 \sigma}{3e^2} \end{pmatrix}$$

$$\text{и } \chi = T\beta = \sigma_D \frac{\pi^2}{3e} \frac{T^2}{\zeta} \frac{\left[\zeta \frac{\partial \tau_{\bar{p}}(\zeta)}{\partial \zeta} + \frac{3}{2} \tau_{\bar{p}}(\zeta) \right]}{\tau_{\bar{p}}(\zeta)}$$

кинетические коэффициенты: тензорный вид

Щелкачев про это говорил, но это не актуально

другой вид обобщенных сил и потоков

Щелкачев про это говорил, но это не актуально

Об измерении коэффициента теплопроводности

Щелкачев про это говорил, но это не актуально

10.2.2 параметры и свойства

применение теоремы Онзагера

Итак, теорема Онзагера позволила получить важный результат:

$$\begin{aligned} \vec{I}_1^\alpha &= \mathbf{J}_e = \sigma \boldsymbol{\varepsilon} - \beta \nabla T \\ \vec{I}_2^\alpha &= \mathbf{J}_Q = \chi \boldsymbol{\varepsilon} - \kappa \nabla T \\ L_{ik}^{\alpha\alpha} &= \begin{pmatrix} T\sigma & T^2\beta \\ T\chi & T^2\kappa \end{pmatrix} \\ \chi &= T\beta \end{aligned}$$

устойчивость системы

Условие устойчивости системы имеет вид:

$$\begin{aligned}\sigma &> 0 \\ \kappa &> 0 \\ \tilde{\kappa} &= \kappa - \chi\beta/\sigma > 0.\end{aligned}$$

Критерий устойчивости системы: матрица кинетических коэффициентов должна быть положительно определенной –это гарантирует возрастание энтропии. Это первая часть теоремы Онзагера.

Критерий Сильвестра определяет, является ли симметричная квадратная матрица положительно определённой.

10.2.3 кинетические уравнения, их решения и свойства

уравнения Больцмана и получение сдвига функции распределения

Чтобы считать все кинетические параметры, необходимо найти поправку к функции распределения. Получим ее вид

$$\delta f = \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \tau \left\{ \frac{(\varepsilon - \mu)}{T} (\nabla T \cdot \mathbf{v}) + (\mathbf{v} \cdot \{\nabla \mu + e\mathbf{E}\}) \right\},$$

а также обсудим многое, что происходит.

Кинетическое уравнение для электронов имеет вид уравнения Больцмана

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \dot{\mathbf{p}} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} \equiv \frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} - e\mathbf{E} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = I_{\text{coll}}(f)$$

где учтено уравнение движения для нерелятивистских электронов $\dot{\mathbf{p}} = -e\mathbf{E}$ в постоянном электрическом поле.

Его стационарное, независящее от времени решение будем искать в виде $f(t, \mathbf{r}, \mathbf{p}) = f_0(\mathbf{r}, \mathbf{p}) + \delta f(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ по теории возмущений, связанной с учетом столкновений с примесями или фононами (т.е. по сути, в гидродинамическом режиме).

Тогда получим линеаризованное кинетическое уравнение

$$\mathbf{v} \cdot \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{r}} - e\mathbf{E} \cdot \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{p}} = I_{\text{col}}(f_0 + \delta f) \approx -\frac{\delta f}{\tau},$$

где интеграл столкновений записан в так называемом приближении времени релаксации, или в τ -приближении [$\tau \equiv \tau_{tr}(v) \equiv \tau_{tr}(\varepsilon)$], а функцию нулевого приближения (равновесную) будем считать в общем случае фермиевской,

$$f_0(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = 1 / (e^{(\varepsilon - \mu)/T} + 1) \equiv F((\varepsilon - \mu)/T),$$

которая переходит в больцмановскую при $|\mu|/T \gg 1$ причем здесь $\mu \equiv \mu(\mathbf{r})$, а $\varepsilon \equiv \varepsilon(\mathbf{p}) = p^2/(2m)$.

При этом,

$$\frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{p}} = \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \cdot \frac{\partial \varepsilon}{\partial \mathbf{p}} = \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}$$

$$\frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{r}} \equiv \nabla f_0 = \frac{\partial f_0}{\partial T} \nabla T + \frac{\partial f_0}{\partial \mu} \nabla \mu = -\frac{(\varepsilon - \mu)}{T} \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \nabla T - \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \nabla \mu = -\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \left(\nabla \mu + \frac{(\varepsilon - \mu)}{T} \nabla T \right)$$

причём в пределе $T \ll \varepsilon_F$ для металла $-\partial f_0/\partial \varepsilon \approx \delta(\varepsilon - \varepsilon_F)$, а в больцмановском пределе ($f_0 = e^{(\mu - \varepsilon)/T}$) для полупроводника имеем

$$-\partial f_0/\partial \varepsilon = f_0/T.$$

Таким образом, левая часть кинетического уравнения оказывается равной:

$$\text{л.ч.} = -\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \left\{ \frac{(\varepsilon - \mu)}{T} (\nabla T \cdot \mathbf{v}) + (\mathbf{v} \cdot \{\nabla \mu + e\mathbf{E}\}) \right\},$$

так что условия равновесия есть $\nabla T = 0$ и $\nabla \mu + e\mathbf{E} = 0$.

Поскольку $\mathbf{E} = -\nabla \varphi$, то в равновесии $\mu - e\varphi = \mu_0 = \text{const}$ и $\mu(\mathbf{r}) = e\varphi(\mathbf{r}) + \mu_0 = -U(\mathbf{r}) + \mu_0$, в соответствии с распределением Ферми (или Больцмана) во внешнем поле.

Здесь μ_0 - нормировочный химический потенциал (значение μ при $\varphi = 0$), $U = -e\varphi$ - потенциальная энергия электронов, φ - электрический потенциал.

Функция распределения (в том числе равновесная нормирована на общее число электронов обычным образом, $\int f \frac{2d^3p dV}{(2\pi\hbar)^3} = N$, так что $\mu_0 + e\varphi = \mu$, где $\mu(n, T)$ - известный химический потенциал электронного газа, определенный в отсутствие электрического поля как функция плотности электронов и температуры условием $\int f_0 \frac{2d^3p}{(2\pi\hbar)^3} = N/V \equiv n$.

В присутствии поля равновесная плотность электронов, так же как μ и φ есть функции координат, и только $\mu_0 = \text{const}$, так что в равновесии $\nabla \mu_0 = \nabla(\mu - e\varphi) = \nabla \mu + e\mathbf{E} = 0$, так же как и $\nabla T = 0$.

При отклонении от равновесия в присутствии тока электронов и потока их энергии, что будет учитываться поправкой к равновесной функции распределения, это будет уже не так, то есть уже может быть $\nabla \mu + e\mathbf{E} \neq 0$, так же как и $\nabla T \neq 0$.

Поправка к функции распределения в τ -приближении имеет очевидный вид

$$\delta f = \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \tau \left\{ \frac{(\varepsilon - \mu)}{T} (\nabla T \cdot \mathbf{v}) + (\mathbf{v} \cdot \{\nabla \mu + e\mathbf{E}\}) \right\}$$

Плотности тока \mathbf{j} и потока энергии \mathbf{q}

Плотности тока \mathbf{j} и потока энергии \mathbf{q} электронов с зарядом $(-e)$ определяются следующим образом:

$$\begin{aligned} \mathbf{j} &= -e \int \mathbf{v} f \frac{2d^3p}{(2\pi\hbar)^3} = -e \int \mathbf{v} \delta f \frac{2d^3p}{(2\pi\hbar)^3}, \\ \mathbf{q} &= \int \mathbf{v} (\varepsilon + U) f \frac{2d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \equiv \int \mathbf{v} (\varepsilon - e\varphi) f \frac{2d^3p}{(2\pi\hbar)^3} = \int \mathbf{v} (\varepsilon - e\varphi) \delta f \frac{2d^3p}{(2\pi\hbar)^3}. \end{aligned}$$

Сначала вычисляем \mathbf{j} , а потом \mathbf{q} :

$$\begin{aligned} \mathbf{j} &= e \int \frac{2d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \mathbf{v} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \tau \left[\frac{(\varepsilon - \mu)}{T} (\nabla T \cdot \mathbf{v}) + (\mathbf{v} \cdot \{\nabla \mu + e\mathbf{E}\}) \right] = \\ &= \frac{e}{3} (\nabla \mu + e\mathbf{E}) \int \tau v^2 \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \frac{2d^3p}{(2\pi\hbar)^3} + \frac{e}{3} \frac{\nabla T}{T} \int \tau v^2 (\varepsilon - \mu) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \frac{2d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \quad (10.4) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mathbf{q} &= - \int \frac{2d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \mathbf{v} (\varepsilon - e\varphi + \mu - \mu) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \tau \left[\frac{(\varepsilon - \mu)}{T} (\nabla T \cdot \mathbf{v}) + (\mathbf{v} \cdot \{\nabla \mu + e\mathbf{E}\}) \right] = \\ &= -\frac{\mathbf{j}}{e} (\mu - e\varphi) - \frac{(\nabla \mu + e\mathbf{E})}{3} \int \tau v^2 (\varepsilon - \mu) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \frac{2d^3p}{(2\pi\hbar)^3} - \frac{1}{3} \frac{\nabla T}{T} \int \tau v^2 (\varepsilon - \mu)^2 \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \frac{2d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \quad (10.5) \end{aligned}$$

Перепишем последнее соотношение, вычитая тривиальный конвективный перенос химпотенциала и потенциальной энергии $\mu - e\varphi \equiv \mu + U$, в виде

$$\mathbf{q}' = \mathbf{q} + \mathbf{j}(\mu - e\varphi)/e =$$

$$= -\frac{(\nabla\mu + e\mathbf{E})}{3} \int \tau v^2 (\varepsilon - \mu) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}\right) \frac{2d^3p}{(2\pi\hbar)^3} - \frac{1}{3} \frac{\nabla T}{T} \int \tau v^2 (\varepsilon - \mu)^2 \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}\right) \frac{2d^3p}{(2\pi\hbar)^3}$$

и введем обозначение

$$\langle F(\varepsilon) \rangle = \frac{m}{3n} \int \frac{2d^3p}{(2\pi\hbar)^3} v^2 \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}\right) F(\varepsilon) = \frac{2}{3n} \int_0^{+\infty} d\varepsilon \varepsilon g(\varepsilon) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}\right) F(\varepsilon),$$

где n - плотность электронов, так как при $g(\varepsilon) \propto \sqrt{\varepsilon}$ имеем $n = \frac{2}{3} \int_0^{+\infty} d\varepsilon \varepsilon g(\varepsilon) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}\right) = \int_0^{+\infty} d\varepsilon g(\varepsilon) f_0(\varepsilon)$.

Тогда получим, что

$$\mathbf{E} + \frac{\nabla\mu}{e} = \frac{m\mathbf{j}}{ne^2\langle\tau\rangle} - \frac{\nabla T}{eT} \frac{\langle(\varepsilon - \mu)\tau\rangle}{\langle\tau\rangle} \equiv \frac{\mathbf{j}}{\sigma} + \alpha \nabla T$$

$$\mathbf{q}' = -\frac{\langle(\varepsilon - \mu)\tau\rangle}{e\langle\tau\rangle} \mathbf{j} + \frac{\nabla T}{mT} \frac{n\langle(\varepsilon - \mu)\tau\rangle^2}{\langle\tau\rangle} - \frac{\nabla T}{mT} n\langle(\varepsilon - \mu)^2\tau\rangle \equiv \alpha T \mathbf{j} - \kappa \nabla T.$$

появление коэффициентов

Здесь коэффициенты проводимости σ , теплопроводности κ , и термоэлектрический коэффициент α (ответственный за эффекты Зеебека, Пельтье и Томсона) определены как

$$\sigma = \frac{ne^2\langle\tau\rangle}{m}, \quad \alpha = -\frac{\langle(\varepsilon - \mu)\tau\rangle}{eT\langle\tau\rangle}, \quad \kappa = \frac{n\langle\tau\rangle}{mT} \left[\frac{\langle(\varepsilon - \mu)^2\tau\rangle}{\langle\tau\rangle} - \frac{\langle(\varepsilon - \mu)\tau\rangle^2}{\langle\tau\rangle^2} \right]$$

Заметим, что $\frac{e^2\kappa}{T\sigma} = \frac{1}{T^2} \left[\frac{\langle(\varepsilon - \mu)^2\tau\rangle}{\langle\tau\rangle} - \frac{\langle(\varepsilon - \mu)\tau\rangle^2}{\langle\tau\rangle^2} \right] = L$, где L - число Лоренца, зависящее от вида зависимости $\tau(\varepsilon)$, а само это соотношение между коэффициентами проводимости и теплопроводности называется законом Видемана-Франца.

После преобразования можно получить, что

$$L = \frac{1}{T^2} \left[\mu^2 - 2\mu \frac{\langle\varepsilon\tau\rangle}{\langle\tau\rangle} + \frac{\langle\varepsilon^2\tau\rangle}{\langle\tau\rangle} - \mu^2 - \frac{\langle\varepsilon\tau\rangle^2}{\langle\tau\rangle^2} + 2\mu \frac{\langle\varepsilon\tau\rangle}{\langle\tau\rangle} \right] = \frac{1}{T^2} \left[\frac{\langle\varepsilon^2\tau\rangle}{\langle\tau\rangle} - \frac{\langle\varepsilon\tau\rangle^2}{\langle\tau\rangle^2} \right].$$

Проверка соотношений симметрии Онсагера

Потоковые соотношения можно записать в следующем симметричном виде:

$$\mathbf{j} = \sigma T \frac{\mathbf{E} + \nabla\mu/e}{T} + \underbrace{\alpha\sigma T^2}_{\text{}} \nabla \left(\frac{1}{T} \right),$$

$$\mathbf{q}' = \underbrace{\alpha\sigma T^2}_{\text{}} \frac{\mathbf{E} + \nabla\mu/e}{T} + (\alpha^2\sigma T^3 + \kappa T^2) \nabla \left(\frac{1}{T} \right).$$

Здесь равенство выделенных коэффициентов и отражает выполнение соотношений симметрии Онсагера в этих переменных.

Рассмотрим это подробнее и покажем, что эти переменные и есть в данном случае сопряженные переменные.

Пусть энтропия есть функция термодинамических переменных Y_1, Y_2, \dots, Y_n , то есть $S = S(Y_1, Y_2, \dots, Y_n)$, и пусть $X_i = -\partial S / \partial Y_i$ - сопряженные силы.

Тогда сопряженные потоки выражаются линейным образом (в линейном приближении!) через сопряженные силы:

$$\dot{Y}_i = - \sum_j L_{ij} X_j.$$

При этом должно быть

$$dS/dt = - \sum_i X_i \dot{Y}_i = \sum_{i,j} L_{ij} X_i X_j > 0.$$

Соотношения Онсагера утверждают, что для таких переменных

$$L_{ij} = L_{ji}.$$

В нашем случае

$$dE = TdS + (\mu + U)dN = TdS + (\mu - e\varphi)dN.$$

Для соответствующих плотностей

$$d\epsilon = Tds + (\mu - e\varphi)dn.$$

Тогда $ds = d\epsilon/T - (\mu - e\varphi)dn/T$, и

$$\frac{\partial s}{\partial t} = \frac{1}{T} \frac{\partial \epsilon}{\partial t} - \frac{(\mu - e\varphi)}{T} \frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{T} \frac{\partial \epsilon}{\partial t} + \frac{(\mu - e\varphi)}{eT} \frac{\partial \rho}{\partial t},$$

с $\rho = -en$.

Но $\partial \rho / \partial t + \text{div } \mathbf{j} = 0$, $\partial \epsilon / \partial t + \text{div } \mathbf{q} = 0$, где \mathbf{q} - поток полной энергии. Тогда

$$\begin{aligned} \frac{\partial s}{\partial t} &= - \frac{1}{T} \text{div } \mathbf{q} - \frac{(\mu - e\varphi)}{eT} \text{div } \mathbf{j} = - \text{div } \frac{\mathbf{q}}{T} + \mathbf{q} \nabla \frac{1}{T} - \text{div } \frac{(\mu - e\varphi) \mathbf{j}}{eT} + \frac{\mathbf{j}}{e} \nabla \frac{(\mu - e\varphi)}{T} \\ \frac{\partial s}{\partial t} + \text{div} \left[\frac{\mathbf{q} + \mathbf{j}(\mu - e\varphi)/e}{T} \right] &= \frac{\mathbf{j}}{T} (\mathbf{E} + \nabla \mu/e) + \{ \mathbf{q} + \mathbf{j}(\mu - e\varphi)/e \} \nabla \frac{1}{T} \\ \frac{\partial s}{\partial t} + \text{div} \frac{\mathbf{q}'}{T} &= \mathbf{j} \frac{(\mathbf{E} + \nabla \mu/e)}{T} + \mathbf{q}' \nabla \frac{1}{T} \end{aligned}$$

В результате мы имеем, что сопряженные потоки $\dot{Y}_1 = \mathbf{j}$, $\dot{Y}_2 = \mathbf{q}'$, сопряженные силы

$$X_1 = -(\mathbf{E} + \nabla \mu/e)/T,$$

$$X_2 = -\nabla(1/T),$$

$$\mathbf{j} = L_{11}(\mathbf{E} + \nabla \mu/e)/T + L_{12} \nabla(1/T),$$

$$\mathbf{q}' = L_{21}(\mathbf{E} + \nabla \mu/e)/T + L_{22} \nabla(1/T),$$

$$L_{11} = \sigma T, L_{22} = xT^2 + \sigma \alpha^2 T^3,$$

$$L_{12} = L_{21} = \alpha \sigma T^2$$

Вычисление кинетических коэффициентов в вырожденном электронном газе

Для электронов в металлах и полупроводниках

$$\frac{\partial f_0(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} = \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \frac{1}{e^{(\varepsilon-\mu)/T} + 1} = \frac{-e^{(\varepsilon-\mu)/T}}{T(e^{(\varepsilon-\mu)/T} + 1)^2} = -\frac{1}{4T \operatorname{ch}^2((\varepsilon - \mu)/(2T))}$$

и

$$g(\varepsilon) = \frac{\sqrt{2}m^{3/2}\sqrt{\varepsilon}}{\pi^2\hbar^3}.$$

В металлах при вычислении проводимости при $T \ll \varepsilon_F$ полагаем $\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \approx -\delta(\varepsilon - \mu)$, $\mu \approx \varepsilon_F$ и плотность состояний $g(\varepsilon_F) = \frac{mp_F}{\pi^2\hbar^3}$.

поэтому

$$\begin{aligned} \langle \tau(\varepsilon) \rangle &= \frac{2}{3n} \int_0^{+\infty} d\varepsilon \varepsilon g(\varepsilon) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \tau(\varepsilon) \approx \\ &\approx \frac{2}{3n} \int_0^{+\infty} d\varepsilon \varepsilon g(\varepsilon) \delta(\varepsilon - \mu) \tau(\varepsilon) \approx \frac{2\varepsilon_F g(\varepsilon_F) \tau(\varepsilon_F)}{3n} = \\ &= \frac{p_F^3}{3n\pi^2\hbar^3} \tau(\varepsilon_F) \equiv \tau(\varepsilon_F), \end{aligned}$$

и

$$\sigma = \frac{ne^2(\tau)}{m} \equiv \frac{ne^2\tau(\varepsilon_F)}{m}.$$

Теперь вычисляем термоэлектрический коэффициент α , введя функцию $\sigma(\varepsilon) = \frac{e^2 \cdot 2\varepsilon g(\varepsilon) \tau(\varepsilon)}{3m}$, так что $\sigma \equiv \sigma(\varepsilon_F)$:

$$\begin{aligned} \alpha &= -\frac{\langle (\varepsilon - \mu) \tau \rangle}{eT \langle \tau \rangle} = -\frac{ne}{m\sigma T} \langle (\varepsilon - \mu) \tau \rangle = \\ &= -\frac{2e}{3mT\sigma} \int_0^{+\infty} d\varepsilon \varepsilon g(\varepsilon) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) (\varepsilon - \mu) \tau(\varepsilon) = \\ &= -\frac{1}{eT\sigma} \int_0^{+\infty} (\varepsilon - \mu) \sigma(\varepsilon) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) d\varepsilon \approx \\ &\approx -\frac{1}{eT\sigma} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{(\varepsilon - \mu) (\sigma(\mu) + (\varepsilon - \mu) \frac{\partial \sigma}{\partial \varepsilon}|_{\varepsilon=\mu})}{4T \operatorname{ch}^2((\varepsilon - \mu)/(2T))} d\varepsilon \approx \\ &\approx -\frac{\partial \sigma / \partial \varepsilon_F}{eT\sigma} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{(\varepsilon - \mu)^2 d\varepsilon}{4T \operatorname{ch}^2[(\varepsilon - \mu)/(2T)]} = \\ &= -\frac{1}{4eT^2} \frac{\partial \ln \sigma}{\partial \varepsilon_F} \cdot \frac{\pi^2}{6} \cdot 8T^3 = -\frac{\pi^2 T}{3e} \frac{\partial \ln \sigma}{\partial \varepsilon_F} \sim \\ &\sim \frac{T}{e\varepsilon_F}. \end{aligned}$$

И, наконец, вычисляем коэффициент теплопроводности.

Выражение для него можно представить в виде

$$\begin{aligned}
 c\kappa + T\sigma\alpha^2 &= \frac{n\langle\tau\rangle}{mT} \frac{\langle(\varepsilon - \mu)^2\tau\rangle}{\langle\tau\rangle} = \\
 &= \frac{n}{mT} \frac{2}{3n} \int_0^{+\infty} d\varepsilon \varepsilon g(\varepsilon) (\varepsilon - \mu)^2 \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}\right) \tau(\varepsilon) = \\
 &= \frac{2}{3mT} \int_0^{+\infty} d\varepsilon \frac{(\varepsilon - \mu)^2 \varepsilon g(\varepsilon) \tau(\varepsilon)}{4T \operatorname{ch}^2((\varepsilon - \mu)/(2T))} = \\
 &= \frac{2\varepsilon_F g(\varepsilon_F) \tau(\varepsilon_F)}{12mT^2} \int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon \frac{(\varepsilon - \mu)^2}{\operatorname{ch}^2((\varepsilon - \mu)/(2T))} = \\
 &= \frac{2\varepsilon_F g(\varepsilon_F) \tau(\varepsilon_F)}{12mT^2} \cdot \frac{\pi^2}{6} \cdot 8T^3 = \\
 &= \frac{\sigma T \pi^2}{e^2} \frac{\pi^2}{3}
 \end{aligned}$$

Поскольку $\alpha^2 \sim (T/\varepsilon_F)^2/e^2$, то очевидно, что слагаемое $T\sigma\alpha^2$ в левой части много меньше, чем значение правой части.

Поэтому, в рамках точности вычислений этим слагаемым можно и нужно пренебречь.

И, следовательно, результат для коэффициента теплопроводности имеет простой вид:

$$\kappa \approx \frac{\sigma T \pi^2}{e^2} \frac{\pi^2}{3},$$

так что $\frac{e^2\kappa}{\sigma T} \approx \frac{\pi^2}{3}$, и число Лоренца $L = \pi^2/3$ в законе Видемана-Франца для вырожденного электронного газа.

10.2.4 термоэлектрические явления в полупроводниках

запросто можно применить все тот же выше формализм для полупроводников.

особенности полупроводников

В другом предельном случае невырожденного электронного газа, подчиняющегося статистике Максвелла - Больцмана, выполняются условия $\zeta < 0, |\zeta|/kT \gg 1$ и функция Ферми Дирака аппроксимируется выражением

$$f_0(\varepsilon_{\vec{p}}) = \exp\left(-\frac{\varepsilon_{\vec{p}} - \zeta}{k_B T}\right)$$

Рассмотрим вычисление интегралов

$$K_l = \frac{2}{(2\pi\hbar)^3} \frac{1}{3} \int d\vec{p} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon_{\vec{p}}}\right) \tau_{\vec{p}} v^2 (\varepsilon_{\vec{p}} - \zeta)^l, \quad l = 0, 1, 2$$

в этом пределе. получаем

$$\begin{aligned}
 K_0 &= \frac{2(2m)^{1/2} e^{\zeta/k_B T} (kT)^{3/2}}{3\pi^2 \hbar^3} \int_0^\infty dx e^{-x} x^{3/2} \tau_{\vec{p}}(x) = \\
 &= \frac{4n}{3\pi^{1/2} m} \int_0^\infty dx e^{-x} x^{3/2} \tau_{\vec{p}}(x) = \frac{n}{m} \langle \tau_{\vec{p}}(x) \rangle \\
 K_0 &= \frac{2(2m)^{1/2} e^{\zeta/k_B T} (k_D T)^{3/2}}{3\pi^2 \hbar^3} \int_0^\infty dx e^{-x} x^{3/2} \tau_{\vec{p}}(x) = \\
 &= \frac{4n}{3\pi^{1/2} m} \int_0^\infty dx e^{-x} x^{3/2} \tau_{\vec{p}}(x) = \frac{n}{m} \langle \tau_{\vec{p}}(x) \rangle
 \end{aligned}$$

где

$$\langle \tau_{\vec{p}}(x) \rangle = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \int_0^\infty dx e^{-x} x^{3/2} \tau_{\vec{p}}(x)$$

$$n = \frac{(2mk_{\text{D}}T)^{3/2}}{4\pi^{3/2}\hbar^3} e^{\zeta/k_{\text{B}}T}$$

Суммируя результаты, имеем

$$K_0 = \frac{n}{m} \langle \tau_{\vec{p}}(x) \rangle,$$

$$K_1 = \frac{n}{m} k_{\text{B}}T \langle \tau_{\vec{p}}(x) (x - \zeta/k_{\text{B}}T) \rangle$$

$$K_2 = \frac{n}{m} (kT)^2 \langle \tau_{\vec{p}}(x) (x - \zeta/k_{\text{D}}T)^2 \rangle.$$

Найдем выражения для интересующих нас кинетических коэффициентов. Для этого подставим значения интегралов K_l в определения (4.32). В результате получаем

$$\rho^{-1} = \sigma = \frac{e^2 n}{m} \langle \tau_{\vec{p}}(x) \rangle$$

$$\alpha = \frac{k}{e} \left(\frac{\langle \tau_{\vec{p}}(x)x \rangle}{\langle \tau_{\vec{p}}(x) \rangle} - \frac{\zeta}{k_{\text{B}}T} \right)$$

$$\tilde{\kappa} = \frac{n}{m} k_{\text{D}}^2 T \left(\langle \tau_{\vec{p}}(x)x^2 \rangle - \frac{\langle \tau_{\vec{p}}(x)x \rangle^2}{\langle \tau_{\vec{p}}(x) \rangle} \right)$$

средние $\langle \tau_{\vec{p}}(x)x^k \rangle$

Рассмотрим теперь средние $\langle \tau_{\vec{p}}(x)x^k \rangle$, входящие в выражения для кинетических коэффициентов выше.

оказывается, оно имеет вид:

$$\langle \tau_{\vec{p}}(x)x^k \rangle = \tau_0 \frac{\Gamma(r+k+5/2)}{\Gamma(5/2)}$$

докажем.

Учитывая определение (4.43) и обычно используемую аппроксимацию $\tau_{\vec{p}}(x) = \tau_0 x^r$, эти средние можно записать в виде отношения гамма-функций

$$\langle \tau_{\vec{p}}(x)x^k \rangle = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \int_0^\infty dx e^{-x} \tau_0 x^{r+k+3/2} = \tau_0 \frac{\Gamma(r+k+5/2)}{\Gamma(5/2)}$$

где $\Gamma(p)$ означает гамма-функцию, определенную обычным образом:

$$\Gamma(p) = \int_0^\infty dx e^{-x} x^{p-1}, \quad \Gamma(5/2) = \frac{3\sqrt{\pi}}{4}.$$

коэффициенты для полупроводника: итоговый вид

получаем в итоге:

$$\rho^{-1} = \sigma = \frac{e^2 n}{m} \tau_0 \frac{\Gamma(5/2+r)}{\Gamma(5/2)}$$

$$\alpha = \frac{k_{\text{B}}}{e} \left[\frac{5}{2} + r - \frac{\zeta}{k_{\text{B}}T} \right]$$

$$\tilde{\kappa} = \frac{n}{m} k_{\text{B}}^2 T \tau_0 \frac{\Gamma(5/2+r)}{\Gamma(5/2)} (5/2+r).$$

действительно:

$$\rho^{-1} = \sigma = \frac{e^2 n}{m} \langle \tau_{\bar{p}}(x) \rangle = \frac{e^2 n}{m} \tau_0 \frac{\Gamma(5/2 + r)}{\Gamma(5/2)}$$

$$\alpha = \frac{k_B}{e} \left(\frac{\langle \tau_{\bar{p}}(x)x \rangle}{\langle \tau_{\bar{p}}(x) \rangle} - \frac{\zeta}{k_B T} \right) = \frac{k}{e} \left[\frac{\Gamma(5/2 + r + 1)}{\Gamma(5/2 + r)} - \frac{\zeta}{k_B T} \right] = \frac{k_5}{e} \left[\frac{5}{2} + r - \frac{\zeta}{k_B T} \right]$$

$$\begin{aligned} \tilde{\kappa} &= \frac{n}{m} k_B^2 T \left(\langle \tau_{\bar{p}}(x)x^2 \rangle - \frac{\langle \tau_{\bar{p}}(x)x \rangle^2}{\langle \tau_{\bar{p}}(x) \rangle} \right) = \frac{n}{m} k_B^2 T \tau_0 \left[\frac{\Gamma(5/2 + r + 2)}{\Gamma(5/2)} - \frac{\Gamma(5/2 + r + 1)^2}{\Gamma(5/2 + r)\Gamma(5/2)} \right] = \\ &= \frac{n}{m} k_B^2 T \tau_0 \frac{\Gamma(5/2 + r)}{\Gamma(5/2)} (5/2 + r). \end{aligned}$$

где было использовано $\Gamma(p + 1) = p\Gamma(p)$.

кстати, важная формула

$$\tau_{\bar{p}}(x) = \tau_0 x^r$$

соотношение Видемана-Франца для полупроводника

соотношение Видемана-Франца для полупроводника имеет вид:

$$\tilde{\kappa} = \sigma T L, \quad L = \frac{k_E^2}{e^2} (5/2 + r).$$

Ведь у нас

$$\rho^{-1} = \sigma = \frac{e^2 n}{m} \tau_0 \frac{\Gamma(5/2 + r)}{\Gamma(5/2)}, \quad \tilde{\kappa} = \frac{n}{m} T \tau_0 \frac{\Gamma(5/2 + r)}{\Gamma(5/2)} (5/2 + r).$$

то есть постоянные Лоренца у нас меняются. Напомним, что было так

$$L = \frac{\pi^2}{3} \frac{k_B^2}{e^2} \text{ вырожденный газ}$$

$$L = \frac{k_B^2}{e^2} (5/2 + r) \text{ больцмановский газ}$$

То есть Постоянные Лоренца не такие уж и фундаментальные, не такие уж постоянные. Если начать греть вырожденный газ, переводя его в больцмановский, то постоянная Лоренца будет меняться от температуры.

случай дырочной проводимости

по сути пара дополнений

$$\alpha = \frac{k_5}{e} \left[\frac{5}{2} + r - \frac{\zeta}{k_B T} \right]$$

Отметим также, что фигурирующий в формуле (4.51) заряд электрона e - отрицательная величина и поэтому коэффициент α является отрицательной величиной, если носители заряда электроны. В случае дырочной проводимости выражение для коэффициента дифференциальной термоэдс (4.51) остается в силе, если величину e заменить на $|e|$ и вместо химического потенциала электронов ζ ввести химический потенциал дырки:

$$\zeta_p = -E_q - \zeta$$

Таким образом, если носителями заряда являются дырки, то коэффициент термоэдс имеет положительный знак, что может быть использовано на эксперименте для определения типа носителей заряда в кристалле.

10.2.5 эффект Зеебека

суть и главные формулы

$$\mathbf{J}_e = 0 \quad \nabla T \neq 0$$

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\varepsilon} &= \alpha \nabla T \\ \mathbf{J}_Q &= -\tilde{\kappa} \nabla T\end{aligned}$$

обзор применений

вывод

дополнения

10.2.6 эффект Пельтье

давно уже с ним знаком, доучу наконец уже!

суть и главные формулы

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\varepsilon} &= \rho \mathbf{J}_e \\ \mathbf{J}_Q &= \Pi \mathbf{J}_e\end{aligned}$$

ведь при ∇T из

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\varepsilon} &= \rho \mathbf{J}_e + \alpha \nabla T \\ \mathbf{J}_Q &= \Pi \mathbf{J}_e - \tilde{\kappa} \nabla T \\ \rho &= \sigma^{-1}, \quad \alpha = \sigma^{-1} \beta \\ \Pi &= \chi \rho = T \alpha \\ \tilde{\kappa} &= \kappa - \chi \alpha\end{aligned}$$

это получается

$$\frac{\partial Q(r, t)}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{J}_Q = \mathbf{J}_e \cdot \boldsymbol{\varepsilon}$$

обзор применений

вывод

дополнения

10.2.7 эффект Томаса

суть и главные формулы

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

обзор применений**вывод****дополнения****10.3 простейшие электрические явления****10.3.1 Magnetoresistance and Hall Effect****обзор магнитосопротивления**

ответим, что это такое?

и зачем он?

10.3.2 одномерное рассеяние и отражение

(подумаю позже, как это связано с кинетикой, мб этому место только в твердых телах и в квантмехе???)

определение транспортного сечения (?)**определение времени релаксации импульса (?)****обзор формулы Брукса-Херринга**

(??)

ее применимость: ...

(??)

общий алгоритм теории рассеяния

(тут вкратце суть прошлого параграфа будет)

матричный элемент из золотого правила Ферми

Вычислим время рассеяния τ из первых принципов, не ограничиваясь времени релаксации.

Посмотрим на рассеяние электронов от кристаллических примесей.

Интеграл столкновений записывается через золотое правило ферми (???!!!!) Начнем с золотого правила Ферми:

$$\mathcal{I}_k\{f\} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{k'} |\langle k' | \mathcal{U} | k \rangle|^2 (f_{k'} - f_k) \delta(\varepsilon(k) - \varepsilon(k'))$$

где $\mathcal{U}(r)$ это сумма по всем примесным потенциалам, (??? мб это так и можно записать, проверю, вставлю в дополнения)

$$\mathcal{U}(r) = \sum_{j=1}^{N_{\text{imp}}} U(r - R_j)$$

$$|\langle k' | \mathcal{U} | k \rangle|^2 = V^{-2} \left| \hat{U}(k - k') \right|^2 \cdot \left| \sum_{j=1}^{N_{\text{imp}}} e^{i(k-k') \cdot R_j} \right|^2$$

где V это полный объем твердого тела и $\hat{U}(\mathbf{q}) = \int d^3r U(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}}$ это преобразование Фурье примесного потенциала.

Обратите внимание, что мы предполагаем один вид примесей; Но метод может быть обобщен для учета различных видов примесей, просто так мы не будем рассматривать (?).

Предположим, что позиции примесей случайны и некоррелированы, и мы усредняем их.

Используя выражение, (как его доказать???)

$$\left| \sum_{j=1}^{N_{\text{imp}}} e^{iq \cdot \mathbf{R}_j} \right|^2 = N_{\text{imp}} + N_{\text{imp}} (N_{\text{imp}} - 1) \delta_{\mathbf{q},0}$$

мы получим (???)

$$\overline{|\langle k' | \mathcal{U} | k \rangle|^2} = \frac{N_{\text{imp}}}{V^2} \left| \hat{U}(k - k') \right|^2 + \frac{N_{\text{imp}} (N_{\text{imp}} - 1)}{V^2} |\hat{U}(0)|^2 \delta_{kk'}$$

Пренебрежем вторым членом в этом уравнении, потому что позже мы увидим, что он все равно сократился бы. (???)

интеграл столкновений

Подставим $f = f^0 + \delta f$, в итоге мы имеем:

$$\mathcal{I}_k \{f\} = \frac{2\pi n_{\text{imp}}}{\hbar} \int_{\hat{\Omega}} \frac{d^3 k'}{(2\pi)^3} \left| \hat{U}(k - k') \right|^2 \delta \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} - \frac{\hbar^2 k'^2}{2m^*} \right) (\delta f_{k'} - \delta f_k)$$

где $n_{\text{imp}} = N_{\text{imp}}/V$ плотность числа примесей.

(??? кст, а там дельта функцию никак изменить нельзя?)

Далее создадим анзатц (что?) то есть наверное изменение функции распределения можно записать таким образом: (???????)

$$\delta f_k = \tau(\varepsilon(k)) e\mathcal{E} \cdot v(k) \frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon} \Big|_{\varepsilon(k)}$$

и будем решать для $\tau(\varepsilon(k))$.

уравнение Больцмана

Уравнение Больцмана через интеграл столкновений имеет вид (????) (правая часть - подставили выше, а вот в левой почему только такое осталось - подумаю потом)

$$\begin{aligned} -e\mathcal{E} \cdot v(k) \frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon} &= \frac{2\pi}{\hbar} n_{\text{imp}} e\mathcal{E} \cdot \int_{\hat{\Omega}} \frac{d^3 k'}{(2\pi)^3} \left| \hat{U}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \right|^2 \delta \left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m^*} - \frac{\hbar^2 \mathbf{k}'^2}{2m^*} \right) \times \\ &\times \left(\tau(\varepsilon(\mathbf{k}')) v(\mathbf{k}') \frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon} \Big|_{\varepsilon(\mathbf{k}')} - \tau(\varepsilon(\mathbf{k})) v(\mathbf{k}) \frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon} \Big|_{\varepsilon(\mathbf{k})} \right) \quad (10.6) \end{aligned}$$

За счет изотропии задачи, мы должны иметь $\tau(\varepsilon(k))$ функцией только величины k .

Заменим дельта функцию от сложной функцией известной формулой, сократим лишнее, (что-то там с интегрированием странное происходит, посмотрю потом) (еще там почему-то тау вынеслось...???)

$$\frac{\hbar k}{m^*} = \frac{n_{\text{imp}}}{4\pi^2 \hbar} \tau(\varepsilon(\mathbf{k})) \int_0^\infty dk' k'^2 \int d\hat{\mathbf{k}}' \left| \hat{U}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \right|^2 \frac{\delta(k - k')}{\hbar^2 k/m^*} \frac{\hbar}{m^*} (\mathbf{k} - \mathbf{k}')$$

(???? переход к времени, импульсу ферми я просто не знаю, хз, как это???) откуда

$$\frac{1}{\tau(\varepsilon_F)} = \frac{m^* k_F n_{\text{imp}}}{4\pi^2 \hbar^3} \int d\hat{\mathbf{k}}' \left| U(k_F \hat{\mathbf{k}} - k_F \hat{\mathbf{k}}') \right|^2 (1 - \hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{k}}')$$

Если потенциал примеси $U(r)$ сам по себе изотропный, то его преобразование Фурье $\hat{U}(q)$ есть функция от $q^2 = 4k_F^2 \sin^2 \frac{1}{2}\vartheta$ где $\cos \vartheta = \hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{k}}'$ и $q = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$ это волновой вектор переброса.

Вспомним Борновское приближение для дифференциального сечения рассеяния:

$$\sigma(\vartheta) = \left(\frac{m^*}{2\pi \hbar^2} \right)^2 \left| \hat{U}(k - k') \right|^2$$

(????) так что теперь можем записать

$$\frac{1}{\tau(\varepsilon_F)} = 2\pi n_{\text{imp}} v_F \int_0^\pi d\vartheta \sigma_F(\vartheta) (1 - \cos \vartheta) \sin \vartheta$$

где $v_F = \hbar k_F / m^*$ это скорость Ферми.

Длина свободного пробега определяется как $\ell = v_F \tau$.

Заметим, что фактор $(1 - \cos \vartheta)$ говорит нам о том, что прямое рассеяние ($\vartheta = 0$) не вносит вклада в вероятность рассеяния (???), что оправдывает наше пренебрежение вторым членом в уравнении. (1.82). (????!!!)

транспортное время (???) не чувствительно к прямом рассеянию

Величина τ должен быть совершенно нечувствителен к прямому рассеянию.

Потому что $\tau(\varepsilon_F)$ - это транспортное время, и прямое рассеяние не уменьшает ток. (???)

Поэтому $\sigma(\vartheta = 0)$ не вносит вклада в "скорость транспортного рассеяния" $\tau^{-1}(\varepsilon_F)$.

Часто в литературе встречается ссылка и на "время жизни одной частицы", которое дается тем же выражением, но без этого фактора:

$$\left\{ \begin{array}{c} \tau_{\text{sp}}^{-1} \\ \tau_{\text{tr}}^{-1} \end{array} \right\} = 2\pi n_{\text{imp}} v_F \int_0^\pi d\vartheta \sigma_F(\vartheta) \left\{ \begin{array}{c} 1 \\ (1 - \cos \vartheta) \end{array} \right\} \sin \vartheta$$

Заметим, что $\tau_{\text{sp}} = (n_{\text{imp}} v_F \sigma_{F, \text{tot}})^{-1}$, где $\sigma_{F, \text{tot}}$ это общее сечение рассеяния на энергии ε_F , a formula familiar from elementary kinetic theory.

To derive the single particle lifetime, one can examine the linearized time-dependent Boltz - mann equation with $\mathcal{E} = 0$

$$\frac{\partial \delta f_k}{\partial t} = n_{\text{imp}} v_F \int d\hat{\mathbf{k}}' \sigma(\vartheta_{\mathbf{k}\mathbf{k}}') (\delta f_{\mathbf{k}'} - \delta f_{\mathbf{k}}),$$

where $v = \hbar k / m^*$ is the velocity, and where the kernel is $\vartheta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \cos^{-1}(\hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{k}}')$.

We now expand in spherical harmonics, writing

$$\sigma(\vartheta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}) \equiv \sigma_{\text{tot}} \sum_{L,M} \nu_L Y_{LM}(\hat{\mathbf{k}}) Y_{LM}^*(\hat{\mathbf{k}}')$$

where as before

$$\sigma_{\text{tot}} = 2\pi \int_0^\pi d\vartheta \sin \vartheta \sigma(\vartheta).$$

Expanding

$$\delta f_k(t) = \sum_{L,M} A_{LM}(t) Y_{LM}(\hat{k})$$

the linearized Boltzmann equation simplifies to

$$\frac{\partial A_{LM}}{\partial t} + (1 - \nu_L) n_{\text{imp}} v_F \sigma_{\text{tot}} A_{LM} = 0$$

whence one obtains a hierarchy of relaxation rates,

$$\tau_L^{-1} = (1 - \nu_L) n_{\text{imp}} v_F \sigma_{\text{tot}}$$

which depend only on the total angular momentum quantum number L .

These rates describe the relaxation of nonuniform distributions, when $\delta f_k(t=0)$ is proportional to some spherical harmonic $Y_{LM}(k)$.

Note that $\tau_{L=0}^{-1} = 0$, which reflects the fact that the total particle number is a collisional invariant.

The single particle lifetime is identified as

$$\tau_{\text{sp}}^{-1} \equiv \tau_{L \rightarrow \infty}^{-1} = n_{\text{imp}} v_F \sigma_{\text{tot}}$$

corresponding to a point distortion of the uniform distribution.

10.3.3 Рассеяние электронов с учетом экранировки (???)

задача 3 дз

удельное сопротивление

Покажем, что и удельное сопротивление имеет вид:

$$\rho = \frac{m}{ne^2 \tau_{\text{tr}}} = Z^2 R_q a_B \frac{n_{\text{imp}}}{n} F(\zeta).$$

экранирование и транспортное время: обзор

Сечение $\sigma_F(\vartheta)$ для кулоновской примеси $U(r) = -Ze^2/r$, можно найти, приходя к $\hat{U}(q) = -4\pi Ze^2/q^2$ (?? пропишу это позже)

Следовательно (??),

$$\sigma_F(\vartheta) = \left(\frac{Ze^2}{4\epsilon_F \sin^2 \frac{1}{2}\vartheta} \right)^2$$

и имеется сильная расходимость при $\vartheta \rightarrow 0$, как $\sigma_F(\vartheta) \propto \vartheta^{-4}$.

Транспортное время возрастает логарифмически (?)

Покажем, что пошло не так.

Дело в том, что мы не приняли во внимание экранирование.

Свободные заряды перераспределяются так, чтобы экранировать потенциал примесного атома.

На больших расстояниях эффективный (экранированный) потенциал убывает экспоненциально, а не как $1/r$.

Потенциал экранирования имеет юкавский вид, и его увеличение при малых q обрывается на масштабах обратной длины экранирования λ^{-1} .

Существует два типа экранирования: Томаса-Ферми и Дебая-Хюккеля

экранирование Томаса-Ферми

экранирование Томаса-Ферми это типичный механизм экранирования в металлах. Длина рассеяния Томаса-Ферми имеет вид:

$$\lambda_{\text{TF}} = (4\pi e^2 g(\varepsilon_F))^{-1/2}$$

Слабый локальный электростатический потенциал $\phi(r)$ вызовет изменение локальной электронной плотности согласно $\delta n(r) = e\phi(r)g(\varepsilon_F)$, где $g(\varepsilon_F)$ это плотность состояний на уровне Ферми.

Этот дисбаланс зарядов снова связан с $\phi(r)$ через уравнение Пуассона.

Результатом является самосогласованное уравнение для $\phi(r)$,

$$\begin{aligned}\nabla^2 \phi &= 4\pi e \delta n \\ &= 4\pi e^2 g(\varepsilon_F) \phi \equiv \lambda_{\text{TF}}^{-2} \phi\end{aligned}$$

Поэтому длина рассеяния Томаса-Ферми имеет вид:

$$\lambda_{\text{TF}} = (4\pi e^2 g(\varepsilon_F))^{-1/2}$$

(и что?)

экранирование Дебая-Хюккеля

Экранирование Дебая-Хюккеля типичен для ионных решений, и длина экранирования Дебая-Хюккеля равна

$$\lambda_{\text{DH}} = \sqrt{\frac{k_B T}{4\pi n e^2}}$$

This mechanism is typical of ionic solutions, although it may also be of relevance in solids with ultra-low Fermi energies.

Из классической статистической механики известно, что локальная вариация величины плотности электронов, вызванная за счет потенциала $\phi(r)$ равна

$$\delta n(r) = n e^{e\phi(r)/k_B T} - n \approx \frac{n e \phi(r)}{k_B T}$$

where we assume the potential is weak on the scale of $k_B T/e$.

Теперь уравнение Пуассона имеет вид:

$$\begin{aligned}\nabla^2 \phi &= 4\pi e \delta n \\ &= \frac{4\pi n e^2}{k_B T} \phi \equiv \lambda_{\text{DH}}^{-2} \phi\end{aligned}$$

то есть длина экранирования Дебая-Хюккеля равна

$$\lambda_{\text{DH}} = \sqrt{\frac{k_B T}{4\pi n e^2}}$$

дифференциальное сечение, транспортное время, сопротивление

(???) Теперь уравнение Пуассона имеет вид:

$$\nabla^2 \phi = \lambda^{-2} \phi - 4\pi Z e \delta(r)$$

Решением является так называемый потенциал Юкавы

$$U(r) = -e\phi(r) = -\frac{Ze^2}{r}e^{-r/\lambda} \implies \hat{U}(q) = \frac{4\pi Ze^2}{q^2 + \lambda^{-2}}$$

(??)

теперь дифференциальное сечение рассеяния имеет вид:

$$\sigma_F(\vartheta) = \left(\frac{Ze^2}{4\varepsilon_F} \cdot \frac{1}{\sin^2 \frac{1}{2}\vartheta + (2k_F\lambda)^{-2}} \right)^2$$

и расхождение при малых углах исчезло.

Транспортное время для кулоновского рассеяния теперь имеет вид:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau(\varepsilon_F)} &= 2\pi n_{\text{imp}} v_F \left(\frac{Ze^2}{4\varepsilon_F} \right)^2 \int_0^\pi d\vartheta \sin \vartheta (1 - \cos \vartheta) \left(\frac{1}{\sin^2 \frac{1}{2}\vartheta + (2k_F\lambda)^{-2}} \right)^2 \\ &= 2\pi n_{\text{imp}} v_F \left(\frac{Ze^2}{2\varepsilon_F} \right)^2 \left\{ \ln(1 + \pi\zeta) - \frac{\pi\zeta}{1 + \pi\zeta} \right\} \end{aligned}$$

где

$$\zeta = \frac{4}{\pi} k_F^2 \lambda^2 = \frac{\hbar^2 k_F}{m^* e^2} = k_p a_B^*$$

Здесь $a_B^* = \epsilon_\infty \hbar^2 / m^* e^2$ это эффективный Боровский радиус (в этом выражении мы восстановили фактор ϵ_∞).

Поэтому сопротивление имеет вид:

$$\rho = \frac{m^*}{ne^2\tau} = Z^2 \frac{\hbar}{e^2} a_B^* \frac{n_{\text{imp}}}{n} F(k_F a_B^*)$$

где определим функцию $F(\zeta) = \frac{1}{\zeta^3} \left\{ \ln(1 + \pi\zeta) - \frac{\pi\zeta}{1 + \pi\zeta} \right\}$.

При $\hbar/e^2 = 25,813\Omega$ и $a_B^* \approx a_B = 0.529 \text{ \AA}$, имеется значение:

$$\rho = 1.37 \times 10^{-4} \Omega \cdot \text{cm} \times Z^2 \frac{n_{\text{imp}}}{n} F(k_F a_B^*)$$

(тут таблица и график, потом из посмотрю)

10.3.4 Эффект Холла в сильных полях

ток электронов из уравнения Больцмана

In the high field limit, one may neglect the collision integral entirely, and write (at $\omega = 0$)

$$-e\mathbf{v} \cdot \mathcal{E} \frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon} - \frac{e}{\hbar c} \mathbf{v} \times \mathbf{B} \cdot \frac{\partial \delta f}{d\mathbf{k}} = 0$$

We'll consider the case of electrons, and take $\mathcal{E} = \mathcal{E}\hat{y}$ and $B = B\hat{z}$, in which case the solution is

$$\delta f = \frac{\hbar c \mathcal{E}}{B} k_x \frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon}$$

Note that k_x is not a smooth single-valued function over the Brillouin-zone due to Bloch periodicity.

This treatment, then, will make sense only if the derivative $\partial f^0 / \partial \varepsilon$ confines k to a closed orbit within the first Brillouin zone.

In this case, we have

$$\begin{aligned} j_x &= 2ec \frac{\mathcal{E}}{B} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} k_x \frac{\partial \varepsilon}{\partial k_x} \frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon} \\ &= 2ec \frac{\mathcal{E}}{B} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} k_x \frac{\partial f^0}{\partial k_x} \end{aligned}$$

Now we may integrate by parts, if we assume that f^0 vanishes on the boundary of the Brillouin zone.

We obtain

$$j_x = -\frac{2ec\mathcal{E}}{B} \int_{\Omega} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} f^0 = -\frac{nec}{B} \mathcal{E}$$

В итоге имеем

$$\sigma_{xy} = -\sigma_{yx} = -\frac{nec}{B}$$

независимую от зонной структуры.

"Open orbits"- trajectories along Fermi surfaces which cross Brillouin zone boundaries and return in another zone - post a subtler problem, and generally lead to a finite, non-saturating magnetoresistance.

дырки

For holes, we have $\bar{f}^0 = 1 - f^0$ and

$$j_x = -\frac{2ec\mathcal{E}}{B} \int_{\Omega} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} k_x \frac{\partial \bar{f}^0}{\partial k_x} = +\frac{nec}{B} \mathcal{E}$$

and $\sigma_{xy} = +nec/B$, where n is the hole density.

We define the Hall coefficient

$$R_H = -\rho_{xy}/B$$

and the Hall number

$$z_H \equiv -\frac{1}{n_{\text{ion}} ec R_H}$$

where n_{ion} is the ion density.

For high fields, the off-diagonal elements of both $\rho_{\alpha\beta}$ and $\sigma_{\alpha\beta}$ are negligible, and $\rho_{xy} = -\sigma_{xy}$.

Hence $R_H = \mp 1/nec$, and $z_H = \pm n/n_{\text{ion}}$.

The high field Hall coefficient is used to determine both the carrier density as well as the sign of the charge carriers; z_H is a measure of valency.

(???)

In Al, the high field Hall coefficient saturates at $z_H = -1$.

Why is z_H negative? As it turns out, aluminum has both electron and hole bands.

Its valence is 3 ; two electrons go into a filled band, leaving one valence electron to split between the electron and hole bands.

Thus $n = 3n_{\text{ion}}$.

The Hall conductivity is

$$\sigma_{xy} = (n_h - n_e) ec/B$$

разница между концентрациями дырок и электронов

The difference $n_h - n_e$ is determined by the following argument.

The electron density in the hole band is $n'_e = 2n_{\text{ion}} - n_h$, i.e. the total density of levels in the band (two states per unit cell) minus the number of empty levels in which there are holes.

Thus,

$$n_h - n_e = 2n_{\text{ion}} - (n_e + n'_e) = n_{\text{ion}}$$

where we've invoked $n_e + n'_e = n_{\text{ion}}$, since precisely one electron from each ion is shared between the two partially filled bands.

Thus, $\sigma_{xy} = n_{\text{ion}} ec/B = nec/3B$ and $z_H = -1$.

At lower fields, $z_H = +3$ is observed, which is what one would expect from the free electron model.

Interband scattering, which is suppressed at high fields, leads to this result.

10.3.5 Остаточное сопротивление

(?)

10.4 Фононы по Фоминову

10.4.1 ФОНОННЫЙ СПЕКТР

I. ПРИБЛИЖЕНИЯ

В первой части курса речь пойдёт о фононах (т.е. о колебаниях атомов) в кристаллах. Понятие фонона введено И.Е. Таммом в 1932 г.

В нашем рассмотрении будут использоваться следующие важные приближения:

1. Адиабатика: $m_{\text{электрона}} \ll M_{\text{ядра}}$ (хорошо выполняется). После усреднения по быстрым (электронным) степеням свободы остаётся энергия взаимодействия атомов, зависящая от координат атомов: $U = U(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$. Энергия связи имеет «атомный» масштаб, т.е. $E_{\text{св}} \sim 1$ эВ.
2. Гармоническое приближение (выполняется хуже, позже мы будем обсуждать отклонения от этого приближения, которые тем не менее будут считаться слабыми). $u \ll a$ — малые отклонения атомов от положений равновесия \mathbf{r}_j . Здесь $\mathbf{u} = \mathbf{r} - \mathbf{r}_j$, a — межатомное расстояние.

$u = u_{\mathbf{R},j,\alpha}$, где \mathbf{R} — номер ячейки, j — номер атома в ячейке, $\alpha = x, y, z$ — компонента вектора отклонения. Для краткости будем иногда обозначать набор индексов одной буквой: $\lambda = (\mathbf{R}, j, \alpha) = (\mathbf{R}, \gamma)$, где $\gamma = (j, \alpha)$.

Гармоническое приближение (в целом неплохо работает вплоть до точки плавления):

$$U = \frac{1}{2} \sum_{\lambda, \lambda'} D_{\lambda\lambda'} u_{\lambda} u_{\lambda'}, \quad D \sim \frac{E_{\text{св}}}{a^2}.$$

Коэффициенты $D_{\lambda\lambda'}$ — силовые постоянные. Симметрия: $D_{\lambda\lambda'} = D_{\lambda'\lambda}$.

Динамическая матрица и дисперсионное уравнение.

$\omega(\mathbf{k})$ — спектр. Всего в кристалле есть $3p$ ветвей фононного спектра, где p — число атомов в элементарной ячейке.

Кинетическая энергия движения атомов:

$$K = \frac{1}{2} \sum_{\lambda} m_j \dot{u}_{\lambda}^2$$

Уравнение движения:

$$m_j \ddot{u}_\lambda = - \sum_{\lambda'} D_{\lambda\lambda'} u_{\lambda'}$$

Для $u_\lambda(t) = e^{-i\omega t} u_\lambda$ получаем

$$m_j \omega^2 u_\lambda = \sum_{\lambda'} D_{\lambda\lambda'} u_{\lambda'}$$

Для $u_{\mathbf{R},j,\alpha} = e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} e_{j,\alpha}$ получаем

$$m_j \omega^2 e_\gamma = \sum_{\mathbf{R}', \gamma'} D_{\mathbf{R}, \gamma, \mathbf{R}', \gamma'} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}' - \mathbf{R})} e_{\gamma'}$$

Учтём трансляционную инвариантность:

$$D_{\mathbf{R}, \gamma, \mathbf{R}', \gamma'} = D_{\gamma\gamma'}(\mathbf{R} - \mathbf{R}')$$

Тогда определяя динамическую матрицу (фурье-образ матрицы силовых постоянных)

$$\hat{\mathcal{D}}_{\gamma\gamma'}(\mathbf{k}) = \sum_{\boldsymbol{\rho}} e^{-i\mathbf{k}\boldsymbol{\rho}} D_{\gamma\gamma'}(\boldsymbol{\rho})$$

можем записать (2.4) в виде

$$m_j \omega^2 e_\gamma = \sum_{\gamma'} \hat{\mathcal{D}}_{\gamma\gamma'}(\mathbf{k}) e_{\gamma'}$$

Сделаем замену $x_\gamma = \sqrt{m_j} e_\gamma$, тогда уравнение движения принимает вид

$$\omega^2 x_\gamma = \sum_{\gamma'} \frac{\hat{\mathcal{D}}_{\gamma\gamma'}(\mathbf{k})}{\sqrt{m_j m_{j'}}} x_{\gamma'}.$$

Матрица в правой части имеет размер $3p \times 3p$, и ω^2 — её собственные числа.

Итак, мы получили дисперсионное уравнение:

$$\left| \omega^2 \delta_{\gamma\gamma'} - \frac{\hat{\mathcal{D}}_{\gamma\gamma'}(\mathbf{k})}{\sqrt{m_j m_{j'}}} \right| = 0.$$

При заданном \mathbf{k} это алгебраическое уравнение степени $3p$ относительно ω^2 . Разные решения — разные ветви спектра. В. Длинноволновый предел ($k \rightarrow 0$). Акустические и оптические моды.

U инвариантно относительно однородного сдвига $u_{\mathbf{R},j,\alpha} \mapsto u_{\mathbf{R},j,\alpha} + v_\alpha$. Соответствующая мода имеет нулевую энергию.

Теорема Голдстоуна утверждает, что если при некотором однородном преобразовании энергия не меняется, то этому преобразованию соответствует мягкая мода ($\omega \rightarrow 0$ при $\mathbf{k} \rightarrow 0$).

На языке матрицы силовых постоянных трансляционная инвариантность означает, что

$$\sum_{\mathbf{R}', j'} D_{\mathbf{R}, j, \alpha, \mathbf{R}', j', \alpha'} = \sum_{\boldsymbol{\rho}, j'} D_{(j, \alpha)(j', \alpha')}(\boldsymbol{\rho}) = 0$$

Вспоминая определение динамической матрицы (2.6), получаем

$$\sum_{j'} \hat{\mathcal{D}}_{(j, \alpha)(j', \alpha')}(0) = 0$$

Вспоминая уравнения движения

$$m_j \omega^2 e_{j\alpha} = \sum_{j'\alpha'} \hat{D}_{(j\alpha)(j'\alpha')}(\mathbf{k}) e_{j'\alpha'}$$

и полагая в них $\mathbf{k} = 0$ и $e_{j\alpha} = v_\alpha$, видим, что $\omega = 0$ является собственным значением. Таким образом, мы убедились, что теорема Голдстоуна выполняется.

Можно получить более общий результат, не предполагая, что сдвиг обязательно однородный (т.е., что \mathbf{e}_j не зависит от j): положив в 2.12 $\mathbf{k} = 0$ и просуммировав по j , получаем

$$\omega^2(0) \sum_j m_j \mathbf{e}_j = 0.$$

Поэтому в целом при $\mathbf{k} \rightarrow 0$ есть две возможности: либо $\omega(0) = 0$, либо $\sum_j m_j \mathbf{e}_j = 0$. Первый случай - акустические (или звуковые) колебания (все атомы одной элементарной ячейки колеблются в фазе), второй - оптические (атомы одной элементарной ячейки колеблются так, что центр тяжести ячейки остаётся в покое). Ну оптических мод $\omega(0) \neq 0$, т.к. в этом случае даже при $k = 0$ имеется конечное смещение атомов внутри элементарной ячейки, требующее конечной энергии.

При распространении волны вдоль некоторых выделенных симметрией направлений упругая волна является либо чисто продольной, либо чисто поперечной (например, в

¹ См. Левитов, Шитов, Задача 1. (Классическая цепочка осцилляторов).

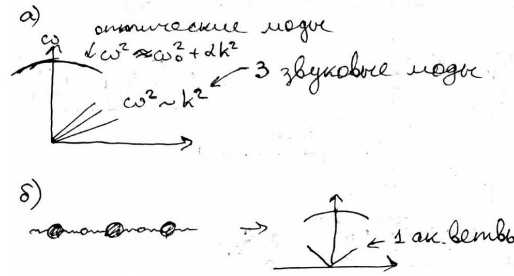


Рис. 1. а) Акустические и оптической моды в общем трёхмерном случае. Для разных оптических мод частоты ω_0 вообще говоря различны. б) Одномерная цепочка с двумя атомами в элементарной ячейке, соединёнными пружинами одинаковой жёсткости. В одномерном случае полное число мод равно p , из них 1 - акустическая. При $p = 2$ получаем одну акустическую и одну оптическую моду.

кубическом кристалле такими являются направления $[100]$, $[110]$, $[111]$ и другие, получающиеся вращениями, соответствующими кубической симметрии)² В этом случае из трёх акустических ветвей одна является продольной, а две - поперечными. Если в поперечной плоскости имеется симметрия двух ортогональных направлений (как в случае кубического кристалла), то скорости звука для двух поперечных мод равны.

Соотношение ортогональности: собственные векторы $x_{j\alpha}^{(s)} = \sqrt{m_j} e_{j\alpha}^{(s)}$, отвечающие разным номерам мод s , должны быть ортогональны, поэтому

$$\sum_{j,\alpha} m_j e_{j\alpha}^{(s)*} e_{j\alpha}^{(s')} = 0 \quad \text{при } s \neq s'$$

Мы можем нормировать собственные векторы $e_{j\alpha}^{(s)}$ как угодно, физические амплитуды колебаний $e_{j\alpha}$ будут выражаться через них с помощью размерных амплитуд w_s :

$$e_{j\alpha} = \sum_s w_s e_{j\alpha}^{(s)}$$

2 Продольность или поперечность обычно обозначаются буквами L и T, принадлежность акустической или оптической ветви - буквами A и O соответственно. Поэтому четыре типа фононов обозначаются как LA, LO, TA, TO. Выберем следующую нормировку: 3

$$\sum_{j,\alpha} m_j e_{j\alpha}^{(s)*} e_{j\alpha}^{(s')} = M \delta_{ss'}$$

где M - полная масса элементарной ячейки. При этом $e_{j\alpha}^{(s)}$ - безразмерные векторы.

Для акустических мод при $\mathbf{k} = 0$ уравнение движения 2.12 становится тривиальным тождеством, поэтому в качестве собственных векторов смещений можно взять любые три линейно независимых вектора. Для акустической моды с номером β естественно взять вектор $e_{j\alpha}^{(\beta)} = \delta_{\alpha\beta}$ (физически это означает, что в качестве трёх независимых однородных мод мы можем взять смещения вдоль трёх пространственных осей, поэтому $\mathbf{e}_j^{(1)}$ не зависит от j и направлен вдоль x и т.д.). Она ортогональна любой оптической моде, поэтому

$$\sum_{j,\alpha} m_j e_{j\alpha}^{(\beta)*} e_{j\alpha}^{\text{onT}} = 0 = \sum_j m_j e_{j\beta}^{\text{onT}}$$

Таким образом, мы ещё раз приходим к тому, что центр масс в оптической моде не смещается.

С. Сингулярности Ван Хова в плотности состояний.

Пусть мы вычисляем величину типа энергии (или теплоёмкость и т.д.). При этом возникают интегралы вида (d - размерность пространства)

$$\int f(\omega(\mathbf{k})) \frac{d^d \mathbf{k}}{(2\pi)^d} = \int f(\omega) \nu(\omega) d\omega, \quad \nu(\omega) = \int \delta(\omega - \omega(\mathbf{k})) \frac{d^d \mathbf{k}}{(2\pi)^d}.$$

Здесь $\nu(\omega)$ - плотность состояний.

Например,

$$E = \int \frac{\hbar \omega(\mathbf{k})}{\exp \frac{\hbar \omega(\mathbf{k})}{T} - 1} \frac{d^d \mathbf{k}}{(2\pi)^d}$$

Плотность состояний может быть записана в виде интеграла по изоэнергетической

³ В дополнение к 2.16 можно получить ещё одно полезное соотношение:

$$\sum_s e_{j\alpha}^{(s)*} e_{j'\beta}^{(s)} = \frac{M}{m_j} \delta_{jj'} \delta_{\alpha\beta}$$

[для этого нужно умножить 2.16 на $e_{j'\beta}^{(s)}$ и просуммировать по s]. И это соотношение, и 2.16 на самом деле просто следствия того, что $\sqrt{m_j} \mathbf{e}_j^{(s)}$ - собственные векторы эрмитовой матрицы. поверхности ⁴

$$\nu(\omega) = \int_{\omega(\mathbf{k})=\omega} \frac{1}{|d\omega(\mathbf{k})/d\mathbf{k}|} \frac{d^{d-1} \mathbf{k}}{(2\pi)^d}$$

В знаменателе возникает групповая скорость:

$$\mathbf{v}(\mathbf{k}) = \frac{d\omega}{d\mathbf{k}}$$

В так называемых критических точках, в которых $\mathbf{v}(\mathbf{k}) = 0$, плотность состояний имеет особенности. Эти особенности называются сингулярностями Ван Хова (Van Hove

singularities), они дают большой вклад в вычисляемую величину. Это общее явление для всех типов квазичастиц, не только для фононов.

Например, в 1D цепочке с двумя атомами в элементарной ячейке оптическая мода имеет закон дисперсии, меняющийся между ω_{\min} и ω_{\max} . Вблизи экстремума

$$\omega(k) \approx \omega_0 + \frac{A}{2} (k - k_0)^2, \quad v(k) \approx A (k - k_0)$$

Тогда

$$\nu(\omega) \propto \frac{1}{v} \Big|_{k=k_0 \pm \sqrt{\frac{2|\omega-\omega_0|}{|A|}}} \propto \frac{1}{\sqrt{|\omega - \omega_0|}}$$

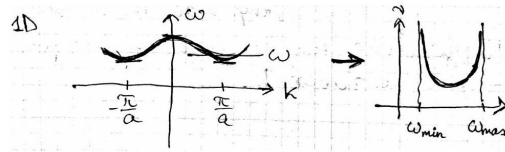


Рис. 2. Сингулярности Ван Хова в плотности состояний одномерной цепочки с двумя атомами в элементарной ячейке (вклад оптической моды).

⁴ Напоминка [для случая функции одной переменной $g(x)$, обращающейся в ноль в точке x_0]:

$$\delta(g(x)) = \frac{1}{|g'(x_0)|} \delta(x - x_0)$$

10.4.2 ДИЭЛЕКТРИЧЕСКАЯ ПРОНИЦАЕМОСТЬ

А. Частотная зависимость диэлектрической проницаемости.

Рассмотрим ионный кристалл - это диэлектрический кристалл, составленный из ионов (суммарный заряд ионов одной элементарной ячейки равен нулю).⁵

Свет взаимодействует с оптическими фононами, т.к. оптические фононы приводят к возникновению дипольного момента внутри элементарной ячейки, и этот дипольный момент взаимодействует с электромагнитным полем света. Оптические фононы дают вклад в диэлектрическую проницаемость $\varepsilon(\omega)$. Это величина, которая для монохроматического поля определяет связь напряжённости электрического поля и электрической индукции:

$$\mathbf{D}(\omega) = \varepsilon(\omega) \mathbf{E}(\omega)$$

$\varepsilon(\infty)$ определяется электронами - под бесконечными здесь подразумеваются частоты, много большие характерных фононных, но много меньшие характерных электронных (т.е. для электронов это статический отклик) ⁶

Можно записать $\varepsilon(\omega) = \varepsilon(\infty) + 4\pi\kappa(\omega)$, где $\kappa(\omega)$ - диэлектрическая восприимчивость фононов.

Будем рассматривать длинноволновое (т.е. почти однородное) электрическое поле ($k \ll a^{-1}$). Уравнение движения при наличии поля:

$$m_j \ddot{e}_{j\alpha} = - \sum_{j'\alpha'} \hat{D}_{j\alpha, j'\alpha'}(0) e_{j'\alpha'} + q_j E_\alpha.$$

Ищем решение для смещения в виде $e_{j\alpha} \propto e^{-i\omega t}$, где ω - частота поля. Решение можно разложить по фононным модам как

$$e_{j\alpha} = \sum_s w_s e_{j\alpha}^{(s)}$$

где $e_{j\alpha}^{(s)}$ — собственные векторы динамической матрицы:

$$\sum_{j'\alpha'} \hat{\mathcal{D}}_{j\alpha, j'\alpha'}(0) e_{j'\alpha'}^{(s)} = m_j \omega_s^2 e_{j\alpha}^{(s)}.$$

⁵ Кроме ионных, бывают ещё кристаллы с ковалентной связью, которые классифицируют на полярные и неполярные (в зависимости от наличия дипольного момента).

⁶ Если же пойти на еще бОльшие частоты, пройти электронные частоты и уйти вверх, то в конце концов на настоящей бесконечности будет $\varepsilon = 1$, т.к. никакие заряды не успевают сместиться и поляризация среды не возникает. Подставляем, получаем:

$$-\sum_s m_j \omega_s^2 e_{j\alpha}^{(s)} w_s = -\sum_s m_j \omega_s^2 e_{j\alpha}^{(s)} w_s + q_j E_\alpha$$

Собственные векторы $e_{j\alpha}^{(s)}$ безразмерные, а $e_{j\alpha}$ и w_s имеют размерность длины. Применяя операцию

$$\sum_{j\alpha} e_{j\alpha}^{(s')} \times$$

и используя ортонормированность (2.16), ⁷ находим

$$w_s = \frac{\sum_{j\alpha} e_{j\alpha}^{(s)} q_j E_\alpha}{M (\omega_s^2 - \omega^2)}$$

Комбинация

$$q_\alpha^{(s)} = \sum_j e_{j\alpha}^{(s)} q_j$$

имеет смысл эффективного дипольного момента, соответствующего s -той моде. Таким образом,

$$w_s = \frac{\sum_\alpha q_\alpha^{(s)} E_\alpha}{M (\omega_s^2 - \omega^2)}.$$

Дипольный момент одной элементарной ячейки:

$$P_\alpha = \sum_j e_{j\alpha} q_j = \sum_{sj} w_s e_{j\alpha}^{(s)} q_j = \sum_s w_s q_\alpha^{(s)} = \sum_{s\beta} \frac{q_\alpha^{(s)} q_\beta^{(s)}}{M (\omega_s^2 - \omega^2)} E_\beta$$

Тут становится ясно, почему мы рассматриваем именно оптические фононы: акустические не имеют дипольного момента [поэтому суммирование в 3.10 фактически идёт только по оптическим модам]. Чтобы получить поляризацию (дипольный момент единицы объёма), нужно еще умножить на концентрацию N_c элементарных ячеек в веществе. В результате получаем тензор диэлектрической проницаемости:

$$\varepsilon_{\alpha\beta}(\omega) = \varepsilon_{\alpha\beta}(\infty) + 4\pi \sum_s \frac{N_c q_\alpha^{(s)} q_\beta^{(s)}}{M (\omega_s^2 - \omega^2)}.$$

Рассмотрим теперь случай, когда в элементарной ячейке имеется два иона, а решётка (трёхмерная) имеет кубическую симметрию (например, именно такая ситуация имеет⁷ В условии ортонормированности есть сопряжение, тем не менее в формуле (3.6) вектор $e_{j\alpha}^{(s')}$ написан без звёздочки. Так можно делать, поскольку при $\mathbf{k} = 0$ такой вектор становится вещественным. Это так из-за того, что бегущая экспонента $e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}}$ превращается в единицу, и $e_{j\alpha} = u_{\mathbf{R}j\alpha}$, а смещения вещественны. См. также формулу 6.3 и рассуждения ниже неё. место в поваренной соли NaCl). Тогда имеется $3 \cdot (2 - 1) = 3$ оптических фононных моды (одна из них - продольная, а две - поперечные). Тензоры, описывающие систему такой симметрии [в частности, динамическая матрица и тензоры, входящие в формулу (3.11)], становятся изотропными, т.е. пропорциональны $\delta_{\alpha\beta}$. Три оптические моды при $\mathbf{k} = 0$ тогда имеют одинаковые частоты, обозначим их ω_0 [это собственные частоты динамической матрицы, см. формулу (3.4), т.е. решение задачи о динамике решётки без учёта взаимодействия со светом].

В результате формула (3.11) принимает скалярный вид

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon(\infty) + \frac{A}{\omega_0^2 - \omega^2}$$

с положительной величиной A . Величина A может быть взята из решения задачи Ф3, но если мы знаем общий вид (3.12), то смысл величин ω_0 и A нам даже не требуется знать, сейчас мы всё выясним из результатов, к которым приводит эта формула.

Пусть мы возбуждаем собственную продольную моду (теперь мы уже рассматриваем решётку не саму по себе, а при наличии электрического поля). Тогда (в правой части ноль, а не $4\pi\rho$, т.к. плотность свободных зарядов равна нулю)

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = 0 \quad \Rightarrow \quad \mathbf{k} \cdot \mathbf{D} = kD = 0 \quad \Rightarrow \quad \mathbf{D} = 0$$

поэтому $\varepsilon(\omega_{\parallel}) = 0$ (продольность означает, что $\mathbf{k} \parallel \mathbf{D}$).

Теперь пусть мы возбуждаем собственную поперечную моду. Если $\omega/c \ll k$ (как мы увидим ниже, в этом пределе фононы не взаимодействуют с электромагнитным полем; при этом мы по-прежнему рассматриваем длинноволновой предел в смысле $k \ll a^{-1}$), то

$$\nabla \times \mathbf{E} = 0 \quad \Rightarrow \quad \mathbf{k} \times \mathbf{E} = 0 \quad \Rightarrow \quad kE = 0 \quad \Rightarrow \quad \mathbf{E} = 0,$$

поэтому $\varepsilon(\omega_{\perp}) = \infty$ (поперечность означает, что $\mathbf{k} \perp \mathbf{E}$).

Полученные соотношения означают, что

$$\begin{aligned} \omega_{\perp} &= \omega_0, \\ \omega_{\parallel}^2 &= \omega_0^2 + \frac{A}{\varepsilon(\infty)}. \end{aligned}$$

С точки зрения эксперимента A напрямую неизвестно. Избавляясь от неё, можем переписать 3.12 в виде

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon(\infty) \frac{\omega^2 - \omega_{\parallel}^2}{\omega^2 - \omega_{\perp}^2},$$

откуда следует, что частоты ω_{\parallel} и ω_{\perp} связаны соотношением Лиддена-Сакса-Теллера (Lyddane-Sachs-Teller): 8

$$\frac{\omega_{\parallel}^2}{\omega_{\perp}^2} = \frac{\varepsilon(0)}{\varepsilon(\infty)}.$$

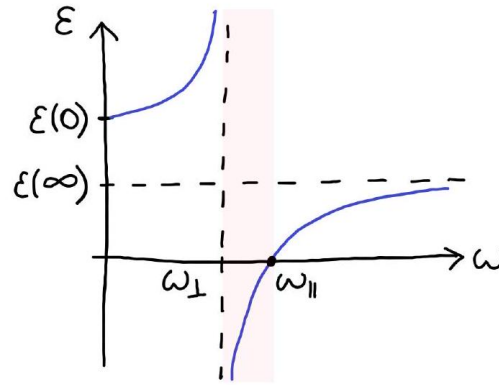


Рис. 3. $\varepsilon(\omega)$ для случая кубического ионного кристалла с двумя ионами в элементарной ячейке. Интервал частот, в котором $\varepsilon(\omega) < 0$ - это область непрозрачности кристалла. Электромагнитная волна вида e^{iKx} в этой области становится затухающей, т.к. $K = \sqrt{\varepsilon(\omega)}\omega/c = i\sqrt{|\varepsilon(\omega)|}\omega/c$

В. Поляритоны.

Если не предполагать условия $\omega/c \ll k$ (теперь учтём взаимодействие фононов с электромагнитным полем), то для поперечных колебаний нужно писать:

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad \Rightarrow \quad \mathbf{k} \times \mathbf{E} = \frac{\omega}{c} \mathbf{B}$$

Если вещество немагнитно, то можно заменить \mathbf{B} на \mathbf{H} . Тогда, применяя операцию $\mathbf{k} \times$ и используя ещё одно уравнение Максвелла [в нём слагаемого $(4\pi/c)\mathbf{j}$ нет, т.к. нет токов свободных зарядов]

$$\mathbf{k} \times \mathbf{H} = -\frac{\omega}{c} \mathbf{D}$$

получаем соотношение

$$k^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon(\omega)$$

8 Типичные значения частот ω_{\parallel} и ω_{\perp} - порядка 10^{13}с^{-1} , что соответствует инфракрасному диапазону. Моды (квазичастицы), дисперсию которых мы только что нашли, называются «поляритонами» - это бозевские квазичастицы, соответствующие совместным колебаниям электромагнитного поля и кристаллической решётки (колебания решётки должны быть «дипольными»). Таким образом, поляритоны являются результатом взаимодействия фотонов с поперечными фононами (в более общем смысле поляритоном может называться квазичастица, получающаяся в результате взаимодействия фотона с любым возбуждением, обладающим электрическим или магнитным дипольным моментом) 9

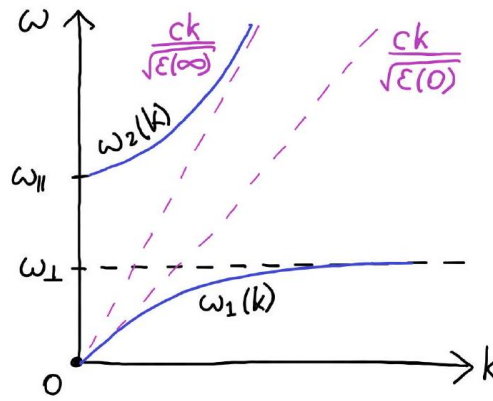


Рис. 4. Две ветви поляритонов $\omega_{1,2}(k)$ и две асимптотики $\omega = ck/\sqrt{\varepsilon(\infty)}$ и $\omega = ck/\sqrt{\varepsilon(0)}$. Поляритоны - это результат взаимодействия поперечных оптических фононов с электромагнитным полем (т.е. с фотонами). В интервале $\omega_{||} < \omega < \omega_{\perp}$ ничего нет, т.к. мы изучаем закон дисперсии для незатухающих волн, а в этом диапазоне кристалл непрозрачен и волны затухают.

Результат решения уравнения 3.12 показан на рис. 4

- Если мы полностью выключим взаимодействие фононов с электромагнитным полем (т.е. с фотонами), то этому соответствует $A = 0$ в формулах (3.12) и (3.16). Тогда $\omega_{\perp} = \omega_{||} = \omega_0$ и $\varepsilon(0) = \varepsilon(\infty)$, поэтому два характерных значения на вертикальной оси «склеиваются», две линейные асимптоты тоже склеиваются. Две ветви спектра при этом превращаются в две прямые: горизонтальная чисто фононная ветвь $\omega = \omega_0$ и линейный фотонный закон $\omega = ck/\sqrt{\varepsilon}$. Эти две ветви

⁹ Нужно не путать поляритоны с поляронами. Поляроны - это фермиевские квазичастицы, представляющие собой электрон, одетый «шубой» фононов в результате электрон-фононного взаимодействия. пересекаться. Включение взаимодействия фононов с фотоном приводит к явлению «avoided level crossing» - пересечение пропадает, ветви «переплетаются» и описывают уже не чистые фононы и чистые фотоны, а их суперпозиции (поляритоны). Именно это изображено на рисунке.

- Из рис. 4 наглядно видно, в каком смысле условие $\omega/c \ll k$, которое мы предполагали при написании формулы (3.14), означает, что фононы не взаимодействуют с электромагнитным полем. Этот предел соответствует тому, что мы ушли далеко вправо от точки пересечения, которая была бы для полностью невзаимодействующих ветвей спектра, в результате чего фононы и фотоны становятся почти чистыми.
- Наконец, отметим, что на рис. 4 показаны только ветви спектра, получающиеся из поперечных оптических фононов. Сюда можно добавить также ветвь, соответствующую продольным оптическим фононам: поскольку такие фононы не взаимодействуют с фотонами (т.к. электромагнитное поле поперечно), эта ветвь есть просто горизонтальная линия $\omega = \omega_{||}$.

10.4.3 ТЕОРИЯ УПРУГОСТИ ДЛЯ АКУСТИЧЕСКИХ КОЛЕБАНИЙ

В этом разделе подразумевается суммирование по повторяющимся индексам.

Атомы в элементарной ячейке колеблются в фазе, волновой вектор моды предполагается малым, $k \ll a^{-1}$. В этом случае смещение очень медленно меняется в пространстве и вещество можно считать непрерывной средой. Тогда работает теория

упругости. В гармоническом приближении энергию упругой деформации можно записать через (симметричный) тензор деформации

$$u_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)$$

в случае $|u_{ij}| \ll 1$ как

$$E = \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} \lambda_{ijkl} u_{ij} u_{kl}.$$

[Полезно понимать, что случай $\partial u_i / \partial x_j = -\partial u_j / \partial x_i$, в котором тензор деформации зануляется, соответствует повороту. А след тензора деформации, u_{ii} , в общем случае равен относительному изменению объёма при деформации.] Пусть на вещество действуют силы $f_i(\mathbf{r})$. Это приводит к деформации и изменению энергии:

$$\delta E = \int d\mathbf{r} \lambda_{ijkl} \delta u_{ij} u_{kl} = \int d\mathbf{r} \lambda_{ijkl} \frac{\partial (\delta u_i)}{\partial x_j} u_{kl}$$

Вводя понятие тензора упругих напряжений

$$\sigma_{ij} = \lambda_{ijkl} u_{kl}$$

можем написать

$$\delta E = \int d\mathbf{r} \sigma_{ij} \frac{\partial (\delta u_i)}{\partial x_j} = \int d\mathbf{r} \left(-\delta u_i \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\sigma_{ij} \delta u_i) \right) = - \int d\mathbf{r} \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} \delta u_i + \int dS \sigma_{ij} \delta u_i n_j.$$

С другой стороны, изменение энергии можно записать через действие внешних сил:

$$\delta E = \int d\mathbf{r} f_i \delta u_i + \delta E_{\text{surface}}$$

Нас интересует объёмная часть. Видим, что условием равновесия является

$$f_i = - \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j}$$

При этом в равновесии внешняя сила уравнивает внутренние силы. Значит, сила, возникающая внутри среды из-за деформации, равна $\partial \sigma_{ij} / \partial x_j$.

Величины λ_{ijkl} составляют тензор модулей упругости.

- У этого тензора есть очевидные симметрии: по перестановке индексов в первой паре, по перестановке индексов во второй паре, по перестановке первой и второй пары индексов.
- Посчитаем максимальное число независимых переменных, которые могут задавать такой тензор. По каждой паре индексов он является 3-мерным симметричным тензором второго ранга, для размерности n число переменных есть $n(n+1)/2$, поэтому при $n=3$ получаем 6 независимых переменных. Далее, поскольку каждая пара индексов принимает 6 разных независимых значений, то по парам индексов тензор $\lambda_{(ij)(kl)}$ является 6-мерным тензором второго ранга. Число независимых переменных для него равно $6(6+1)/2 = 21$. - В изотропном случае можно доказать, что λ_{ijkl} задаётся всего двумя независимыми переменными, коэффициентами Ламэ λ и μ (второй коэффициент Ламэ μ - это модуль сдвига):10

$$\lambda_{ijkl} = \lambda \delta_{ij} \delta_{kl} + \mu (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk})$$

Собственные колебания (в первом уравнении используем найденное нами выражение для упругих сил внутри среды):

$$\begin{aligned} \rho \ddot{u}_i &= \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} = \\ &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\lambda_{ijkl} \frac{\partial u_k}{\partial x_l} \right) = \lambda_{ijkl} \frac{\partial^2 u_k}{\partial x_j \partial x_l}, \end{aligned}$$

откуда получаем

$$-\rho \omega^2 u_i = -\lambda_{ijkl} k_j k_l u_k$$

Записывая волновой вектор с помощью направляющих косинусов,

$$k_j = \nu_j k$$

видим, что закон дисперсии должен иметь вид

$$\omega(\mathbf{k}) = c_\phi(\boldsymbol{\nu}) k$$

а фазовая скорость c_ϕ находится из дисперсионного уравнения

$$|\rho c_\phi^2 \delta_{ik} - \lambda_{ijkl} \nu_j \nu_l| = 0$$

[обратите внимание, что групповая скорость $d\omega(\mathbf{k})/d\mathbf{k}$ из-за зависимости $c(\boldsymbol{\nu})$ может быть направлена не по \mathbf{k}]

Из дисперсионного уравнения, в частности, следует

$$c_\phi \propto 1/\sqrt{\rho}$$

Коэффициенты Ламэ и модуль всестороннего сжатия K .

10 Покажем, как коэффициенты Ламэ связаны с модулем всестороннего сжатия K .

Для всестороннего сжатия имеем $u_{ij} = (\varepsilon/3)\delta_{ij}$, $\sigma_{ij} = -p\delta_{ij}$, $\delta V = u_{ii} = \varepsilon$, где p - давление, и соответствующий модуль вводится следующим образом: $K = -p/\varepsilon$. При этом

$$\sigma_{ij} = \lambda_{ijkl} u_{kl} = \lambda \delta_{ij} u_{kk} + 2\mu u_{ij} = (\lambda + 2\mu/3)\varepsilon \delta_{ij},$$

поэтому $K = \lambda + 2\mu/3$. Через них же можно выразить и другие упругие коэффициенты, такие как модуль Юнга и коэффициент Пуассона (возникающие при рассмотрении растяжения стержня).

11 Для изотропного случая будет $\lambda_{ijkl} \nu_j \nu_l = \mu \delta_{ik} + (\lambda + \mu) \nu_i \nu_k$. Эта матрица для любого направления имеет невырожденное собственное значение $\lambda + 2\mu$, соответствующее продольной скорости звука $c_l = \sqrt{(\lambda + 2\mu)/\rho}$, и двукратно вырожденное собственное значение μ , соответствующее поперечной скорости звука $c_t = \sqrt{\mu/\rho}$. Таким образом, в этом случае скорости звука от направления не зависят.

10.4.4 АНГАРМОНИЗМ И ТЕПЛОВОЕ РАСШИРЕНИЕ

Помимо гармонического есть также ангармонические вклады в энергию деформации кристалла, главный из них - кубический:

$$U = \frac{1}{2} \sum_{\lambda\lambda'} D_{\lambda\lambda'} u_{\lambda} u_{\lambda'} + \frac{1}{6} \sum_{\lambda\lambda'\lambda''} A_{\lambda\lambda'\lambda''} u_{\lambda} u_{\lambda'} u_{\lambda''}$$

Можно сделать преобразование Фурье по координатам $\mathbf{R}, \mathbf{R}', \mathbf{R}''$ и записать кубический ангармонизм в виде

$$U_3 = \frac{1}{6} \sum_{\mathbf{q}\mathbf{q}'\mathbf{q}''} A(\mathbf{q}, \mathbf{q}', \mathbf{q}'') u_{\mathbf{q}} u_{\mathbf{q}'} u_{\mathbf{q}''}$$

(еще идёт суммирование по индексам j, α , но для краткости его не пишем). Вследствие трансляционной инвариантности должен выполняться закон сохранения импульса, т.е. условие

$$\mathbf{q} + \mathbf{q}' + \mathbf{q}'' = 0$$

(считаем сейчас вещество непрерывной средой).

Здесь содержатся различные процессы. Обратим внимание на случай $\mathbf{q} \rightarrow 0$ (это соответствует однородному расширению¹², т.е. нас интересует вклад

$$\frac{1}{6} \cdot 3 \sum_{\mathbf{q}'} A(0, \mathbf{q}', -\mathbf{q}') u_0 u_{\mathbf{q}'} u_{-\mathbf{q}'}$$

- здесь учтено, что ещё можно рассмотреть вклады от $\mathbf{q}' \rightarrow 0$ и $\mathbf{q}'' \rightarrow 0$, которые дают то же самое. В этом вкладе остались две «живые» переменные, $u_{\mathbf{q}'}$ и $u_{-\mathbf{q}'}$, поэтому это есть добавка к гармонической части энергии, причём она пропорциональна u_0 , т.е. относительному растяжению. Поэтому этот вклад приводит к сдвигу частоты фононов за счёт однородного расширения (вызываемого, например, нагреванием):

$$\tilde{\omega}_{s,q} = \omega_{s,q}(1 - \gamma\varepsilon), \quad u_{ij} = \frac{\varepsilon}{3} \delta_{ij}$$

Здесь по определению ε есть относительное изменение объёма при деформации, поэтому u_0 пропорционально этой величине, и естественно, что ей же пропорционально относительное изменение частоты фононов. Вопрос только в том, какой коэффициент γ стоит в формуле. Этот коэффициент называется константой Грюнайзена. Для многих

¹² Можно представить себе волну e^{iqR} , которая при $q \ll L^{-1}$ (где L — размер образца) превращается в $(1 + iqR)$ — тогда q пропорциональна относительному удлинению и мала.

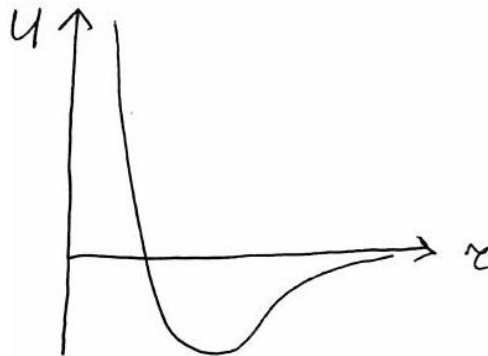


Рис. 5. Характерный вид межатомного потенциала $U(r)$.

веществ она оказывается примерно равной 2. Это обусловлено тем, что межатомные силы в различных веществах имеют похожий вид.

Свободная энергия с учётом вкладов однородного расширения и свободного фононного газа:

$$F = \frac{K\varepsilon^2}{2} + F_{\text{ph}}(\varepsilon)$$

где K - модуль всестороннего сжатия, а¹³

$$F_{\text{ph}} = T \sum_{s,\mathbf{q}} \ln \left(1 - e^{-\frac{\hbar\tilde{\omega}_{s,\mathbf{q}}}{T}} \right)$$

Минимизируем F по ε :

$$\frac{\partial F}{\partial \varepsilon} = 0 = K\varepsilon + \frac{\partial F_{\text{ph}}}{\partial \varepsilon}$$

Найдём последнее слагаемое:

$$\frac{\partial F_{\text{ph}}}{\partial \varepsilon} = \sum_{s,\mathbf{q}} \frac{e^{-\frac{\hbar\tilde{\omega}_{s,\mathbf{q}}}{T}} \hbar \frac{\partial \tilde{\omega}_{s,\mathbf{q}}}{\partial \varepsilon}}{1 - e^{-\frac{\hbar\tilde{\omega}_{s,\mathbf{q}}}{T}}} \approx -\gamma \sum_{s,\mathbf{q}} \hbar\omega_{s,\mathbf{q}} n_{s,\mathbf{q}} = -\gamma E_{\text{ph}},$$

где E_{ph} - полная энергия фононов (без учёта сдвижки спектра). Приближённое равенство появилось оттого, что распределение Бозе-Эйнштейна

$$n_{s,\mathbf{q}} = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega_{s,\mathbf{q}}}{T}} - 1}$$

мы записали для несдвинутого фононного спектра (т.е. в нём $\tilde{\omega}_{s,\mathbf{q}}$ заменили $\omega_{s,\mathbf{q}}$ - учёт этого различия здесь дал бы следующий порядок малости). В результате получаем

$$\varepsilon = \frac{\gamma}{K} E_{\text{ph}}$$

В частности это означает, что ε растёт с температурой, т.к. растёт E_{ph} .

¹³ Пояснение к формуле 5.7):

$$\begin{aligned} F_{\text{ph}} &= \sum_{s,\mathbf{q}} F_{\text{ph}}^{(s,\mathbf{q})} = \sum_{s,\mathbf{q}} -T \ln \sum_n e^{-E_n/T} = -T \sum_{s,\mathbf{q}} \ln \sum_{n=0}^{\infty} e^{-n\hbar\tilde{\omega}_{s,\mathbf{q}}/T} = \\ &= -T \sum_{s,\mathbf{q}} \ln \frac{1}{1 - e^{-\hbar\tilde{\omega}_{s,\mathbf{q}}/T}} = T \sum_{s,\mathbf{q}} \ln \left(1 - e^{-\frac{\hbar\tilde{\omega}_{s,\mathbf{q}}}{T}} \right). \end{aligned}$$

10.4.5 КВАНТОВАНИЕ ФОНОНОВ

$n_{s,\mathbf{q}} \ll 1$ при $T \ll T_D$ и наоборот, $n_{s,\mathbf{q}} \gg 1$ при $T \gg T_D$, где T_D - температура Дебая. Обычно $T_D \sim 100 - 1000$ К. Поэтому получается, что в широком диапазоне не слишком высоких температур числа заполнения малы, а значит бoльцмановская статистика не работает, и нужно работать с квантовой статистикой. Для этого нужно произвести процедуру квантования фононов.

А. Нормальные координаты и квантование.

Имея в виду формулы

$$u_{\mathbf{R},j,\alpha} = \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}} e_{\mathbf{q},j,\alpha}, \quad e_{\mathbf{q},j,\alpha} = \sum_s w_{s,\mathbf{q}} e_{j,\alpha}^{(s,\mathbf{q})},$$

введём так называемые нормальные координаты $Q_{s,\mathbf{q}} = \sqrt{N} w_{s,\mathbf{q}}$:

$$u_{\mathbf{R},j,\alpha} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{s,\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}} e_{j,\alpha}^{(s,\mathbf{q})} Q_{s,\mathbf{q}}$$

где N - число ячеек во всём кристалле. Будем использовать соотношения

$$Q_{s,\mathbf{q}}^* = Q_{s,-\mathbf{q}}, \quad \left(e_{j,\alpha}^{(s,\mathbf{q})} \right)^* = e_{j,\alpha}^{(s,-\mathbf{q})}$$

последнее из которых было доказано в задаче Ф1. А дальше можно сказать, что $u_{\mathbf{R},j,\alpha}$ - вещественная функция, поэтому для её фурье-образа $e_{j,\alpha}^{(s,\mathbf{q})} Q_{s,\mathbf{q}}$ изменение знака импульса приводит к комплексному сопряжению. Это даёт нужное соотношение и для Q .

В нормальных координатах получаем для кинетической энергии

$$K = \frac{1}{2} \sum_{\lambda} m_j \dot{u}_{\lambda}^2 = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{R},j,\alpha} \sum_{s,\mathbf{q}} \sum_{s',\mathbf{q}'} m_j e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}+i\mathbf{q}'\mathbf{R}} e_{j,\alpha}^{(s,\mathbf{q})} e_{j,\alpha}^{(s',\mathbf{q}')} \dot{Q}_{s,\mathbf{q}} \dot{Q}_{s',\mathbf{q}'}$$

Учитывая соотношение

$$\sum_{\mathbf{R}} e^{i(\mathbf{q}+\mathbf{q}')\mathbf{R}} = N \delta_{\mathbf{q},-\mathbf{q}'}$$

условие нормировки 2.16 и соотношения (6.3), получаем (потенциальная энергия вычисляется аналогично)

$$K = \frac{M}{2} \sum_{s,\mathbf{q}} \left| \dot{Q}_{s,\mathbf{q}} \right|^2, \quad U = \frac{M}{2} \sum_{s,\mathbf{q}} \omega_{s,\mathbf{q}}^2 |Q_{s,\mathbf{q}}|^2$$

где M - масса элементарной ячейки.

Теперь можно произвести квантование по аналогии с гармоническим осциллятором, в котором

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} = \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right)$$

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x + i \frac{p}{\sqrt{2\hbar m\omega}}.$$

В нашем случае

$$\hat{Q}_{s,\mathbf{q}} = \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_{s,\mathbf{q}}}} \left(\hat{a}_{s,\mathbf{q}} + \hat{a}_{s,-\mathbf{q}}^\dagger \right), \quad \hat{P}_{s,\mathbf{q}} = -i\sqrt{\frac{\hbar M\omega_{s,\mathbf{q}}}{2}} \left(\hat{a}_{s,\mathbf{q}} - \hat{a}_{s,-\mathbf{q}}^\dagger \right),$$

что означает (т.к. $\hat{a}_{s,\mathbf{q}} \propto e^{-i\omega_{s,\mathbf{q}}t}$)

$$P_{s,\mathbf{q}} = M \dot{Q}_{s,\mathbf{q}}$$

Учитывая, что

$$|P_{s,\mathbf{q}}|^2 = P_{s,\mathbf{q}} P_{s,-\mathbf{q}}$$

можем переписать гамильтониан в виде

$$H = \sum_{s,\mathbf{q}} \left(\frac{|P_{s,\mathbf{q}}|^2}{2M} + \frac{M\omega_{s,\mathbf{q}}^2}{2} |Q_{s,\mathbf{q}}|^2 \right) = \sum_{s,\mathbf{q}} \hbar\omega_{s,\mathbf{q}} \left(\hat{a}_{s,\mathbf{q}}^\dagger \hat{a}_{s,\mathbf{q}} + \frac{1}{2} \right).$$

Введённые нами операторы рождения/уничтожения фононов - бозевские и подчиняются обычным соотношениям

$$[\hat{a}_{s,\mathbf{q}}, \hat{a}_{s,\mathbf{q}}^\dagger] = 1, \quad \langle \hat{a}_{s,\mathbf{q}}^\dagger \hat{a}_{s,\mathbf{q}} \rangle = n_{s,\mathbf{q}}$$

(а если индексы у \hat{a} и \hat{a}^\dagger не совпадают, то получается ноль в обеих формулах).

В. Устойчивость решётки относительно флуктуаций.

Величину флуктуаций положений атомов можно выяснить, посчитав при заданной температуре следующее среднее: 14

$$\langle u_{\mathbf{R},j,\alpha} u_{\mathbf{R},j,\beta} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{s,\mathbf{q},s',\mathbf{q}'} e_{j,\alpha}^{(s,\mathbf{q})} e_{j,\beta}^{(s',\mathbf{q}')} e^{i(\mathbf{q}+\mathbf{q}')\mathbf{R}} \langle Q_{s,\mathbf{q}} Q_{s',\mathbf{q}'} \rangle$$

14 См. Левитов, Шитов, Задача 38. (Флуктуации смещений решётки). Рассмотрим получившееся среднее от нормальных координат:

$$\langle Q_{s,\mathbf{q}} Q_{s',\mathbf{q}'} \rangle = \frac{\hbar}{2M\sqrt{\omega_{s,\mathbf{q}}\omega_{s',\mathbf{q}'}}} \left\langle \left(a_{s,\mathbf{q}} + a_{s,-\mathbf{q}}^\dagger \right) \left(a_{s',\mathbf{q}'} + a_{s',-\mathbf{q}'}^\dagger \right) \right\rangle.$$

Ненулевой результат в этом среднем получится только в случае $s' = s, \mathbf{q}' = -\mathbf{q}$:

$$\begin{aligned} \langle Q_{s,\mathbf{q}} Q_{s,-\mathbf{q}} \rangle &= \frac{\hbar}{2M\omega_{s,\mathbf{q}}} \left(\langle a_{s,\mathbf{q}} a_{s,\mathbf{q}}^\dagger \rangle + \langle a_{s,-\mathbf{q}}^\dagger a_{s,-\mathbf{q}} \rangle \right) = \\ &= \frac{\hbar}{2M\omega_{s,\mathbf{q}}} (n_{s,\mathbf{q}} + n_{s,-\mathbf{q}} + 1). \end{aligned}$$

В результате (6.15) даёт:

$$\langle u_{\mathbf{R},j,\alpha} u_{\mathbf{R},j,\beta} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{s,\mathbf{q}} e_{j,\alpha}^{(s,\mathbf{q})} e_{j,\beta}^{(s,\mathbf{q})*} \langle Q_{s,\mathbf{q}} Q_{s,-\mathbf{q}} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{s,\mathbf{q}} e_{j,\alpha}^{(s,\mathbf{q})} e_{j,\beta}^{(s,\mathbf{q})*} \frac{\hbar}{M\omega_{s,\mathbf{q}}} \left(n_{s,\mathbf{q}} + \frac{1}{2} \right).$$

В пределе бесконечного кристалла (объём $V \rightarrow \infty$) сумма по q превращается в интеграл:

$$\langle u_{\mathbf{R},j,\alpha} u_{\mathbf{R},j,\beta} \rangle = \frac{V}{N} \sum_s \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^d} e_{j,\alpha}^{(s,\mathbf{q})} e_{j,\beta}^{(s,\mathbf{q})*} \frac{\hbar}{M\omega_{s,\mathbf{q}}} \left(n_{s,\mathbf{q}} + \frac{1}{2} \right)$$

Частота оказалась в знаменателе, поэтому особенно важны мягкие моды. У акустических мод $\omega \propto q$, поэтому вклад квантовых флуктуаций (происходящих от $1/2$ в скобках под интегралом) имеет вид

$$\int d^d q \frac{1}{\omega} \propto \int \frac{d^d q}{q}$$

В размерности $d = 1$ возникает инфракрасная расходимость (т.е. расходимость при $q \rightarrow 0$), поэтому бесконечных одномерных кристаллов не существует. (Возможные ультрафиолетовые расходимости при $q \rightarrow \infty$ обрезаются на масштабе обратной постоянной решётки.)

Вклад тепловых флуктуаций имеет вид

$$\int d^d q \frac{1}{\omega} n_q \propto \int \frac{n_q d^d q}{q}$$

При ненулевой температуре и малых q для мягких мод имеем

$$n_q = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{T}} - 1} \approx \frac{T}{\hbar\omega}.$$

Поэтому акустические фононы дают следующий вклад в тепловые флуктуации:

$$\int \frac{d^d q}{q^2}$$

В размерностях $d = 1, 2$ возникает инфракрасная расходимость. С одномерными кристаллами всё совсем плохо, расходимость сильная. В двумерном случае - логарифмическая, но всё равно приведённое рассуждение говорит о том, что бесконечных двумерных кристаллов при конечной температуре не существует. В целом, роль флуктуаций растёт с понижением размерности (меньше соседей, флуктуации легче распространяться).

Здесь нужно оговориться, заметив, что приведённое рассуждение - очень упрощённое. Например, может возникнуть вопрос: почему же существует двумерный графен? Во-первых, в двумерном случае полученная нами расходимость - логарифмическая по размеру кристалла (инфракрасная логарифмическая расходимость по q для конечного кристалла обрезается обратным размером образца). Если посмотреть на параметры графена и задаться вопросом, при каком размере флуктуации разрушают кристаллический порядок, то окажется, что этот размер очень велик, и все реалистичные образцы гораздо меньше этого размера. Но, что ещё важнее, при учёте взаимодействия между фононами расходимость пропадает. Интеграл оказывается конечным, зависящим от температуры. И при нулевой температуре с графеном всё хорошо, а разрушение кристаллического порядка происходит при некоторой конечной температуре. Наконец, мы никак не учитывали, что наш кристалл может быть стабилизирован подложкой, на которой он лежит.

10.4.6 РАССЕЯНИЕ ЗВУКА НА ПРИМЕСИ

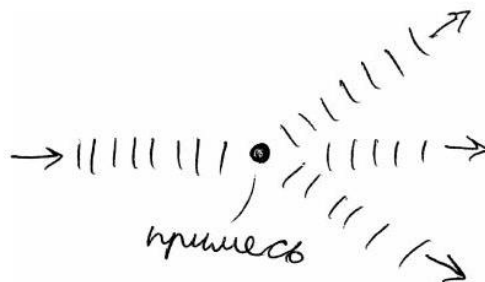


Рис. 6. Рассеяние звука на примеси. Хотим найти сечение рассеяния в зависимости от частоты, $\sigma(\omega)$

Рассмотрим точечный дефект. Например, это может быть атом примеси, замещающий основной атом решётки. От примеси есть два эффекта: 1) у неё другая масса, поэтому меняется кинетическая энергия, 2) она по-другому взаимодействует с соседними атомами, поэтому меняются силовые константы (потенциальная энергия). Для простоты будем говорить об изотопическом рассеянии, когда важен только первый эффект. Изменение

массы при этом почти всегда мало (за исключением случаев водорода и гелия), поэтому будем считать его малым параметром и делать теорию возмущений.

Выберем начало отсчёта в точке расположения примеси. Тогда возмущение имеет вид

$$\delta H = \sum_{j\alpha} \frac{\delta m}{2} \dot{u}_{0,j\alpha}^2 = \frac{1}{N} \frac{\delta m}{2} \sum_{j,\alpha,s,\mathbf{q},s',\mathbf{q}'} e_{j,\alpha}^{(s,\mathbf{q})} e_{j,\alpha}^{(s',\mathbf{q}')} \frac{P_{s,\mathbf{q}}}{M} \frac{P_{s',\mathbf{q}'}}{M}.$$

Подставляем P через a и получаем из 7.1 вклад вида

$$\delta H_1 = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q},\mathbf{q}'} V_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} a_{\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{q}'}$$

приводящий к рассеянию в первом порядке теории возмущений. Здесь V - полный объём кристалла, а матричный элемент имеет вид

$$V_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} = \frac{V}{N} \frac{\delta m}{2} \sqrt{\frac{\hbar\omega_{s,-\mathbf{q}}}{M}} \sqrt{\frac{\hbar\omega_{s',\mathbf{q}'}}{M}} e_{j,\alpha}^{(s,-\mathbf{q})} e_{j,\alpha}^{(s',\mathbf{q}')}.$$

Вероятность перехода в единицу времени по золотому правилу Ферми:

$$w = \int \frac{d\mathbf{q}'}{(2\pi)^3} \frac{2\pi}{\hbar} |V_{\mathbf{q}\mathbf{q}'}|^2 \delta(\hbar\omega_{s'\mathbf{q}'} - \hbar\omega_{s\mathbf{q}})$$

Учитывая, что

$$\delta(\hbar\omega_{s'\mathbf{q}'} - \hbar\omega_{s\mathbf{q}}) = \frac{\delta(q' - \frac{c}{c'}q)}{\hbar c'}$$

получаем

$$\frac{dw}{d\Omega} = \frac{2\pi}{\hbar^2 c'} |V_{\mathbf{q}\mathbf{q}'}|^2 \frac{q'^2}{(2\pi)^3}, \quad q' = \frac{c}{c'} q$$

Учитывая, что матричный элемент 7.3 ведёт себя как $V_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} \propto \sqrt{\omega\omega'}$, и $\omega = \omega'$ в силу закона сохранения энергии при рассеянии, получаем следующее частотное поведение сечения рассеяния:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \propto \frac{dw}{d\Omega} \propto \omega^4$$

Рассеяние с таким законом называют рэлеевским рассеянием.

10.4.7 КИНЕТИКА ФОНОННОГО ГАЗА

А. Кинетическое уравнение Больцмана.

Кинетика - это наука о том, как протекают процессы не в равновесии. Основной объект, с которым работает кинетика - функция распределения (частиц или квазичастиц, которые мы изучаем). Эта функция распределения находится из кинетического уравнения. Мы будем рассматривать газ фононов. Неравновесие - это ситуация, в которой функция распределения фононов отличается от бозевской.

Будем иметь в виду задачу о приложенном градиенте температуры, в результате чего через решётку начинает течь тепло (т.е. фононы). В этом случае имеется пространственная неоднородность макроскопического масштаба. Тогда удобно использовать представление фононных волновых пакетов (волновой пакет - это суперпозиция монохроматических колебаний решётки, принадлежащих определённой

ветви, занимающая ограниченную область в пространстве). ¹⁵ Если у волнового пакета размер d , то разброс импульсов составляющих его колебаний имеет порядок $\delta k \sim 1/d$.

Предполагаем

$$L \gg d \gg \lambda$$

где L - размер образца (например, в направлении градиента температуры). Первое условие позволяет говорить о координате пакета \mathbf{r} . Второе условие означает $1/\delta k \gg 2\pi/k$, т.е. $k \gg \delta k$, т.е. можно говорить об определённом импульсе пакета k .

В результате, о пакетах можно говорить как о частицах с координатой и импульсом. Их дальше и будем называть фононами.

Введём функцию распределения в фазовом пространстве f (т.е. плотность вероятности в фазовом пространстве), так что число фононов в интервале импульсов и координат есть

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) \frac{d^3 k dV}{(2\pi)^3}.$$

Закон дисперсии $\omega(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ может зависеть от координаты в неоднородном случае. Уравнения движения (можно вывести, но не будем этого делать для экономии времени; фактически все сводится к тому, что ω является функцией Гамильтона):

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{r}}{dt} &= \mathbf{v} = \frac{\partial \omega(\mathbf{k}, \mathbf{r})}{\partial \mathbf{k}}, \\ \frac{d\mathbf{k}}{dt} &= -\frac{\partial \omega}{\partial \mathbf{r}}. \end{aligned}$$

Если столкновения фононов между собой или с какими-либо препятствиями отсутствуют, то $df/dt = 0$ (полная производная здесь означает дифференцирование вдоль ¹⁵ Переход к описанию с помощью волновых пакетов можно рассматривать как каноническое преобразование. траектории в фазовом пространстве, определяемой уравнениями движения). Расписывая полную производную через частные, получаем

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} \dot{\mathbf{r}} + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{k}} \dot{\mathbf{k}} = 0$$

или

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} - \frac{\partial \omega}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{k}} = 0$$

Учёт столкновений приводит к тому, что функция распределения перестаёт быть постоянной вдоль фазовых траекторий. В этом случае в правой части стоит так называемый интеграл столкновений $I_{\text{ст}}(f)$ [иногда его обозначают $(\partial f/\partial t)_{\text{ст}}$ или $(df/dt)_{\text{ст}}$ или $\text{St } f$] - в результате получается кинетическое уравнение Больцмана

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} - \frac{\partial \omega}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{k}} = I_{\text{ст}}(f).$$

Интеграл столкновений - название условное, но он обычно действительно имеет вид интеграла, и в подынтегральное выражение входит искомая функция распределения. Тогда уравнение является интегро-дифференциальным.

В интеграл столкновений могут давать вклад разные процессы, например,

$$I_{\text{ст}} = I_{\text{ph-ph}} + I_{\text{imp}} + I_{\text{b}}$$

где первый вклад - из-за фонон-фононного взаимодействия (ангармонизм), второй от рассеяния на примесях, третий - от рассеяния на стенках. Условие применимости кин.уравнения:

$$\omega\tau \gg 1$$

где τ - время свободного пробега между столкновениями (т.е. τ велико по сравнению с периодом колебаний решётки).

Даже в идеальном кристалле отдельные фононные состояния нестационарны хотя бы из-за ангармонизма. При учёте ангармонизма фононы взаимодействуют, что приводит к квантовым переходам между разными фононными состояниями. Если ангармонизм мал, то переходы редки, а между ними фононы ведут себя как свободные частицы (аналогия с почти идеальным газом). При фонон-фононных столкновениях число фононов может не сохраняться (они могут рождаться и уничтожаться).

В. τ -приближение.

При использовании кин.уравнения самый сложный вопрос - это работа с интегралом столкновений (найти его и решить уравнение при его наличии). Очень важным является так называемое τ -приближение (или приближение времени релаксации), в котором интеграл столкновений записывается в простом виде

$$I_{\text{СТ}} = -\frac{f - f_0}{\tau} = -\frac{\delta f}{\tau},$$

где f_0 - равновесная функция распределения, а отклонение $\delta f \equiv f - f_0$ считается малым. Фононы являются бозонами, поэтому равновесная функция для них есть просто бозевское распределение,

$$f_0(\varepsilon) = n(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\varepsilon/T} - 1}$$

(в дальнейшем для этой функции мы будем использовать оба обозначения).¹⁶ Надо иметь в виду, что несмотря на свою простоту и привлекательность, τ -приближение (с параметром τ , не являющимся функцией переменных) не всегда справедливо (т.е. не всегда может быть строго выведено).

С. Коэффициент теплопроводности и закон Казимира.

Чтобы немного познакомиться с кин.уравнением, рассмотрим задачу о линейном коэффициенте теплопроводности. В этом случае в системе есть слабый градиент температуры, температура является функцией координаты $T = T(\mathbf{r})$. В то же время, ω от \mathbf{r} не зависит. В τ -приближении имеем

$$\mathbf{v} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} = -\frac{\delta f}{\tau}$$

Поток тепла обозначим \mathbf{Q} . Тогда

$$Q_i = - \sum_j \kappa_{ij} \nabla_j T = \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \hbar \omega(\mathbf{k}) v_i(\mathbf{k}) \delta f = - \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \tau \hbar \omega(\mathbf{k}) v_i(\mathbf{k}) \left(\mathbf{v}(\mathbf{k}) \frac{\partial f}{\partial T} \nabla T \right).$$

¹⁶ Обратите внимание, что хим.потенциал фононов равен нулю. Это связано с тем, что число фононов не фиксировано и должно находиться из условия минимума свободной энергии, $\partial F / \partial N = 0$. А хим.потенциал равен как раз этой производной. Малость здесь уже содержится в градиенте температуры, поэтому f можно заменить на f_0 . В результате

$$\varkappa_{ij} = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \tau \hbar \omega(\mathbf{k}) v_i(\mathbf{k}) v_j(\mathbf{k}) \frac{\partial f_0}{\partial T}.$$

При низких температурах ($T \ll T_D$) это даёт

$$\varkappa \sim \int dk \cdot k^2 \tau \hbar \omega c^2 \cdot \frac{\hbar \omega}{T^2} \frac{1}{\text{sh}^2 \frac{\hbar \omega}{2T}} \sim \frac{\tau T^3}{\hbar^3 c} \int_0^{T_D/2T} \frac{x^4 dx}{\text{sh}^2 x} \propto T^3$$

- закон Казимира. Это баллистический (кнудсеновский) режим. Другие возможные режимы: диффузионный, пуазелейев, второй звук.

10.4.8 ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ФОНОНОВ

А. Анггармонизм и взаимодействие. Слияния и распады. N- и U-процессы.

Вспоминаем, что процедура квантования фононов привела к следующему выражению для отклонений [см. 6.2 и 6.9 ; у и и ещё есть индекс j , но мы его не будем писать для краткости]:

$$\mathbf{u} = \sqrt{\frac{\hbar}{2MN}} \sum_{\mathbf{k}, s} \frac{\mathbf{e}_{\mathbf{k}s} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}}}{\sqrt{\omega(\mathbf{k})}} (a_{\mathbf{k}s} + a_{-\mathbf{k}s}^\dagger)$$

Энергия деформации имеет вид (чтобы не следить за точным соответствием коэффициентов разложения тому, что было раньше, снабдим их индексом)

$$U = U_0 + \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'} D_1(\mathbf{R} - \mathbf{R}') (u(\mathbf{R}) - u(\mathbf{R}'))^2 + \\ + \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{R}', \mathbf{R}''} K_1(\mathbf{R} - \mathbf{R}', \mathbf{R} - \mathbf{R}'') (u(\mathbf{R}) - u(\mathbf{R}')) (u(\mathbf{R}) - u(\mathbf{R}'')) (u(\mathbf{R}') - u(\mathbf{R}''))$$

Анггармоническое слагаемое даёт

$$\left(\frac{\hbar}{2MN} \right)^{3/2} \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{R}', \mathbf{R}''} K_2(\mathbf{R} - \mathbf{R}', \mathbf{R} - \mathbf{R}'') \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{k}''} \frac{1}{\sqrt{\omega(\mathbf{k})\omega(\mathbf{k}')\omega(\mathbf{k}'')}} \times \\ \times (a_{\mathbf{k}} + a_{-\mathbf{k}}^\dagger) (a_{\mathbf{k}'} + a_{-\mathbf{k}'}^\dagger) (a_{\mathbf{k}''} + a_{-\mathbf{k}''}^\dagger) (e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} - e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}'}) (e^{i\mathbf{k}'\mathbf{R}} - e^{i\mathbf{k}'\mathbf{R}''}) (e^{i\mathbf{k}''\mathbf{R}'} - e^{i\mathbf{k}''\mathbf{R}''}).$$

Здесь есть разные процессы (про процессы aa и $a^\dagger a^\dagger a^\dagger$ не говорим, потому что в главном порядке в рамках золотого правила Ферми они не сработают - в них нельзя удовлетворить закону сохранения энергии; в то же время они могут давать вклад в более высокие порядки теории возмущений как виртуальные процессы):

- Слияние (также эти процессы называют рассеянием): $a_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}'} a_{-\mathbf{k}''}^\dagger$,
- Распад: $a_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}'}^\dagger a_{-\mathbf{k}''}^\dagger$

причём амплитуды этих процессов умножаются на

$$e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{k}'+\mathbf{k}'')\mathbf{R}} (1 - e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}'-\mathbf{R})}) (1 - e^{i\mathbf{k}'(\mathbf{R}''-\mathbf{R})}) (e^{i\mathbf{k}''(\mathbf{R}'-\mathbf{R})} - e^{i\mathbf{k}''(\mathbf{R}''-\mathbf{R})})$$

Из-за суммирования по \mathbf{R} первый множитель даёт что-то типа дельта-функции.¹⁸ Но тут нужна некоторая осторожность.

Как мы формулируем задачу о кристалле? Обычно рассматривается решётка с дискретным расположением атомов и периодическими граничными условиями, $\mathbf{u}(L) = \mathbf{u}(0)$. Вспоминая формулу (9.1), понимаем, что тогда должно быть

$$e^{ikL} = 1$$

поэтому \mathbf{k} дискретны с шагом $2\pi/L$ (именно это мы и имеем в виду, когда пишем сумму по \mathbf{k}). То есть, ограниченность координаты сверху привела к дискретности при малых k . Аналогично, дискретность положений атомов на малых расстояниях приводит к ограниченности k сверху (т.е. мы можем считать \mathbf{k} лежащими в первой зоне Бриллюэна). В результате,

$$k_x = \frac{2\pi}{L}n, \quad n = 0, \dots, \frac{L}{a_x},$$

$$k_x \in \left(0, \frac{2\pi}{a_x}\right) \quad \text{или} \quad -\frac{\pi}{a_x} < k_x < \frac{\pi}{a_x}.$$

Базисные векторы обратной решётки:

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi [\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3]}{\mathbf{a}_1 \cdot [\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3]}.$$

18 Здесь имеется в виду, что от трёх переменных $\mathbf{R}, \mathbf{R}', \mathbf{R}''$ мы можем перейти к трём другим независимым переменным $\mathbf{R}, \mathbf{R}' - \mathbf{R}, \mathbf{R}'' - \mathbf{R}$. И тогда суммирование по \mathbf{R} отделяется. Так вот, из-за суммирования по \mathbf{R} в формуле (9.4) сумма $(\mathbf{k} + \mathbf{k}' + \mathbf{k}'')$ должна быть равна нулю с точностью до (любого) вектора обратной решётки:

$$\mathbf{k} + \mathbf{k}' + \mathbf{k}'' = \mathbf{b}$$

т.е.

$$\sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{K}\mathbf{R}} = N \sum_{\mathbf{b}} \delta_{\mathbf{K}, \mathbf{b}}$$

В результате ангармоническое слагаемое 9.3 можно переписать как 19

$$H_{\text{ВЗ}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k} + \mathbf{k}' + \mathbf{k}'' = \mathbf{b}} B \left(a_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}'} a_{-\mathbf{k}''}^{\dagger} + a_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}'}^{\dagger} a_{-\mathbf{k}''}^{\dagger} \right),$$

где

$$B(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{k}'') = \left(\frac{\hbar}{2M} \right)^{3/2} \frac{1}{\sqrt{\omega \omega' \omega''}} \sum_{\mathbf{R} = \mathbf{R}', \mathbf{R} = \mathbf{R}''} K_2(\mathbf{R} - \mathbf{R}', \mathbf{R} - \mathbf{R}'') \times$$

$$\times \left(1 - e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}' - \mathbf{R})} \right) \left(1 - e^{i\mathbf{k}'(\mathbf{R}'' - \mathbf{R})} \right) \left(e^{i\mathbf{k}''(\mathbf{R}' - \mathbf{R})} - e^{i\mathbf{k}''(\mathbf{R}'' - \mathbf{R})} \right).$$

Два слагаемых в гамильтониане 9.11) эрмитово сопряжены друг другу и описывают обратные друг другу процессы. Первое - это слияние (два в один), а второе - распад фононов (один в два). Если $\mathbf{b} = 0$, то это N-процесс (нормальный). Если $\mathbf{b} \neq 0$, то это U-процесс (Umklapp - процесс переброса).

Рис. 7. N- и U-процессы.

Энергия должна сохраняться,

$$\omega(\mathbf{k}) \pm \omega(\mathbf{k}') - \omega(\mathbf{k}'') = 0$$

(верхний знак - слияние, нижний - распад). При этом полезно иметь в виду соотношения

$$\omega(-\mathbf{k}) = \omega(\mathbf{k}), \quad \omega(\mathbf{k} + \mathbf{b}) = \omega(\mathbf{k})$$

Обсудим некоторые особенности N- и U-процессов. Мы говорим о трёхфононных процессах. В N-процессах все три фонона могут быть длинноволновыми, а могут быть коротковолновыми (т.е. с длиной волны порядка межатомного расстояния). В U-процессе в формуле 9.11 сумма по векторам обратной решётки \mathbf{b} явно не написана, но подразумевается.

Имеется в виду, что $\mathbf{k} + \mathbf{k}' + \mathbf{k}''$ равно любому вектору обратной решётки. по крайней мере два фонона из трёх должны быть коротковолновыми (один - в начальном, один - в конечном состоянии). Третий может быть любым. Это можно углядеть из законов сохранения импульса и энергии:

$$\begin{aligned} \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3 &= \mathbf{b} \\ k_1 \pm k_2 - k_3 &= 0 \end{aligned}$$

где в последнем равенстве (закон сохранения энергии) соответствует слиянию и распаду соответственно. Можно считать, что \mathbf{k}_1 и \mathbf{k}_3 - коротковолновые. Если же третий фонон \mathbf{k}_2 длинноволновый, то $k_1 \approx k_3$. Поэтому возможен, например, процесс, в котором $\mathbf{k}_1 \approx \mathbf{k}_3 \approx \mathbf{b}/2$, т.е. начальный импульс \mathbf{k}_1 сменяется на почти противоположный $-\mathbf{k}_3 \approx -\mathbf{k}_1$ - отсюда и название «процессы переброса».

Теперь выясним вид интеграла столкновений, обусловленного взаимодействием фононов. Рассмотрим вклад от распадного слагаемого $a_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}'}^\dagger a_{-\mathbf{k}''}^\dagger$ в гамильтониане взаимодействия (9.11). У нас задача статфизическая, поэтому интеграл столкновений будет зависеть от чисел заполнения участвующих в процессе состояний, но этим мы займёмся чуть позже. Сначала рассмотрим задачу квантовомеханическую, в которой есть исходный фонон, а оба конечных состояния свободны. Тогда по золотому правилу Ферми можно написать вероятность перехода в единицу времени:

$$w_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f | H_B | i \rangle|^2 \delta(E_f - E_i)$$

В нашем случае эта общая формула даёт

$$w_{\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}', \mathbf{k}''} = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{|B|^2}{N} \delta(\hbar\omega_{\mathbf{k}} - \hbar\omega_{\mathbf{k}'} - \hbar\omega_{\mathbf{k}''}) \delta_{\mathbf{k} + \mathbf{k}' + \mathbf{k}'', \mathbf{b}}$$

- здесь мы ещё учли кроме закона сохранения энергии закон сохранения квазиимпульса (с точностью до любого вектора обратной решётки).

Теперь учтём, что задача у нас статфизическая, поэтому исходное и конечные состояния могут быть заполнены или свободны с вероятностью, определяемой функцией распределения. Интеграл столкновений - это скорость изменения функции распределения. Для интересующего нас состояния (с данной функцией распределения) распадное слагаемое даёт как приходный, так и уходный процессы:

$$\begin{pmatrix} f_{\mathbf{k}} + 1 \\ f_{\mathbf{k}'} - 1 \\ f_{\mathbf{k}''} - 1 \end{pmatrix} \xRightarrow{\text{приход}} \begin{pmatrix} f_{\mathbf{k}} \\ f_{\mathbf{k}'} \\ f_{\mathbf{k}''} \end{pmatrix} \xRightarrow{\text{уход}} \begin{pmatrix} f_{\mathbf{k}} - 1 \\ f_{\mathbf{k}'} + 1 \\ f_{\mathbf{k}''} + 1 \end{pmatrix}.$$

Здесь посередине написана функция распределения, скорость изменения которой нас интересует (точнее, интересует нас скорость изменения функции $f_{\mathbf{k}}$, а по \mathbf{k} и \mathbf{k}' мы потом будем суммировать). Для приходного процесса получаем следующий статистический вес:

$$\langle f | H_{B3} | i \rangle \mapsto \left\langle f_k, f_{k'}, f_{k''} \left| a_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}'}^\dagger a_{-\mathbf{k}''}^\dagger \right| f_k + 1, f_{k'} - 1, f_{k''} - 1 \right\rangle = \sqrt{(f_k + 1) f_{k'} f_{k''}}$$

Для уходного:

$$\langle f | H_{B3} | i \rangle \mapsto \left\langle f_k - 1, f_{k'} + 1, f_{k''} + 1 \left| a_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}'}^\dagger a_{-\mathbf{k}''}^\dagger \right| f_k, f_{k'}, f_{k''} \right\rangle = \sqrt{f_k (f_{k'} + 1) (f_{k''} + 1)}$$

В результате

$$I_{\text{ст. / расп.}} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{k}''} w_{\mathbf{k} \mapsto \mathbf{k}', \mathbf{k}''} [(f_k + 1) f_{k'} f_{k''} - f_k (f_{k'} + 1) (f_{k''} + 1)].$$

Множитель $1/2$ компенсирует тот факт, что поскольку фононы неразличимы, сумма по конечным состояниям учла все физически различные пары конечных фононов $(\mathbf{k}', \mathbf{k}'')$ дважды.

Общее утверждение: равновесная функция распределения зануляет интеграл столкновений. Проверим это на данном примере - зануление происходит из-за статистического множителя:

$$\begin{aligned} (f_k + 1) f_{k'} f_{k''} - f_k (f_{k'} + 1) (f_{k''} + 1) &= e^{\hbar\omega/T} f_0 \cdot f'_0 \cdot f''_0 - f_0 \cdot e^{\hbar\omega'/T} f'_0 \cdot e^{\hbar\omega''/T} f''_0 = \\ &= f_0 f'_0 f''_0 (e^{\hbar\omega/T} - e^{(\hbar\omega' + \hbar\omega'')/T}) = 0 \end{aligned}$$

Поэтому нужно отклонение от равновесной функции распределения:

$$f_k = f_0 + \delta f, \quad f_{k'} = f'_0 + \delta f', \quad f_{k''} = f''_0 + \delta f''$$

и интеграл столкновений можно линеаризовать по малым отклонениям от равновесия:

$$(f_k + 1) f_{k'} f_{k''} - f_k (f_{k'} + 1) (f_{k''} + 1) \approx -\delta f (f'_0 + f''_0 + 1) - \delta f' (f_0 - f''_0) - \delta f'' (f_0 - f'_0)$$

Аналогично можно рассмотреть и процессы слияния (рассеяния), для которых будет

$$I_{\text{с. / сл.}} = \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{k}''} w_{\mathbf{k}, \mathbf{k}' \mapsto \mathbf{k}''} [\dots]$$

где $[\dots]$ - см. задачу Ф4, а

$$w_{\mathbf{k}, \mathbf{k}' \mapsto \mathbf{k}''} = \frac{2\pi}{\hbar^2} \frac{|B|^2}{N} \delta(\omega_k + \omega_{k'} - \omega_{k''}) \delta_{\mathbf{k} + \mathbf{k}' + \mathbf{k}'', \mathbf{b}}$$

В формуле 9.26 нет множителя $1/2$, такого как в 9.22, поскольку здесь один из пары исходных фононов $(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ задан.

Если в процессах, описываемых формулами 9.11 и (9.12), все три фонона - акустические, то нас интересуют малые $\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{k}''$ и $\mathbf{b} = 0$. В этом случае можно выяснить, как ведёт себя B . Вспоминая определение этой величины [формула (9.12)], видим, что под суммой каждая из скобок с экспонентами в длинноволновом пределе оказывается пропорциональна первой степени соответствующего волнового вектора, т.е. первой степени соответствующей частоты. Поэтому в целом в случае N-процессов с тремя акустическими фононами имеем

$$B \propto \sqrt{\omega \omega' \omega''}$$

где коэффициент пропорциональности - функция от углов, описывающих направления импульсов.

Учитывая 9.28, пишем

$$\frac{|B|^2}{N} = A\hbar^3\omega_k\omega_{k'}\omega_{k''}$$

Можно получить оценку

$$A \sim \frac{a_0^3}{mc^2V}$$

где V - объём всего кристалла. Можно это делать, начиная с выражения для ангармонической энергии: при смещении атомов на величину порядка межатомного расстояния a_0 ангармоническая энергия в расчёте на один атом - порядка атомной (а та - порядка mc^2 , где m - средняя масса атома решётки 20, поэтому в формуле 9.2 получаем $K_1(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \mathbf{R}_3) \sim mc^2/a_0^3$ и т.д. Но можно это сообразить и по размерности. Из формул (9.18) и 9.29) следует, что размерность A есть обратная энергия. При этом эта буква может складываться из микроскопических параметров a_0, m, c и полного объёма V (фурье-преобразования и т.д.). Можно сначала проверить, что зависимость от V имеет

²⁰ Считаем, что в атоме решётки порядка 100 нуклонов и $c \sim 1$ км/с. Тогда

$$mc^2 \sim (10^{-27} \cdot 2 \cdot 10^3 \cdot 10^2) \cdot (10^5)^2 \text{ эрг} \sim 2 \cdot 10^{-12} \text{ эрг} \sim 1 \text{ эВ}$$

т.к. $1 \text{ эВ} \approx 1.6 \cdot 10^{-12} \text{ эрг}$. вид $A \propto 1/V$ [это следует из N в знаменателе формулы 9.29]]. Тогда нужную размерность мы получим, обезразмерив объём с помощью a_0^3 и сделав энергию mc^2 . Это и даёт оценку 9.30).

В. Время свободного пробега от взаимодействия фононов.

Для того, чтобы свести интеграл столкновений к форме, соответствующей τ -приближению и таким образом определить время τ и получить для него оценку, мы рассмотрим только часть линеаризованного интеграла столкновений, содержащую отклонение только в $f_k = f_0 + \delta f$ (т.е. в этом вычислении $f_{k'}$ и $f_{k''}$ будем считать равновесными).

Для распадов тогда из 9.25 получаем

$$(f_k + 1)f_{k'}f_{k''} - f_k(f_{k'} + 1)(f_{k''} + 1) \approx -\delta f(f'_0 + f''_0 + 1)$$

В скобке комбинация $(f'_0 + f''_0)$ приводит к индуцированному распаду, а 1 - к спонтанному распаду.

Время релаксации τ определяем так:

$$I_{сТ} = -\frac{\delta f_k}{\tau}$$

От чего зависит: $\tau = \tau(T, \omega)$. Важно, что при этом τ не зависит от функции распределения f_k . Это и означает τ -приближение - формула 9.32 соответствует именно такому виду.

Рассмотрим сначала N-процессы.

Учитывая

$$\sum_{\mathbf{k}'} = V \int \frac{d^3k'}{(2\pi)^3},$$

имеем (k задано, по k' интегрируем; при каждом k' третий волновой вектор k'' определён однозначно законом сохранения импульса, поэтому только одно интегрирование)

$$\begin{aligned} \left(\frac{1}{\tau_N} \right)_{\text{расп.}} &= \pi \hbar V \int \frac{d^3 k'}{(2\pi)^3} A \omega \omega' \omega'' (f_{k'} + f_{k''} + 1) \delta(\omega - \omega' - \omega''), \\ \left(\frac{1}{\tau_N} \right)_{\text{сл.}} &= 2\pi \hbar V \int \frac{d^3 k'}{(2\pi)^3} A \omega \omega' \omega'' (f_{k'} - f_{k''}) \delta(\omega + \omega' - \omega''). \end{aligned}$$

Учтём ещё, что

$$d^3 k' = \frac{\omega'^2 d\omega' d\Omega_{k'}}{c^3}$$

Получим оценки $1/\tau$ для нескольких случаев:

1. Спонтанный распад.

Основной вклад даёт область $\omega \sim \omega' \sim \omega''^{21}$ в результате (учитывая, что $\omega_D = ck_D = c/a_0$ и в подынтегральное выражение входит ω^5)

$$\left(\frac{1}{\tau_N} \right)_{\text{сп.расп.}} \sim \frac{\hbar a_0^3 \omega^5}{mc^5} = \frac{\hbar a_0^3 \omega_D^5}{mc^5} \left(\frac{\omega}{\omega_D} \right)^5 = \omega_D \left(\frac{\hbar \omega_D}{mc^2} \right) \left(\frac{\hbar \omega}{\hbar \omega_D} \right)^5.$$

Оценим численно параметр, который здесь возник (считаем $c \sim 1 \text{ km/s}$):

$$\gamma = \frac{\hbar \omega_D}{mc^2} = \frac{\hbar}{a_0 mc} \sim \frac{10^{-27}}{5 \cdot 10^{-8} \cdot (10^{-27} \cdot 2 \cdot 10^3 \cdot 10^2) \cdot 10^5} \sim 10^{-3}.$$

Важное качественное обстоятельство: спонтанный распад не зависит от температуры (т.к. в формулу для τ не вошли функции распределения).

2. Индуцированный распад холодного фонона.

Для индуцированных распадов помимо частоты фонона возникает второй важный энергетический масштаб - температура. Поэтому нужно рассматривать разные возможные соотношения между $\hbar\omega$ и T .

Холодный фонон означает фонон с $\hbar\omega \ll T$. Из-за закона сохранения энергии из холодного фонона могут родиться только два холодных. Основной вклад даёт область $\hbar\omega \sim \hbar\omega' \sim \hbar\omega'' \ll T$, при этом $f(\omega) \approx T/\hbar\omega$. Получается комбинация вида

$$\omega^5 (f_{\omega'} + f_{\omega''})$$

В результате

$$\left(\frac{1}{\tau_N} \right)_{\text{инд.расп.}} \sim \omega_D \left(\frac{\hbar \omega_D}{mc^2} \right) \frac{(\hbar \omega)^4 T}{(\hbar \omega_D)^5}.$$

3. Слияние для холодного фонона.

В этом случае $\hbar\omega \ll T$, при этом фонон, с которым сливаемся, может быть тепловым с $\hbar\omega' \sim T$, тогда и получающийся фонон будет тепловым. Именно этот случай даёт основной вклад: $\hbar\omega' \sim \hbar\omega'' \sim T$. При этом в разности $(f_{\omega'} - f_{\omega''})$, входящей в формулу 9.35), каждое слагаемое порядка единицы, а разность мала

21 Дело в том, что в подынтегральной функции в формуле (9.34) есть произведение частот $\omega\omega'\omega''$. А в силу дельта-функции должен выполняться закон сохранения $\omega = \omega' + \omega''$, поэтому по крайней мере одна из частот рождающихся фононов (ω' или ω'') должна быть порядка ω . А вторая - либо тоже $\sim \omega$, либо $\ll \omega$. Но если она много меньше, то мы сильно уменьшаем значение произведения под интегралом, поэтому этой случай даст малый вклад. по параметру $\hbar\omega/T$. Но это ещё не всё. В этом случае есть хитрость, связанная с дельта-функцией $\delta(\omega + \omega' - \omega'')$, обеспечивающей закон сохранения энергии. Дело в том, что если все три фонона принадлежат одной акустической ветви с одинаковой скоростью звука, то законы сохранения энергии и импульса дают соотношения

$$\begin{aligned}\mathbf{k} + \mathbf{k}' + \mathbf{k}'' &= 0, \\ k + k' - k'' &= 0,\end{aligned}$$

и единственный вариант (при заданном \mathbf{k} исходного фонона) этим соотношениям удовлетворить - это направить \mathbf{k}' и \mathbf{k}'' вдоль той же прямой (иначе по неравенству треугольника $k + k' > k''$). Тогда угловое интегрирование по d^3k' вырождается (даёт одну точку вместо интегрирования по поверхности, как могло бы быть). Значит, необходимо участие фононов двух разных ветвей (при этом тепловые фононы \mathbf{k}' и \mathbf{k}'' должны относиться к одной ветви - переключить ветвь при столь малой разнице и между импульсами, и между энергиями, не получится; а вот исходный холодный фонон должен быть с другой ветви). Тогда

$$\omega'' - \omega' \equiv \omega_{-\mathbf{k}''} - \omega_{\mathbf{k}'} = \frac{\partial \omega_{\mathbf{k}'}}{\partial \mathbf{k}'} \mathbf{k} = c' k \cos \theta = \omega \frac{c'}{c} \cos \theta$$

где θ - угол между \mathbf{k} и $\mathbf{k}' \approx -\mathbf{k}''$. Подставляя это в дельта-функцию, получаем

$$\delta(\omega + \omega' - \omega'') = \delta\left(\omega - \omega \frac{c'}{c} \cos \theta\right) = \frac{1}{\omega} \delta\left(1 - \frac{c'}{c} \cos \theta\right).$$

Таким образом, получилась дополнительная степень ω в знаменателе, а дельтафункция снимется угловым интегрированием в d^3k' , поэтому в целом из комбинации $d\omega' \delta(\omega + \omega' - \omega'')$ мы зарабатываем безразмерный параметр ω'/ω (а раньше получали единицу, т.к. говорили, что дельта-функция снимается интегрированием по частоте). Необходимо уточнить, что такое возможно только если $c'/c > 1$, т.е. исходный фонон должен быть с ветви с не самой большой скоростью, т.е. он является поперечным.

[Надо ли с точки зрения этого рассуждения пересмотреть предыдущие случаи? На самом деле, достаточно уточнить, что в рассмотренных выше случаях распада исходный фонон из-за неравенства треугольника $k < k' + k''$ не может быть с ветви с наименьшей скоростью звука. А при интегрировании больших или малых параметров в этом случае не возникает, т.к. нет разделения масштабов частот.] В результате получается комбинация вида

$$\omega\omega'\omega'' (f_{\omega'} - f_{\omega''}) \frac{\omega'}{\omega} \sim \omega T^4$$

В итоге

$$\left(\frac{1}{\tau_N}\right)_{\text{сл.}} \sim \omega_D \left(\frac{\hbar\omega_D}{mc^2}\right) \frac{\hbar\omega T^4}{(\hbar\omega_D)^5}.$$

4. Распад (спонтанный и индуцированный) и слияние тепловых фононов.

Оценку для случая $\hbar\omega \sim T$ можно получить из вышеприведённых формул (они все стыкуются в этом случае):

$$\frac{1}{\tau_N} \sim \omega_D \left(\frac{\hbar \omega_D}{mc^2} \right) \left(\frac{T}{T_D} \right)^5.$$

5. Процессы переброса для тепловых фононов (при $T \ll T_D$).

При $T \ll T_D$ исходный импульс теплового фонона мал по сравнению с дебаевским:

$$k = \frac{\omega}{c} \sim \frac{T/\hbar}{c} \ll \frac{T_D}{\hbar c} \sim k_D$$

Распады с перебросом (как спонтанные, так и индуцированные) оказываются невозможны по следующей причине. В силу закона сохранения энергии при распаде имеем $k = k' + k''$, поэтому раз $k \ll k_D$, то и $k', k'' \ll k_D$. Закон сохранения импульса, который для процесса переброса имеет вид $\mathbf{k} + \mathbf{k}' + \mathbf{k}'' = \mathbf{b}$ с ненулевой правой частью, не может быть выполнен. Иными словами, исходный импульс недостаточен для процесса переброса.

Слияния при $T \ll T_D$ возможны, мы можем рассмотреть слияние с любым фононом, не обязательно тепловым - этот процесс может содержать малость из-за функции распределения, но он возможен. Основной вклад будет от $\omega' \sim \omega'' \sim \omega_D$ (нам нужны большие частоты, чтобы был переброс). Получается комбинация вида

$$\omega \omega'^3 \omega'' (f_{\omega'} - f_{\omega''}) \sim T \omega_D^4 e^{-T_D/T}$$

[Проблем с неравенством треугольника здесь нет, т.к. это процесс переброса. А разность $\omega'' - \omega' = \omega$ имеет порядок T/\hbar , в результате чего разность функций распределения оказывается порядка каждой из этих функций распределения.] В результате

$$\frac{1}{\tau_U} \sim \omega_D \left(\frac{\hbar \omega_D}{mc^2} \right) \frac{T}{T_D} e^{-T_D/T}$$

10.4.9 ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ РЕШЁТКИ ПРИ НИЗКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ ($T < T_D$)

Отталкиваясь от формулы 8.14 и используя понятие удельной теплоёмкости фононов с импульсом k , $c_{\text{ph}}(k) = \partial (\hbar \omega(k) f_0) / \partial T$, мы можем вместо 8.15 записать ту же самую оценку в немного другом виде:

$$\kappa \sim \int d^3k \cdot c_{\text{ph}}(k) l c, \quad l = c\tau.$$

Если же τ не зависит от k (а мы ниже будем рассматривать тепловые фононы, для которых это можно считать справедливым, т.к. их частота задана температурой), то интегрирование относится только к теплоёмкости на импульсе и даёт в результате удельную теплоёмкость с учётом всего спектра (полную в этом смысле):

$$\kappa \sim c_{\text{ph}} l c$$

Мы считаем, что есть образец с некоторым поперечным размером d , а теплопроводность мы измеряем вдоль образца. При самых низких температурах длина свободного пробега определяется рассеянием на стенках, поэтому $l \sim d$, что с учётом

$$c_{\text{ph}} \sim \left(\frac{T}{\hbar c} \right)^3 \sim k_D^3 \left(\frac{T}{T_D} \right)^3$$

даёт

$$\kappa \sim \frac{\omega_D^3}{c^2} \left(\frac{T}{T_D} \right)^3 d.$$

Это - закон Казимира T^3 , который мы уже получали [см. 8.15 - теперь мы уточнили, что за τ там возникает]. Соответствует баллистическому (кнудсеновскому на гидродинамическом языке) режиму - фононы рассеиваются на стенках, между рассеяниями летят по прямой.

При самых низких T

$$d \ll l_N \ll l_U,$$

где $l_N = c\tau_N$, $l_U = c\tau_U$.

Закон T^3 работает, пока $d < l_N$, где l_N обусловлена нормальными процессами. Граница этого режима - некоторая температура T_1 , определяемая условием

$$\frac{1}{d} = \frac{1}{\tau_N c} = \frac{\omega_D}{c} \gamma \left(\frac{T_1}{T_D} \right)^5$$

откуда

$$T_1 = T_D \left(\frac{1}{dk_D \gamma} \right)^{1/5}$$

Если взять $d \sim 1$ см, то получаем оценку

$$T_1 = T_D \left(\frac{5 \cdot 10^{-8}}{1 \cdot 10^{-3}} \right)^{1/5} \approx \frac{T_D}{10}.$$

С повышением T длины свободного пробега l_N и l_U убывают, поэтому мы можем попасть в режим

$$l_N \ll d \ll l_U.$$

В этом режиме мы оказываемся при $T > T_1$ (что означает $l_N < d$). Казалось бы, тогда в формуле 10.2 просто нужно в качестве l взять l_N . Однако, всё несколько хитрее. Дело в том, что при вычислении теплопроводности важны процессы рассеяния, меняющие импульс фононной системы в целом. Рассеяние на стенках относилось именно к таким процессам. А вот N-процессы полный импульс фононной системы не меняют:

$$\frac{d\mathbf{P}}{dt} = \sum_{\mathbf{k}} \hbar \mathbf{k} \frac{df_{\mathbf{k}}}{dt} = \sum_{\mathbf{k}} \hbar \mathbf{k} I_{\text{cr/N}} = 0$$

Поэтому режим движения фононов изменился, но изменение полного импульса попрежнему будет определяться рассеянием на стенках.

Движение между стенками раньше было баллистическим, а теперь стало диффузным с шагом l_N . Чтобы сместиться на расстояние d , нужно сделать $(d/l_N)^2$ шагов, поэтому полный путь, который надо пролететь до столкновения со стенкой, есть

$$l_{\text{eff}} \sim l_N \left(\frac{d}{l_N} \right)^2.$$

В результате

$$\kappa \sim c_{\text{ph}} \frac{d^2}{\tau_N c} \sim \frac{\omega_D^4}{c^3} \gamma \left(\frac{T}{T_D} \right)^8 d^2.$$

Это называется область Гуржи: пуазейлево течение фононов (как при ламинарном течении вязкой жидкости по трубе), фононы рассеиваются на стенках, но до них летят не по прямой.

При дальнейшем росте T включатся U-процессы, и мы можем попасть в режим

$$l_U \ll \frac{d^2}{l_N}$$

Это происходит при T_2 , таком что

$$l_{\text{eff}} = l_U, \quad d^2 = l_N l_U = c^2 \tau_N \tau_U$$

U-процессы приводят к уходу импульса из фононной системы, поэтому они вполне эффективны для установления конечного значения теплопроводности (так же, как и рассеяния на стенках). Поэтому в этом режиме в качестве длины свободного пробега в формулу 10.2 войдёт просто l_U , и мы получим

$$\kappa \sim c_{\text{ph}} l_U c \sim \frac{\omega_D^2}{\gamma c} \left(\frac{T}{T_D} \right)^2 e^{T_D/T}.$$

Такой закон был получен Пайерлсом. Эта функция убывает с ростом температуры при $T < T_D/2$ [мы сейчас и не выходим за границы этого диапазона, т.к. и теплоёмкость (10.3), и время свободного пробега 9.50 были получены при температурах, малых по сравнению с дебаевской].

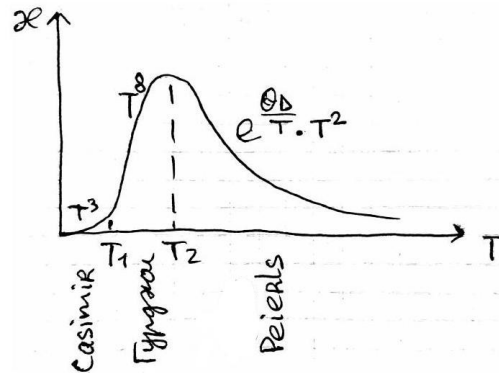


Рис. 8. Три режима $\kappa(T)$. Это один из возможных сценариев для температурной зависимости теплопроводности в трубке диаметра d (при не слишком малых d).

В образцах достаточно малых размеров d может оказаться, что с ростом температуры $l_U \sim l_N$ [из наших результатов для τ следует, что это происходит при $T/T_D \sim 0.1$] стало раньше, чем l_N стало меньше d , т.е. имеет место ситуация

$$d \ll l_N \sim l_U$$

Тогда области Гуржи не будет, а закон Казимира сменится законом Пайерлса при $d \sim l_U$

10.4.10 РАССЕЙЯНИЕ ФОНОНОВ НА ПРИМЕСЯХ

А. Время свободного пробега и теплопроводность.

Время свободного пробега при рассеянии на примесях можно записать через сечение рассеяния: 22

$$\frac{1}{\tau_i} = N_i c \sigma$$

Ранее [см. (7.7)] мы уже получали закон Рэлея для частотной зависимости сечения рассеяния при рассеянии на примесях: $\sigma \propto \omega^4$. Префактор можно восстановить по размерности: $\sigma \propto (R^6/c^4)\omega^4$, где R - размер примеси. Учтём, что $R \sim a$ и выразим скорость звука через дебаевскую частоту: $c \sim \omega_D a$. Ещё должен быть безразмерный множитель, описывающий силу примеси. Например, для изотопических примесей получается малость $(\delta m/m)^2$. В результате

$$\frac{1}{\tau_i} \sim \left(\frac{\delta m}{m}\right)^2 N_i a^3 \omega_D \left(\frac{\omega}{\omega_D}\right)^4.$$

Вспоминая вывод коэффициента теплопроводности 8.15 при низких температурах ($T \ll T_D$), мы можем приспособить его к случаю, когда рассеяние определяется примесями. При выводе закона Казимира 8.15 из формулы 8.14 предполагалось, что τ не зависит от частоты, что в жизни может быть обусловлено рассеянием на стенках. Если же речь идёт о примесях, то зависимость от частоты есть, поэтому подставим 11.2 в 8.15:

$$\kappa \sim \int dk \cdot k^2 \tau_i \hbar \omega c^2 \cdot \frac{\hbar \omega}{T^2} \frac{1}{\text{sh}^2 \frac{\hbar \omega}{2T}}.$$

Переходя к интегрированию по ω и анализируя поведение подынтегрального выражения на малых ω , находим поведение интеграла вблизи нижней границы:

$$\kappa \propto \int_0 d\omega \cdot \omega^2 \frac{1}{\omega^4} \omega \cdot \frac{\omega}{\omega^2} \propto \int_0 \frac{d\omega}{\omega^2},$$

22 В цилиндр длины l_i и сечения σ попадает ровно одна примесь, т.е. $l_i \sigma N_i = 1$. т.е интеграл расходится. Но это просто означает, что рассеяния на примесях сами по себе не могут дать конечного теплового сопротивления, для этого необходимо вспомнить об остальных механизмах рассеяния. В то же время, рассеяние на примесях похоже на процессы переброса в том смысле, что в этих процессах не сохраняется импульс. Поэтому при $\tau_i < \tau_U$ роль процессов переброса переходит к примесному рассеянию.

В. Двухступенчатая релаксация.

Полезно ещё иметь в виду следующую картину релаксации функции распределения за счёт различных процессов. Вот есть $\tau_i \propto 1/\omega^4$, а есть на малых частотах рассеяние холодных фононов $\tau_N \propto 1/\omega^{23}$ Поэтому при малых ω имеем $\tau_N < \tau_i$ и рассеяние определяется τ_N . Но N-процессы не приводят к релаксации импульса всей фононной системы в целом. Поэтому будет происходить следующая двухступенчатая релаксация. Сначала неравновесная функция распределения $f_{\mathbf{k}}$ за времена порядка τ_N будет релаксировать к равновесной (релаксация по числу частиц), но с ненулевой средней скоростью (определяемой исходным распределением):

$$f_{\mathbf{k}} \mapsto f_0 \left(\frac{\hbar \omega - \hbar \mathbf{k} \mathbf{u}}{T} \right), \quad \mathbf{u} = \frac{\sum_{\mathbf{k}} \mathbf{v}_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}}}{\sum_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}}}$$

А уже затем за время τ_i отрелаксирует импульс:

$$f_0 \left(\frac{\hbar \omega - \mathbf{k} \mathbf{u}}{T} \right) \mapsto f_0 \left(\frac{\hbar \omega}{T} \right)$$

Если же, наоборот, $\tau_i < \tau_N$, то сначала произойдёт изотропизация, т.е. распределение за время τ_i отрелаксирует по импульсу к некоторому изотропному, но нетепловому

(примеси упругие, поэтому направления импульсов они перемешивают, но модули импульсов не меняют):

$$f_k \mapsto \overline{f_k} = f_k$$

а затем за время τ_N произойдёт релаксация к равновесной функции распределения:

$$f_k \mapsto f_0 \left(\frac{\hbar\omega}{T} \right)$$

²³ Вспоминаем, что для спонтанного распада $\tau_N^{-1} \propto \omega^5$, для индуцированного распада холодного фонона $\tau_N^{-1} \propto \omega^4$, для слияния холодного фонона $\tau_N^{-1} \propto \omega$.

10.4.11 ВТОРОЙ ЗВУК

А. Гидродинамические уравнения.

Фононный газ похож на газ обычных частиц, особенно при низких температурах, когда рассеяния обусловлены N-процессами (а процессами переброса можно пренебречь), т.е. при $\tau_N \ll \tau_U$. В этом случае законы сохранения энергии и импульса - обычные. В обычном газе может распространяться звук (колебания плотности). Оказывается, что в газе фононов тоже могут распространяться колебания плотности. Колебания плотности фононного газа (т.е. колебания температуры) называются вторым звуком (первый звук - это сами фононы).

Мы будем предполагать, что при рассматриваемых нами процессах температура успевает установиться локально. Если ω и λ - частота и длина волны второго звука, то для этого требуется выполнение условий

$$\omega\tau_N \ll 1, \quad l_N \ll \lambda.$$

Кин.уравнение:

$$\frac{\partial f_{\mathbf{k}}}{\partial t} + \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \frac{\partial f_{\mathbf{k}}}{\partial \mathbf{r}} = I_{\text{cr/N}}$$

Плотность энергии и импульса фононного газа:

$$E(\mathbf{r}, t) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \hbar\omega_k f_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t),$$

$$\mathbf{P}(\mathbf{r}, t) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \hbar\mathbf{k} f_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t).$$

Домножим 12.2 либо на $\hbar\omega_k$, либо на $\hbar\mathbf{k}$ и проинтегрируем по импульсам (индекс k опускаем, чтобы не было путаницы с пространственными индексами):

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \sum_j \frac{\partial}{\partial r_j} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \hbar\omega v_j f = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \hbar\omega I_{\text{cr/N}},$$

$$\frac{\partial P_i}{\partial t} + \sum_j \frac{\partial}{\partial r_j} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \hbar k_i v_j f = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \hbar k_i I_{\text{cr/N}}.$$

В правых частях получаются нули в силу закона сохранения энергии и импульса при нормальных столкновениях:

$$\begin{aligned}\frac{dE}{dt} &= \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \hbar\omega I_{c/N} = 0, \\ \frac{d\mathbf{P}}{dt} &= \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \hbar\mathbf{k} I_{c/N} = 0.\end{aligned}$$

Определяя

$$\begin{aligned}\mathbf{Q} &= \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \hbar\omega \mathbf{v} f, \\ \Pi_{ij} &= \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \hbar k_i v_j f\end{aligned}$$

получаем из кин.уравнения общий вид так называемых гидродинамических уравнений (как и в гидродинамике, они написаны на макроскопические плотности и потоки):

$$\begin{aligned}\frac{\partial E}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{Q} &= 0, \\ \frac{\partial P_i}{\partial t} + \sum_j \nabla_j \Pi_{ij} &= 0.\end{aligned}$$

Наглядный смысл \mathbf{Q} - поток тепла, Π_{ij} - поток i -той компоненты импульса в направлении j .

Если есть только одна ветвь спектра.²⁴ в изотропном случае пишем $\omega = ck$, $\mathbf{v} = c\mathbf{k}/k$, и получаем

$$\mathbf{Q} = c^2 \mathbf{P}, \quad \Pi_{ij} = c \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{\hbar k_i k_j}{k} f$$

В. Второй звук и его скорость.

Переходя теперь непосредственно к задаче о втором звуке, учтём, что второй звук является слабым возмущением и в главном порядке не нарушает изотропию функции распределения по \mathbf{k} (анизотропию можно учесть, но это будут малые поправки). Тогда (при наличии только одной ветви спектра) мы можем преобразовать тензор потока импульса Π_{ij} следующим образом:

$$\Pi_{ij} = c \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{\hbar \delta_{ij}}{3} \frac{k^2}{k} f = \frac{\delta_{ij}}{3} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \hbar\omega f = \frac{\delta_{ij}}{3} E.$$

В результате уравнения 12.11 – 12.12 принимают вид

$$\begin{aligned}\frac{\partial E}{\partial t} + c^2 \operatorname{div} \mathbf{P} &= 0 \\ \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial t} + \frac{1}{3} \operatorname{grad} E &= 0\end{aligned}$$

²⁴ Наличие только одной ветви спектра, на самом деле, было заложено в наших формулах сразу, т.к. законы сохранения энергии и импульса были написаны для одной ветви. А при наличии нескольких ветвей энергия и импульс могли бы передаваться между ними. откуда следует

$$\frac{\partial^2 E}{\partial t^2} - \frac{c^2}{3} \Delta E = 0$$

Это волновое уравнение для второго звука (т.е. для колебаний температуры), его скорость есть $c_2 = c/\sqrt{3}$.

Про распространение температуры мы обычно думаем как про диссипативный процесс. Почему же здесь незатухающие волны? Иными словами, если локально вкачать энергию, почему будет не диффузия (уравнение теплопроводности), а распространение волн (волновое уравнение)? Дело в том, что мы учли только N-процессы, при которых полный импульс фононной системы сохраняется. Если же учесть U-процессы или рассеяние на примесях, то возникает возможность сбросить импульс (решётке или примесям соответственно), и это приведёт к диффузии.

Экспериментально наблюдать второй звук можно, например, запуская импульс тепла с одной стороны и детектируя его при помощи сверхпроводящего болометра с другой стороны (например, см. V. Narayanamurti, R. Dynes, "Observation of Second Sound in Bismuth", Phys. Rev. Lett. 28, 1461 (1972)).

10.4.12 МЕТОДЫ РАССЕЯНИЯ

А. Изучение структурных свойств твёрдых тел методами упругого рассеяния.

Запускаем в кристаллический образец волну, слабо взаимодействующую с кристаллом (например, медленные нейтроны, рентген). На входе - волна с волновым вектором \mathbf{k} , на выходе - с волновым вектором \mathbf{k}' . Вероятность рассеяния $w_{fi} \propto |M|^2$ (она же пропорциональна сечению рассеяния). При этом

$$M = \left\langle f \left| \int e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{r}} V(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} d^3\mathbf{r} \right| i \right\rangle$$

где $|i\rangle$ и $|f\rangle$ - начальное и конечное состояние образца, а потенциал взаимодействия волны и образца можно записать в виде суммы по атомам:

$$V(\mathbf{r}) = \sum_l V_l(\mathbf{r} - \mathbf{r}_l)$$

Определив вектор рассеяния $\mathbf{K} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$, можем записать интеграл в формуле (13.1) в виде

$$\sum_l \int e^{-i\mathbf{K}(\mathbf{r}-\mathbf{r}_l)} e^{-i\mathbf{K}\mathbf{r}_l} V_l(\mathbf{r} - \mathbf{r}_l) d^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}_l) = \sum_l V_l(\mathbf{K}) e^{-i\mathbf{K}\mathbf{r}_l}$$

Таким образом,

$$|M|^2 \propto \left| \sum_l V_l(\mathbf{K}) e^{-i\mathbf{K}\mathbf{r}_l} \right|^2 = \sum_{l,m} V_l(\mathbf{K}) V_m^*(\mathbf{K}) e^{-i\mathbf{K}(\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_m)}.$$

В потенциале (13.2) есть когерентная часть (одинаковая для всех атомов) и добавка, разная для разных атомов (обусловлена локальными дефектами кристаллической решётки, например, изотопическими примесями, либо различными ориентациями спинов ядер относительно спинов падающих частиц):

$$V_l = V + \delta V_l$$

Если между величинами δV_l и δV_m нет корреляции, то статистическое среднее (по ансамблю) имеет вид

$$\overline{V_l V_m^*} = |V|^2 + \delta_{lm} \overline{|\delta V|^2},$$

поэтому

$$\overline{|M|^2} \propto \left| V(\mathbf{K}) \sum_l e^{-i\mathbf{K}\mathbf{r}_l} \right|^2 + N \overline{|\delta V|^2}.$$

Первое слагаемое - когерентное брэгговское рассеяние (результат интерференции волн, рассеявшихся на разных атомах), второе - диффузное рассеяние (знает про один атом, не знает про интерференцию).

Рассмотрим когерентное рассеяние, учтя, что есть равновесные положения атомов и малые смещения относительно них, $\mathbf{r}_l = \mathbf{R}_l + \mathbf{u}_l$. Тогда от равновесных положений получится:

$$M \propto V(\mathbf{K}) \sum_l e^{-i\mathbf{K}\mathbf{R}_l} = V(\mathbf{K}) N \sum_{\mathbf{b}} \delta_{\mathbf{K},\mathbf{b}}$$

где \mathbf{b} - векторы обратной решётки. Таким образом, получаются брэгговские пики рассеяния: амплитуда и интенсивность рассеянных волн максимальна в таких направлениях, для которых волновой вектор рассеяния совпадает с одним из векторов обратной решётки.

Векторы смещения можно разложить на фурье-гармоники. Рассмотрим одну из них:

$$\mathbf{r}_l = \mathbf{R}_l + \mathbf{a} \sin \mathbf{Q}\mathbf{R}_l$$

Тогда

$$\begin{aligned} M &\propto V(\mathbf{K}) \sum_l e^{-i\mathbf{K}(\mathbf{R}_l + \mathbf{a} \sin \mathbf{Q}\mathbf{R}_l)} = V(\mathbf{K}) \sum_l e^{-i\mathbf{K}\mathbf{R}_l} \left(1 - i\mathbf{K}\mathbf{a} \frac{e^{i\mathbf{Q}\mathbf{R}_l} - e^{-i\mathbf{Q}\mathbf{R}_l}}{2i} \right) = \\ &= V(\mathbf{K}) \sum_l \left[e^{-i\mathbf{K}\mathbf{R}_l} - \frac{\mathbf{K}\mathbf{a}}{2} \left(e^{-i(\mathbf{K}-\mathbf{Q})\mathbf{R}_l} - e^{-i(\mathbf{K}+\mathbf{Q})\mathbf{R}_l} \right) \right] \end{aligned}$$

Поэтому в дополнение к основным брэгговским пикам ($\delta_{\mathbf{K},\mathbf{b}}$) появляются ещё и сателлиты ($\delta_{\mathbf{K},\mathbf{b}+\mathbf{Q}}$ и $\delta_{\mathbf{K},\mathbf{b}-\mathbf{Q}}$). Так в эксперименте можно «увидеть» смещения атомов относительно положений равновесия.

Таким образом, с помощью упругого рассеяния можно исследовать структуру кристалла (положения атомов решётки).

В. Неупругое рассеяние нейтронов.

Идея метода неупругого рассеяния состоит в том, что рассеивая на кристалле нейтроны неупругим образом, с возбуждением фононов, мы можем, детектируя вылетающие нейтроны, получить информацию о фононах в кристалле.

Рассмотрим вероятность рассеяния (пропорциональную сечению рассеяния):

$$\begin{aligned} w_{fi} &= \frac{2\pi}{\hbar} |M|^2 \delta(\varepsilon_f - \hbar\omega - \varepsilon_i), \\ M &= \left\langle f \left| \sum_l e^{-i\mathbf{K}\mathbf{r}_l} \right| i \right\rangle V(\mathbf{K}), \quad \mathbf{K} = \mathbf{k}' - \mathbf{k} \end{aligned}$$

Здесь $|i\rangle$ и $|f\rangle$ - начальное и конечное состояние кристалла, $\hbar\omega$ - переданная кристаллу энергия, и мы рассматриваем только когерентную часть рассеяния.

Если нас интересует полная вероятность перехода, то надо просуммировать по конечным состояниям. Тогда вместо $|M|^2$ получается выражение, которое можно

записать как произведение двух матриц: $\sum_f |M_{fi}|^2 = \sum_f M_{if}^\dagger M_{fi}$. Кроме того, нужно учесть, что образец находится в исходном состоянии $|i\rangle$ с некоторой вероятностью p_i (в тепловом равновесии это гиббсовское распределение). В результате получаем

$$w = \frac{2\pi}{\hbar} |V(\mathbf{K})|^2 \sum_{l,m;i,f} p_i \langle i | e^{i\mathbf{K}\mathbf{r}_l} | f \rangle \langle f | e^{-i\mathbf{K}\mathbf{r}_m} | i \rangle \delta(\varepsilon_f - \hbar\omega - \varepsilon_i)$$

Используя интегральное представление дельта-функции и гейзенберговское представление операторов,

$$2\pi\delta(\varepsilon_f - \hbar\omega - \varepsilon_i) = \frac{1}{\hbar} \int dt e^{i(\varepsilon_f/\hbar - \omega - \varepsilon_i/\hbar)t},$$

$$e^{iH_0 t/\hbar} \mathbf{r}_m e^{-iH_0 t/\hbar} = \mathbf{r}_m(t)$$

можем написать

$$w = \frac{1}{\hbar^2} |V(\mathbf{K})|^2 \int dt e^{-i\omega t} \sum_{l,m;i,f} p_i \langle i | e^{i\mathbf{K}\mathbf{r}_l(0)} | f \rangle \langle f | e^{-i\mathbf{K}\mathbf{r}_m(t)} | i \rangle =$$

$$= \frac{1}{\hbar^2} |V(\mathbf{K})|^2 \int dt e^{-i\omega t} \sum_{l,m} \langle e^{i\mathbf{K}\mathbf{r}_l(0)} e^{-i\mathbf{K}\mathbf{r}_m(t)} \rangle_T,$$

где $\langle \dots \rangle_T$ означает квантово-механическое среднее и статистическое среднее (гиббсовское) при температуре T .

Этот результат полезно связать с величиной, называемой динамическим структурным фактором (и являющейся фурье-образом корреляционной функции плотностей):

$$S(\mathbf{K}, \omega) = \int dt e^{-i\omega t} \sum_{l,m} \langle e^{i\mathbf{K}\mathbf{r}_l(0)} e^{-i\mathbf{K}\mathbf{r}_m(t)} \rangle_T =$$

$$= \int dt d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{r}' e^{-i\omega t + i\mathbf{K}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} \langle \rho(\mathbf{r}, 0) \rho(\mathbf{r}', t) \rangle_T,$$

где оператор плотности (точнее, концентрации) есть

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \sum_l \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_l(t))$$

Таким образом,

$$w = \frac{1}{\hbar^2} |V(\mathbf{K})|^2 S(\mathbf{K}, \omega)$$

Нам нужно разобраться с выражением

$$S(\mathbf{K}, t) = \sum_{l,m} \langle e^{i\mathbf{K}\mathbf{r}_l(0)} e^{-i\mathbf{K}\mathbf{r}_m(t)} \rangle_T$$

Запишем операторы координаты через равновесные положения атомов и операторы смещения:

$$\mathbf{r}_l(0) = \mathbf{R}_l + \mathbf{u}_l(0),$$

$$\mathbf{r}_m(t) = \mathbf{R}_m + \mathbf{u}_m(t),$$

тогда

$$S(\mathbf{K}, t) = \sum_{l,m} e^{i\mathbf{K}(\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_m)} \langle e^{i\mathbf{K}\mathbf{u}_l(0)} e^{-i\mathbf{K}\mathbf{u}_m(t)} \rangle_T$$

Проблема с экспонентами, содержащими операторы смещения, состоит в том, что операторы $\mathbf{u}(t)$ в разные моменты времени, вообще говоря, не коммутируют. Чтобы в этом убедиться, запишем их во вторично квантованном виде:

$$\mathbf{u}_m(t) = \sqrt{\frac{\hbar}{2MN}} \sum_{\mathbf{q},s} \frac{\mathbf{e}_{\mathbf{q}s}}{\sqrt{\omega_{\mathbf{q}s}}} (a_{\mathbf{q}s} e^{i\varphi_m} + a_{\mathbf{q}s}^\dagger e^{-i\varphi_m}), \quad \varphi_m = \mathbf{q}\mathbf{R}_m - \omega_{\mathbf{q},s}t.$$

Тогда

$$\begin{aligned} [\mathbf{u}_l(0), \mathbf{u}_m(t)] &= \frac{\hbar}{2MN} \sum_{\mathbf{q},\mathbf{q}',s,s'} \frac{\mathbf{e}_{\mathbf{q}s}\mathbf{e}_{\mathbf{q}'s'}}{\sqrt{\omega_{\mathbf{q}s}\omega_{\mathbf{q}'s'}}} \left(\delta_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} \delta_{ss'} e^{i\mathbf{q}l - i\mathbf{q}'\mathbf{R}_m + i\omega_{\mathbf{q}'s'}t} - \delta_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} \delta_{ss'} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}_l + i\mathbf{q}'\mathbf{R}_m - i\omega_{\mathbf{q}'s'}t} \right) = \\ &= \frac{i\hbar}{MN} \sum_{\mathbf{q},s} \frac{\sin \varphi_{lm}}{\omega_{\mathbf{q}s}}, \quad \varphi_{lm} = \varphi_l(0) - \varphi_m(t). \end{aligned}$$

Таким образом, коммутатор действительно не ноль, однако является числом.

Вспомним полезный факт из жизни операторов. Если есть операторы A и B такие, что

$$[A, [A, B]] = [B, [A, B]] = 0$$

(у нас это так, поскольку коммутатор - число), то из общей формулы БейкераКэмпбелла-Хаусдорфа получается

$$e^A e^B = e^{A+B} e^{\frac{1}{2}[A,B]}$$

Таким образом,

$$S(\mathbf{K}, t) = \sum_{l,m} e^{i\mathbf{K}(\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_m)} \left\langle e^{i\mathbf{K}(\mathbf{u}_l(0) - \mathbf{u}_m(t))} \right\rangle_T e^{\frac{1}{2}[\mathbf{K}\mathbf{u}_l(0), \mathbf{K}\mathbf{u}_m(t)]}$$

Для упрощения будем рассматривать изотропную среду, предполагая, что все фононные колебания с заданным волновым вектором \mathbf{q} вырождены. Тогда мы можем выбрать одно из трёх направлений поляризации параллельным \mathbf{K} . В этом случае получаем

$$S(\mathbf{K}, t) = \sum_{l,m} e^{i\mathbf{K}(\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_m)} \left\langle e^{iK(u_l(0) - u_m(t))} \right\rangle_T e^{\frac{K^2}{2}[u_l(0), u_m(t)]}$$

где u - амплитуда колебания вдоль \mathbf{K} . Для гармонического осциллятора

$$\left\langle e^{iK(u_l(0) - u_m(t))} \right\rangle_T = e^{-\frac{K^2}{2} \langle (u_l(0) - u_m(t))^2 \rangle_T}$$

Расписывая среднее в экспоненте, получаем:

$$\begin{aligned} \langle (u_l(0) - u_m(t))^2 \rangle_T &= \frac{\hbar}{2MN} \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{\omega_{\mathbf{q}}} \left\langle \left(a_{\mathbf{q}} (e^{i\varphi_l(0)} - e^{i\varphi_m(t)}) + a_{\mathbf{q}}^\dagger (e^{-i\varphi_l(0)} - e^{-i\varphi_m(t)}) \right)^2 \right\rangle_T = \\ &= \frac{\hbar}{2MN} \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{\omega_{\mathbf{q}}} \langle a_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{q}}^\dagger + a_{\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{q}} \rangle_T (2 - 2 \cos \varphi_{lm}) = \\ &= \frac{\hbar}{MN} \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{\omega_{\mathbf{q}}} (2n_{\mathbf{q}} + 1) (1 - \cos \varphi_{lm}). \end{aligned}$$

Здесь суммирование по (трём) ветвям спектра пропало, т.к. для каждого \mathbf{q} мы оставили одну ветвь, у которой поляризация параллельна \mathbf{K} .

С. Фактор Дебая-Уоллера.

Собирая всё вместе, получаем

$$S(\mathbf{K}, t) = \sum_{l,m} e^{i\mathbf{K}(\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_m)} \exp \left[\frac{\hbar K^2}{2MN} \sum_{\mathbf{q}} \frac{i \sin \varphi_{lm} - (1 - \cos \varphi_{lm}) (2n_{\mathbf{q}} + 1)}{\omega_{\mathbf{q}}} \right] =$$

$$= e^{-2W} \sum_{l,m} e^{i\mathbf{K}(\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_m)} \exp \left[\frac{\hbar K^2}{2MN} \sum_{\mathbf{q}} \frac{i \sin \varphi_{lm} + (2n_{\mathbf{q}} + 1) \cos \varphi_{lm}}{\omega_{\mathbf{q}}} \right]$$

где в последней записи мы отделили независимый от времени множитель

$$e^{-2W} = \exp \left[-\frac{\hbar K^2}{2MN} \sum_{\mathbf{q}} \frac{2n_{\mathbf{q}} + 1}{\omega_{\mathbf{q}}} \right],$$

называемый фактором Дебая-Уоллера.

В общем случае, не выбирая направления поляризации специальным образом, можно записать фактор Дебая-Уоллера в виде

$$e^{-2W} = \exp \left(-\langle (\mathbf{K}\mathbf{u})^2 \rangle_T \right)$$

Преобразуем зависящий от времени множитель в (13.32), учитывая, что аргумент экспоненты мал в силу большого N (оставляем первый порядок, т.е. пренебрегаем многофононными процессами):

$$S(\mathbf{K}, t) = e^{-2W} \sum_{l,m} e^{i\mathbf{K}(\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_m)} \left\{ 1 + \frac{\hbar K^2}{2MN} \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{\omega_{\mathbf{q}}} \left[(n_{\mathbf{q}} + 1) e^{i\varphi_{lm}} + n_{\mathbf{q}} e^{-i\varphi_{lm}} \right] \right\} =$$

$$= e^{-2W} \sum_{l,m} \left\{ e^{i\mathbf{K}(\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_m)} + \frac{\hbar K^2}{2MN} \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{\omega_{\mathbf{q}}} \left[(n_{\mathbf{q}} + 1) e^{i(\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_m)(\mathbf{K} + \mathbf{q})} e^{i\omega_{\mathbf{q}} t} + \right. \right.$$

$$\left. + n_{\mathbf{q}} e^{i(\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_m)(\mathbf{K} - \mathbf{q})} e^{-i\omega_{\mathbf{q}} t} \right] \right\}.$$

10.4.13 Электрон-фононное взаимодействие

(тут пока по Глазкову, потому что я слишком тупой, чтобы по нормальной теории это учить)

(тут дофига всего, пока очень плохо это понимаю.)

обзор электрон-электронного рассеяния

Вклад электрон-электронного рассеяния в проводимость также связан с процессами переброса.

Его температурная зависимость существенно зависит от геометрии ферми поверхности.

Электрон-электронный механизм рассеяния становится важен при низких температурах для очень чистых металлов.

Обычно электрон-фононный вклад оказывается более важным.

Так как электрон-электронные процессы ограничивают проводимость за счёт процессов переброса, то каждый акт рассеяния эффективен, и аналогично обсуждению для теплопроводности.

В реальном металле одновременно действует несколько механизмов рассеяния.

Если эти механизмы независимы, то их вероятности суммируются.

Вероятность обратно пропорциональна времени рассеяния, следовательно, суммируются обратные времена рассеяния или обратные проводимости - то есть суммируются вклады различных механизмов в удельное сопротивление:

$$\rho_{\text{поли}} = \rho_{\text{деф}} + \rho_{\text{эл-фон}} + \rho_{\text{эл-мл}} + \dots$$

Это правило называется правилом Матиссена.

(!!!!)

Температурная зависимость сопротивления обычного металла выходит на постоянную величину при низких температурах.

электрон-фононный вклад в проводимость (???!!!)

линеаризация интеграла столкновений

??? в задании сказано, что это нужно сделать.

общая интегральная формула???

эффекты Иоффе-Регеля

их обсудить нужно.

оценка низкотемпературной проводимости

Низкотемпературная проводимость может быть легко оценена по порядку величины.

Сечение рассеяния электрона на примеси порядка атомного,

$$\tau \sim \frac{L}{v_F} \sim \frac{1}{n_{\text{деф}} a^2 v_F} \sim \frac{a}{v v_F},$$

где v - относительная тогда для времени пробега концентрация дефектов, $a \sim 2\text{\AA}$ - межатомное расстояние.

Для чистоты металла $v = 10^{-3}$ и типичного для металла значения фермиевской скорости $v_F \sim 10^8 \frac{\text{см}}{\text{сек}}$, получаем для времени пробега $\tau \sim 10^{-13}$ сек и для длины пробега $L \simeq \tau v_F \sim 10^{-5} \text{ см} \sim 100 \text{ нм}$.

А для проводимости получаем оценку

$$\sigma \simeq \frac{n_e e^2 a}{v \tau v_F} = \frac{n_e e^2 a}{v \hbar k_F} = \frac{n_e e^2 a^2}{v \hbar} = \frac{e^2}{v a \hbar} \sim 10^9 \frac{1}{\text{Ом} \cdot \text{м}} = 10^7 \frac{1}{\text{Ом} \cdot \text{см}}$$

пользуемся тем, что в хорошем металле $n_e \sim \frac{1}{a^3}$ и $k_F \sim \frac{1}{a}$.

При высоких температурах проводимость линейна по температуре при $T \gg \Theta$.

При низких температурах в чистых металлах электрон-фононное взаимодействие даёт вклад в сопротивление $\propto T^5$

(рисунок 9).

Эта температурная зависимость называется законом Блоха-Грюнайсера.

Промежуточный режим (ориентировочно, от 10К до дебаевской)

оценка высокотемпературной проводимости

Порядок величины высокотемпературной проводимости в хорошем металле также можно оценить.

Как мы обсудили, рассеяние связано с взаимодействием с вызванной фононами поляризацией среды.

Поляризация пропорциональна смещению, взаимодействие электрона с поляризационным зарядом линейно по поляризации, вероятность рассеяния по золотому правилу Ферми квадратична по взаимодействию.

Таким образом, вероятность рассеяния пропорциональна квадрату амплитуды тепловых колебаний.

Строгое вычисление [2] требует рассмотрения электростатического взаимодействия.

Однако для грубой оценки мы можем заметить, что средний квадрат амплитуды тепловых колебаний уже имеет размерность сечения, и предположить (что подтверждается точным расчётом, что сечение рассеяния электрона на каждом атоме будет по порядку величины равно этому среднему квадрату.

Как было показано ранее (лекция 2) квадрат амплитуды тепловых колебаний атомов в решётке при высоких температурах $\langle A^2 \rangle \sim \frac{3T}{M\omega_D^2} = \frac{3\hbar^2 T}{M\Theta^2}$, где M - масса атома, а температура выражена в энергетических единицах.

Дополнительно отметим, что в типичном металле для скорости звука и скорости Ферми есть соотношение [2] $s\sqrt{M} \sim v_F\sqrt{m}$, связанное с тем, что порядок энергии Ферми (электронвольт) оказывается порядка кулоновской энергии взаимодействия соседних ионов, ответственной за упругость кристалла.

Также воспользуемся тем, что в типичном металле $k_D \simeq k_F \simeq \frac{1}{a}$.

Поэтому с точностью нашей оценки

$$\tau = \frac{1}{n_{am}\sigma v_F} \sim \frac{a^3 M \omega_D^2}{v_F T} = \frac{M m s^2 k_D^2 a^3}{\hbar k_F T} \sim \frac{m^2 v_F^2 k_D^2 a^3}{\hbar k_F T} = \frac{\hbar k_F k_D^2 a^3}{T} \sim \frac{\hbar}{T}$$

и для проводимости, возвращая в запись постоянную Больцмана для использования привычной Шкалы температур, имеем

$$\sigma \simeq \frac{n_e e^2 \hbar}{m k_B} \frac{1}{T} \sim \frac{1}{T} 10^{10} \frac{K}{O_M \cdot M} = \frac{1}{T} 10^8 \frac{K}{O_M \cdot c_M}$$

Время пробега электрона в хорошем металле при комнатной температуре составляет порядка 10^{-14} сек, а длина пробега - около 10^{-6} см, то есть всё ещё много больше межатомного расстояния.

(???)

Видно, что отношение RRR действительно служит мерой концентрации дефектов

$$RRR = \frac{R(300 \text{ K})}{R(0 \text{ K})} = \frac{\sigma(0 \text{ K})}{\sigma(300 \text{ K})} \simeq \frac{m a^2 k_B \cdot 300 \text{ K}}{\hbar^2 v} \sim \frac{10^{-2}}{v}$$

и для технически чистых ($w \sim 10^{-3}$) металлов оно будет измеряться десятками.

(мб вставлю, все-таки давно пора бы Глазкова перечитать)

Пример зависимости сопротивления от температуры от комнатной до гелиевой (4.2K) температуры приведён на рисунке 10.

Видно, что при низких температурах сопротивление выходит на постоянную величину, а при высоких растёт линейно.

Связь высокотемпературных процессов рассеяния, ограничивающих проводимость, с колебаниями решётки наглядно демонстрируется рисунком 10: после нормировки

температуры на дебаевскую и сопротивлений на сопротивления при дебаевской температуре данные для различных соединений попадают на универсальную кривую.

(?)

Обратим внимание, что линейная часть на температурной зависимости сопротивления (рисунок 10) продолжается до температур заметно ниже дебаевской.

Это связано с тем, что, строго говоря, эта линейная зависимость не является найденной нами высокотемпературной асимптотикой.

Действительно, даже если исключить из рассмотрения вклад о рассеяния на дефектах, для того чтобы перейти от низкотемпературного закона T^5 к линейному закону при высоких температурах кривая $R(T)$ должна пройти через точку перегиба (см. также формулу Блоха-Грюнайзена в сноске на странице 25).

Этот переход через точку перегиба имеет место как раз при температурах порядка дебаевской и даёт наблюдаемую нами линейную зависимость.

Курьёзным свойством этой линейной зависимости является то, что линейная экстраполяция высокотемпературной части пересекает ось температур при некоторой положительной температуре, «указывая» на «сверхпроводимость» металла при этой температуре, что конечно же не имеет места.

процессы переброса

потом про них подумаю, пока что не до них.

Кинетическое уравнение для фононов

Теплопроводность диэлектрика в тау-приближении

Рассеяние фононов на дефектах решетки

Рассеяние фононов на границах диэлектрика

Правило Матиссена

Вероятность обратно пропорциональна времени рассеяния, следовательно, суммируются обратные времена рассеяния или обратные проводимости - то есть суммируются вклады различных механизмов в удельное сопротивление:

$$\rho_{\text{поли}} = \rho_{\text{деф}} + \rho_{\text{эл-фон}} + \rho_{\text{эл-мл}} + \dots$$

Это правило называется правилом Матиссена.

закон Блоха-Грюнайзена в двух словах

закон Видемана-Франца об отношении коэффициента теплопроводности и подвижности, помноженной на температуру

Закон Видемана-Франца утверждает, что отношение коэффициента теплопроводности к помноженной на температуру проводимости постоянно:

...

Полученные нами результаты для теплопроводности и проводимости в модели почти свободных электронов:

$$\kappa = \frac{\pi^2}{3} \frac{n_e \tau}{m} k_B^2 T$$

$$\sigma = \frac{n_e e^2 \tau}{m}.$$

Выражения очень похожи и, разделив одно на другое и возвращая постоянную Больцмана в запись для совместимости с литературой, получаем $\frac{\kappa}{\sigma T} = \frac{\pi^2}{3} \frac{k_B^2}{e^2} = 2.44 \cdot 10^{-8} \frac{Bm \cdot OM}{K^2}$.

Это отношение не зависит от свойств материала, его также называют постоянной Лоренца

$$L = \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{k_B}{e} \right)^2 = 2.44 \cdot 10^{-8} \frac{Bm \cdot OM}{K^2}.$$

Иногда в литературе используется эквивалентная форма записи размерности этой постоянной $\frac{B^2}{K^2}$.

Закон Видемана-Франца верен лишь тогда, когда времена пробега, ограничивающие процессы электропроводности и теплопроводности совпадают.

Из нашего анализа процессов рассеяния мы знаем, что это имеет место для рассеяния на дефектах (низкотемпературный предел) и при высоких температурах (порядка температуры Дебая и выше).

При промежуточных температурах ($T \ll \Theta$) времена электрон-фононной релаксации принципиально отличаются для электро- и теплопроводности и закон Видемана-Франца перестаёт выполняться.

То, что при выводе закона Видемана-Франца сокращаются модельные параметры времени свободного пробега и массы электрона позволяет надеяться, что этот результат более общий, чем модель почти свободных электронов.

Действительно, закон Видемана-Франца получается и при более строгом рассмотрении.

Напомним, что при рассмотрении явления электропроводности вместо смещения всей ферми-сферы в k -пространстве под действием электрического поля можно говорить только о перераспределении приповерхностных электронов: в силу неразличимости электронов мы можем считать, что состояние электронов, попадающих в пересечение несмещённой и смещённой ферми-сфер, просто не изменилось.

Это означает, что мы можем на самом деле отойти от модели почти свободных электронов, ибо в закон Друде-Лоренца $\sigma = \frac{n_e e^2 \tau}{m^*}$ входят эффективная масса и время пробега для электронов на ферии-поверхности.

В такой трактовке в переносе заряда участвуют не все электроны, а только перераспределённые электроны вблизи поверхности Ферми, их концентрация $n \simeq n_e \frac{eEL}{\varepsilon_F} = n_e \frac{eE v_F \tau}{\varepsilon_F}$, но и движутся они не с дрейфовой скоростью, а со скоростью Ферми.

Аналогично для теплопроводности полученное нами выражение $\kappa = \frac{\pi^2}{3} \frac{n_e \tau}{m^*} k_B^2 T$ оказывается более общим.

В процессах рассеяния участвуют только электроны на поверхности Ферми.

Поэтому время пробега в этой формуле также берётся на поверхности Ферми.

Масса электрона здесь появилась из формулы для теплоёмкости, а при замене массы частицы ферми-газа на эффективную массу на поверхности Ферми эта формула остаётся верной для любой изотропной ферми-системы.

То есть в формуле для теплопроводности оказываются те же величины, что и в формуле для проводимости даже за пределами модели почти идеального ферми-газа.

о постоянной Лоренца

там есть табличка, ее мб добавлю.

типичные значению приведу, хотя мб это в твердом теле сделаю, а не в кинетике.

также есть инфа про измерение ее, пока не до этого.

геометрия ферми-поверхности и проводимость

Обсудим их связь. Говорят, она большая.

10.4.14 Кинетика других электромагнитных явлений

Другое (???)

Вычисление остаточного сопротивления пока упустил

Термо-электрические явления в металле и полупроводнике на самом деле это уже в ЭСС начато, да и в твердом теле, чисто добить осталось.

диссипативная функция Рэлея пока упустил

Законы сохранения и потоки энергии, энтропии Тензор плотности потока импульса.

Равновесное и локально-равновесное распределение.

Условие применимости гидродинамики.

Теплопроводность и вязкость.

Поглощение звука.

Температурное поведение теплопроводности в диэлектрике.

Кинетические коэффициенты металла, Высокие температуры

Процессы переброса в металле

Кинетические коэффициенты металла. Низкие температуры

Аномальный скин-эффект

10.5 Кинетика диэлектриков

(пока такая заготовка раздела на всякий случай.)

10.5.1 Взаимодействие фононов

мотивация типичный предмет, который изучают твердотельщики, и вообще, часто встречается.

вкратце э

теория э

дальнейшие развития и схожие теории есть еще взаимодействие фононов с электронами, это в главе ниже.

10.5.2 Кинетическое уравнение для фононов в диэлектрике

вкратце э

теория э

10.5.3 Теплопроводность диэлектриков при высоких температурах

мотивация вообще не нужно никогда почти, и зачем это учить?

вкратце э

теория э

10.5.4 Теплопроводность диэлектриков при низких температурах

мотивация мб когда-то понадобится

вкратце э

теория э

10.5.5 Теплопроводность и вязкость ферми-жидкости

10.6 Кинетика полупроводников

10.6.1 модели

Циклотронный резонанс в полупроводниках

(тут продолжение теории, начатой где-то раньше потом буду связывать)

суть циклотронного резонанса

объяснение A typical value for the effective mass in semiconductors is $m^* \sim 0.1m_e$.
From

$$\frac{e}{m_e c} = 1.75 \times 10^7 \text{ Hz/G}$$

we find that $eB/m^*c = 1.75 \times 10^{11} \text{ Hz}$ in a field of $B = 1\text{kG}$.

In metals, the disorder is such that even at low temperatures $\omega_c\tau$ typically is small.

In semiconductors, however, the smallness of m^* and the relatively high purity (sometimes spectacularly so) mean that $\omega_c\tau$ can get as large as 10^3 at modest fields.

This allows for a measurement of the effective mass tensor using the technique of cyclotron resonance.

The absorption of electromagnetic radiation is proportional to the dissipative (i.e. real) part of the diagonal elements of $\sigma_{\alpha\beta}(\omega)$, which is given by

$$\sigma'_{xx}(\omega, B) = \frac{ne^2\tau}{m_x^*} \frac{1 + (\lambda^2 + 1)s^2}{1 + 2(\lambda^2 + 1)s^2 + (\lambda^2 - 1)^2 s^4}$$

where $\lambda = B/B_\omega$, with $B_\omega = m_\perp^* c\omega/e$, and $s = \omega\tau$.

For fixed ω , the conductivity $\sigma'_{xx}(B)$ is then peaked at $B = B^*$.

When $\omega\tau \gg 1$ and $\omega_c\tau \gg 1$, B^* approaches B_ω , where $\sigma'_{xx}(\omega, B_\omega) = ne^2\tau/2m_x^*$.

By measuring B_ω one can extract the quantity $m_\perp^* = eB_\omega/\omega c$.

Varying the direction of the magnetic field, the entire effective mass tensor may be determined.

For finite $\omega\tau$, we can differentiate the above expression to obtain the location of the cyclotron resonance peak.

One finds $B = (1 + \alpha)^{1/2} B_\omega$, with

$$\begin{aligned}\alpha &= \frac{-(2s^2 + 1) + \sqrt{(2s^2 + 1)^2 - 1}}{s^2} \\ &= -\frac{1}{4s^4} + \frac{1}{8s^6} + \mathcal{O}(s^{-8})\end{aligned}$$

As depicted in fig. 1.7,

the resonance peak shifts to the left of B_ω for finite values of $\omega\tau$.

The peak collapses to $B = 0$ when $\omega\tau \leq 1/\sqrt{3} = 0.577$.

Магнитосопротивление в двухзонной модели

магнитосопротивление в двух словах эээ

теория For a semiconductor with both electrons and holes present - a situation not uncommon to metals either (e.g. Aluminum) each band contributes to the conductivity.

The individual band conductivities are additive because the electron and hole conduction processes occur in parallel, exactly as we would deduce from eqn.

(1.4).

Thus,

$$\sigma_{\alpha\beta}(\omega) = \sum_n \sigma_{\alpha\beta}^{(n)}(\omega)$$

where $\sigma_{\alpha\beta}^{(n)}$ is the conductivity tensor for band n , which may be computed in either the electron or hole picture (whichever is more convenient).

We assume here that the two distributions δf_c and $\delta \bar{f}_v$ evolve according to independent linearized Boltzmann equations, i.e. there is no interband scattering to account for.

The resistivity tensor of each band, $\rho_{\alpha\beta}^{(n)}$ exhibits no magnetoresistance, as we have found.

However, if two bands are present, the total resistivity tensor ρ is obtained from $\rho^{-1} = \rho_c^{-1} + \rho_v^{-1}$, так что

$$\rho = (\rho_c^{-1} + \rho_v^{-1})^{-1}$$

will in general exhibit the phenomenon of magnetoresistance.

Теперь подробно рассмотрим модель с изотропным невырожденным минимумом зоны проводимости и максимумом валентной зоны.

Taking $\mathbf{B} = B\hat{\mathbf{z}}$, we have

(???)

where

$$\begin{aligned}\alpha_c &= \frac{(1 - i\omega\tau_c) m_c}{n_c e^2 \tau_c}, & \beta_c &= \frac{B}{n_c e c}, \\ \alpha_v &= \frac{(1 - i\omega\tau_v) m_v}{n_v e^2 \tau_v}, & \beta_v &= \frac{B}{n_v e c}.\end{aligned}$$

we obtain for the upper left 2×2 block of ρ :

$$\rho_{\perp} = \left[\left(\frac{\alpha_v}{\alpha_v^2 + \beta_v^2} + \frac{\alpha_c}{\alpha_c^2 + \beta_c^2} \right)^2 + \left(\frac{\beta_v}{\alpha_v^2 + \beta_v^2} + \frac{\beta_c}{\alpha_c^2 + \beta_c^2} \right)^2 \right]^{-1} \times \begin{pmatrix} \frac{\alpha_v}{\alpha_v^2 + \beta_v^2} + \frac{\alpha_c}{\alpha_c^2 + \beta_c^2} & \frac{\beta_v}{\alpha_v^2 + \beta_v^2} + \frac{\beta_c}{\alpha_c^2 + \beta_c^2} \\ -\frac{\beta_v}{\alpha_v^2 + \beta_v^2} - \frac{\beta_c}{\alpha_c^2 + \beta_c^2} & \frac{\alpha_v}{\alpha_v^2 + \beta_v^2} + \frac{\alpha_c}{\alpha_c^2 + \beta_c^2} \end{pmatrix},$$

из которых получается значение магнитосопротивления

$$\frac{\rho_{xx}(B) - \rho_{xx}(0)}{\rho_{xx}(0)} = \frac{\sigma_c \sigma_v \left(\frac{\sigma_c}{n_c e c} - \frac{\sigma_v}{n_v e c} \right)^2 B^2}{(\sigma_c + \sigma_v)^2 + (\sigma_c \sigma_v)^2 \left(\frac{1}{n_c e c} + \frac{1}{n_v e c} \right)^2 B^2}$$

где

$$\sigma_c = \alpha_c^{-1} = \frac{n_c e^2 \tau_c}{m_c} \cdot \frac{1}{1 - i\omega \tau_c}$$

$$\sigma_v = \alpha_v^{-1} = \frac{n_v e^2 \tau_v}{m_v} \cdot \frac{1}{1 - i\omega \tau_v}$$

Note that the magnetoresistance is positive within the two band model, and that it saturates in the high field limit:

$$\frac{\rho_{xx}(B \rightarrow \infty) - \rho_{xx}(0)}{\rho_{xx}(0)} = \frac{\sigma_c \sigma_v \left(\frac{\sigma_c}{n_c e c} - \frac{\sigma_v}{n_v e c} \right)^2}{(\sigma_c \sigma_v)^2 \left(\frac{1}{n_c e c} + \frac{1}{n_v e c} \right)^2}$$

The longitudinal resistivity is found to be

$$\rho_{zz} = (\sigma_c + \sigma_v)^{-1}$$

and is independent of B .

In an intrinsic semiconductor, $n_c = n_v \propto \exp(-E_g/2k_B T)$, and $\Delta\rho_{xx}(B)/\rho_{xx}(0)$ is finite even as $T \rightarrow 0$.

In the extrinsic (i.e.

doped) case, one of the densities (say, n_c in a p-type material) vanishes much more rapidly than the other, and the magnetoresistance vanishes with the ratio n_c/n_v

Мезоскопический микроконтакт

Обсудим мезоскопический контакт, то есть контакт, который имеет как квантовые свойства, так и классические.

мотивация и обзор применений? это простейший пример перехода между двумя проводниками.

???

обзор итоговых свойств мезоскопической системы ???

квант проводимости

$$\frac{e^2}{h}$$

..????

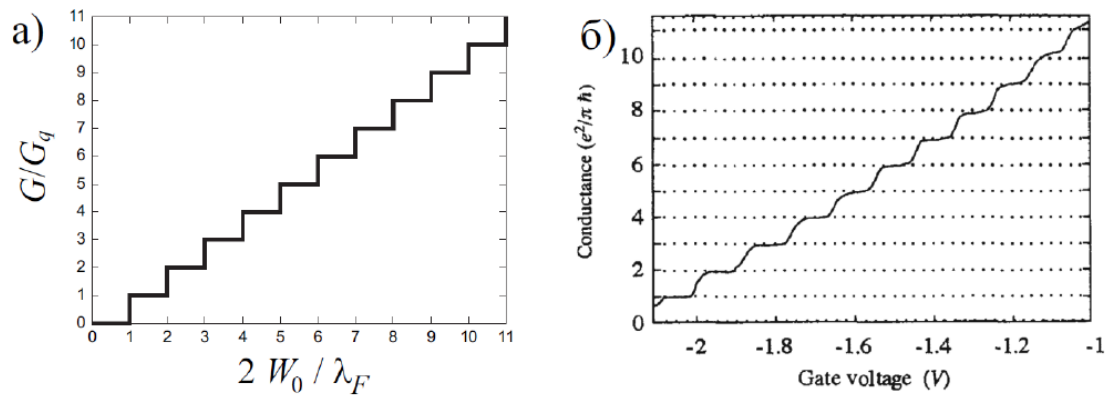
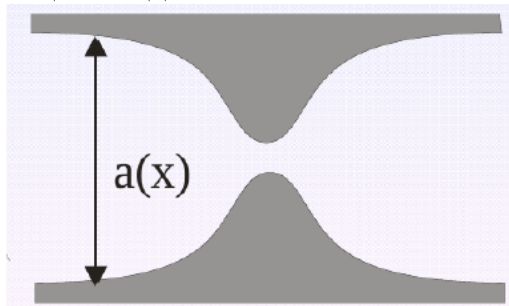


Рис. 4.4. Квантование кондактанса точечного контакта при изменении ширины сужения W_0 напряжением на затворе, (см. рис. 4.1). (а) Кондактанс как функция W_0 . (б) Экспериментальные зависимости кондактанса сужения как функции напряжения на затворе V_g . С хорошей степенью точности можно считать, что W_0 — линейная функция V_g . (График (б) взят из первой экспериментальной работы на эту тему [12]. Практически одновременно аналогичные результаты были представлены в работе [13]).

Figure 2

проводимость микроконтакта между двумя резервуарами Пусть имеется потенциал вида:



W_0 - значение толщины в нуле.

Движение происходит за счет того, что разные химпотенциалы, разные температуры, или что-нибудь еще, поэтому начинается движение через контакт.

Принимаем, что скорость изменение ширины на длине волны де бройля намного меньше ширины ямы

УШ, соответствующее такому двумерному потенциалу начнем с общего вида:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \phi(x, y) + u(x, y) \phi(x, y) = E \phi(x, y)$$

Будем искать решение УШ как

$$\phi = \varphi_n(x) \xi_n(y)$$

где $\xi_n(y)$ - решение одномерной задачи в яме с бесконечными стенками

$$\xi_n(y) = \sqrt{\frac{2}{W}} \sin \left(\pi n \left(-\frac{y}{W} + \frac{1}{2} \right) \right)$$

Тогда на $\xi_n(y)$ имеется уравнение:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \xi_n}{\partial^2 y} + u(x, y) \xi_n = u_n \xi_n,$$

где $U_n(x) = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2mW^2(x)}$ - фиктивный потенциальный барьер из-за того, что часть энергии уходит на движение вдоль y , то электрон не с любой энергией пройдет.

(тут можно нарисовать горбы $U_n(x)$ для разных n и сравнивать при нуле)

сколько горбов при нуле для $U_n(x=0)$ ниже энергии ферми - только так называемых каналов.

Остальными уровнями пренебрегаем.

То есть на сколько мод хватит расстояния и энергии электрона - столько у нас и каналов.

кстати, по каналам частицы распределены равномерно, потому что их распределение определяется функцией Ферми, которая одинакова.

поток Теперь поищем поток. Ищется он по формуле: ??????

будем считать, что функция распределения в резервуарах фермиевская.

$$f_i = \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{T}} + 1}$$

для первого канала:

$$I_1 = \sum_n e v_{1,n} f_1 - \sum_{n,m} e v_{1,m} f_1 R_{n,m}$$

где учтены налетающий, отражающий поток.

для второго:

$$I_2 = - \sum_n e v_{2,n} f_2 + \sum_{n,m} e v_{1,m} f_1 T_{n,m}$$

для одномерного тока имеем:

n, m - разные каналы, из которого и в который происходит переход.

$$I = 2 \int_0^{+\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar} \left(\sum_n e v_{1,n} f - \sum_{m,n} e v_{1,m} f_1 R_{n,m} - \sum_{n,m} e v_{2,m} f_2 T'_{n,m} \right)$$

перепишем первый фактор $\frac{dp}{2\pi\hbar}$

$$\frac{dp}{2\pi\hbar} = \dots \frac{dE}{2\pi\hbar v_x}$$

скорости сокращаются, еще какие-то преобразования и:

формула Ландау для тока через контакт:

$$I = \frac{1}{\pi\hbar} \int_0^\infty dE (f_1 - f_2) \sum_{n,m} T_{n,m}$$

в ней преобразуем для разных случаев разницу функций распределений и находим ток. (примеры разобрать нужно бы!)

зависимость от V в функциях ферми, в которых $\mu_2 = \mu_1 - eV$. и от T тоже в той же функции.

проводимость - обратное удельное сопротивление, кондактанс - полное сопротивление.

кондактанс почитаем, делая какие-то приближения:

$$\left. \frac{dI}{dV} \right|_{V \rightarrow 0} = \sum_{n,m} \frac{e}{\pi \hbar} \int_0^\infty dE \left(- \left. \frac{df_2}{dV} \right|_{V \rightarrow 0} \right) T_{n,m} = \frac{e^2}{\pi \hbar} \sum_{n,m} T_{n,m}(E_F)$$

$$T_{n,m} = \delta_{n,m} \theta(E - E_F)$$

по итогу получаем ступеньку в зависимости от числа контактов

$$\left. \frac{dI}{dV} \right|_{V \rightarrow 0} = \frac{e^2}{\pi \hbar} \sum_{n,m} T_{n,m}(E_F)$$

проводимость при наличии одного открытого канала (??!!)

проводимость микроконтакта между двумя резервуарами при наличии рассеивающего центра с матрицы рассеяния

поток тепла и его квант между двумя резервуарами Можно посчитать с помощью энтропии неравновесного Ферми газа.

(?)

тепловой кондактанс?? Он такой:

Известна связь между потоком энтропии и тепла: (????)

подход Ландауэра??

дополнение: суть использованных методов суть вторичного квантования:??

суть подхода Ландауэра??

суть адиабатики??

Неравновесные дырки и электроны

Щелкачев посчитал важным нам про это рассказать

обзор запишем выражения для вклада электронов валентной зоны в электрический ток $\vec{J} = e \sum_{\sigma, \vec{p}} \vec{\nabla} f \left(\frac{\varepsilon_v - \zeta}{k_B T} \right) = -|e| \sum_{\sigma, \vec{p}} \vec{\nabla} f \left(\frac{\varepsilon_v - \zeta}{k_B T} \right) = |e| \sum_{\sigma, \vec{p}} \vec{\nabla} \left\{ 1 - f \left(\frac{\varepsilon_v - \zeta}{k_B T} \right) \right\}$

Дырочный ток

$$\left\{ 1 - f \left(\frac{\varepsilon_v - \zeta}{k_B T} \right) \right\} = f \left(\frac{\varepsilon_p - \zeta_p}{k_B T} \right)$$

$$\varepsilon_p = \frac{p^2}{2m_v}, \quad \zeta_p = -E_g - \zeta$$

$$\vec{J}_p = |e| \sum_{\sigma, \vec{p}} \vec{\nabla} f \left(\frac{\varepsilon_p - \zeta_p}{k_B T} \right)$$

куча всего, чем заниматься я не буду поэтому и не пишу, потому что не буду заниматься этим точно очень должно.

мб в августе 2021 по приколу дойду.

10.6.2 примеры полупроводников

(это с огромной вероятностью в твердое тело позже перенесу)

полупроводник reminder

Щелкачев посчитал важным нам про это рассказать

суть не актуально

$f_e = f\left(\frac{\varepsilon_c - \zeta}{k_B T}\right)$ $f_p = \left\{1 - f\left(\frac{\varepsilon_v - \zeta}{k_B T}\right)\right\} = f\left(\frac{\varepsilon_p - \zeta_p}{k_B T}\right)$ $\varepsilon_c = \frac{p^2}{2m_c}$, $\varepsilon_p = \frac{p^2}{2m_v}$, $\zeta_p = -E_g - \zeta$.
conduction band, valence band химический потенциал в собственном полупроводнике: $\zeta = -\frac{E_g}{2} + \frac{3}{4} \ln\left(\frac{m_v}{m_c}\right)$

разбор не актуально

$$n = \frac{(2m_c k_B T)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} F_{1/2}\left(\frac{\zeta}{k_B T}\right), p = \frac{(2m_v k_B T)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} F_{1/2}\left(\frac{-E_g - \zeta}{k_B T}\right)$$

$$F_{1/2}\left(\frac{\zeta}{k_B T}\right) = \int_0^\infty e^{\zeta/k_B T} e^{-x} x^{1/2} dx = e^{\zeta/k_B T} \Gamma(3/2)$$

$$\frac{(2m_c k_B T)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} e^{\zeta/k_B T} \Gamma(3/2) = \frac{(2m_v k_B T)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} e^{\frac{-E_g - \zeta}{k_B T}} \Gamma(3/2)$$

химический потенциал в собственном полупроводнике:

$$\zeta = -\frac{E_g}{2} + \frac{3}{4} T \ln\left(\frac{m_v}{m_c}\right)$$

10.6.3 Quantum electron transport**Quantum electron transport through scattering matrix**

(статья Лесовика по который я и учусь)

We consider the scattering matrix approach to quantum electron transport in meso- and nanoconductors. This approach is an alternative to the more conventional kinetic equation and Green's function approaches, and often is more efficient for coherent conductors (especially for proving general relations) and typically more transparent. We provide a description of both time-averaged quantities (for example, current-voltage characteristics) and current fluctuations in time — noise, as well as full counting statistics of charge transport in a finite time. In addition to normal conductors, we consider contacts with superconductors and Josephson junctions.

Основные формулы (пойму - выпишу самую суть)

Введение Over the past 30 years, research of electrical conductors has evolved from considering macroscopic objects to the study of mesoscopic objects¹ and, finally, to nanophysics objects. While in macroscopic objects the quantum nature is mainly manifested at the level of band structure formation, the mesoscopic objects are larger than the atomic objects but smaller than the characteristic length of quantum correlations. Lastly, nanophysics operates on an even smaller scale, down to the atomic one, and incorporates quantum contacts and quantum dots, molecular and atomic contacts, carbon nanotubes, graphene, etc. Electronic transport in conductors of a size comparable to inelastic scattering length, such as the energy relaxation length or dephasing length, or even the Fermi wavelength, exhibits a number of specific features, the most important of which is a considerable nonlocality of the transport phenomena. For such conductors, there is no reason in considering such quantities as local conductivity, while the problem to be addressed is the transportation of electrons from point A (left reservoir) to point B (right reservoir). In this case, the electron transfer through a conductor is a purely quantum mechanical process. This process can be best described by means of a well known approach used in the scattering theory of particles and atoms, where given are an initial state (in our case, an electronic state), a scatterer, and a final state (in the reservoir where the electron arrives) and where the transition from one state to another is described by the scattering matrix.

Presently, the scattering matrix approach is widely and successfully applied in the quantum transport study. The main difference between this approach and more conventional methods based, for example, on the kinetic equation, the Kubo formula, Green's functions, or diagram techniques, can be put in this way. The total conductivity (or the total current) of a system is expressed in terms of the conductor's quantum mechanical transparency, generally expressed in terms of the scattering matrix, and the occupation numbers of the exact electronic scattering states, which are determined by the parameters at the boundaries (reservoirs). At first glance, such a method for describing the electronic transport just replaces the problem of finding the local or nonlocal conductivity with the calculation of transmission, which is equally complicated. But in fact the situation is somewhat different. First, in many cases involving a simple sample geometry and simple scattering potential, transmissions can be calculated analytically, which is easier and more instructive than, e.g., calculating a Green's function. Second, it is often possible to make a reasonable assumption regarding the scattering matrix and facilitate an acceptable description of the experiment. For disordered (dirty) conductors with a complex scattering potential, the transmission probabilities can be efficiently described statistically, for example, by methods developed for random matrices.

In addition, due to the development of mesoscopics and nanophysics, new problems emerged, which either had not attracted proper attention earlier or seemed unrealistic for systems under study. One of these problems is the description of the current beyond its average value, namely, calculation of the current fluctuations and presentation of the full counting statistics in quantum mesoand nanoconductors. It was found that these particular problems could be efficiently solved by the scattering matrix method. It is important that even if the scattering matrix is unknown, i.e., has not been calculated for a particular scattering potential, the full counting statistics for large time intervals can be formally obtained, including the average current. Thus, if the scattering matrix is given then not only the conductance $G = 1/\mathcal{R}$, where \mathcal{R} is the resistance, can be calculated but also the spectral density of current fluctuations $S(\omega)$ at low frequencies, and the distribution function $P(Q)$ of the charge transferred within a certain fixed time interval can be found. Besides, it proves possible to derive general relations like, for example, the fluctuation-dissipation theorem, relating the average current and nonequilibrium fluctuations. The conventional approach would require repeated calculation of S and P and other quantities different from the average current.

2 SCATTERING MATRIX APPROACH TO THE DESCRIPTION OF TRANSPORT: LANDAUER FORMULA The scattering matrix that transforms asymptotically free incoming states into the asymptotically free outgoing states thus describing interactions with an obstacle and between particles plays an outstanding role in quantum physics. This matrix was first introduced by Born [1] and then by Wheeler [2] and independently by Heisenberg [3, 4] to describe the scattering of particles and atoms and has been extensively used since the late 20 th century in the theory of electron transport in quantum conductors. The best known result in the theory of quantum transport obtained using the scattering matrix approach is the famous Landauer formula, ² which is also called the Landauer-Büttiker formula. In fact, this formula in its conventional form first appeared in Refs. [6-8]. The conductance of a quasi-one-dimensional (one-channel) conductor is given by the conductance quantum $G_0 = 2e^2/h$ (where e is the electron charge, h is Planck's constant, and the factor 2 appears due to the spin degeneracy), known from the quantum Hall effect [9], times the transparency T of the conduction channel. In the case of several channels, the expression for the conductance

$$G = \frac{2e^2}{h} \sum_{n,m} T_{nm}$$

contains the sum of transmission probabilities T_{nm} from one mode (channel) to another (see details in Sec. 3). The Landauer approach was better understood in subsequent papers, for example, Imry [10] pointed out the role of a voltage drop at the input to the conductor. Later it was extended to more complicated systems with many reservoirs [11], the quantum Hall effect regime [12–15], hybrid superconducting systems [16–21], and was also used to describe current fluctuations in time [22–25]. Currently, this method has become very clear and functional. As a whole, this approach can be applied to the description of coherent mesoscopic conductors in which the characteristic size L of the voltage drop region is much smaller than all inelastic lengths.

2.1. Conductance of one-dimensional contact To describe a quasi-one-dimensional coherent conductor, we first consider a purely one-dimensional problem for a system in which electron reservoirs are located to the left and to the right, far away from an obstacle (scatterer) located at the center, and emit electrons in the direction of this obstacle.

Let us assume that electrons with energies up to μ move from the left reservoir to the scatterer (we forget about spin for a while). Experimentally, this may correspond to the presence of the bias voltage $V = \mu/e$. Such states are called the Lippmann-Schwinger scattering states [26].

One of the problems for such states in the continuous spectrum is to count their density. It can be solved by using the so-called "box normalization" method. This normalization method imposes the periodic boundary conditions by closing the conductor into a circle with length L to make the spectrum discrete. Thereafter, in the limit $L \rightarrow \infty$ we are back to the continuous spectrum.⁴ But it is difficult to rigorously perform this procedure for scattering states, and here we solve this problem in a different manner, by forming normalized wave packets from continuous-spectrum states.

By dividing the energy interval $[0, \mu]$ into N segments with size $\Delta = \mu/N$, we form the wave packets

$$\Psi_n(x, t) = c_n \int_{(n-1)\Delta}^{n\Delta} dE \Psi_{L,E}(x) e^{-iEt/\hbar}$$

where $n = 1, \dots, N$ and $\Psi_{L,E}(x)$ is the left Lippmann-Schwinger scattering state with energy E , having the asymptotic form

$$\Psi_{L,E}(x) = \begin{cases} e^{ikx} + r(E)e^{-ikx}, & x \rightarrow -\infty \\ t(E)e^{ikx}, & x \rightarrow \infty \end{cases}$$

The normalization constant can be found from the relation

$$\int dx \Psi_{L,E'}^*(x) \Psi_{L,E}(x) = 2\pi\delta(k' - k)$$

where $k = \sqrt{2mE}/\hbar$. From correct normalization of wave packets $\int dx |\Psi_n(x, t)|^2 = 1$, we obtain

$$c_n = \frac{1}{\sqrt{h\Delta v_n}}$$

where $v_n = \sqrt{2n\Delta/m}$ is the velocity of the n th packet and Δ is assumed to be small.

The wave packets described by expressions (2) are localized in the vicinity of $x = 0$ at $t = 0$ and have the characteristic size $h v_n / \Delta$. These packets move with the velocity v_n . As $\Delta \rightarrow 0$ (i.e., $N \rightarrow \infty$), the wave packets

become broader, their shape approaching the shape of scattering states (3).

We now calculate the current I carried by a given orthonormalized set of wave packets. The current for them is additive since, according to Pauli's principle, only one electron can occupy each state. Thus, we can first calculate the contribution

$$I_n = -i \frac{e\hbar}{2m} [\Psi_n(x)^* \Psi'_n(x) - \Psi'_n(x)^* \Psi_n(x)]$$

to the current from each n th packet and then sum up the contributions. Due to the charge conservation law, for scattering states (as for any stationary states), the current is independent of the point at which we calculate it. Hence in the limit $\Delta \rightarrow 0$, the contribution to the current from each packet at $t = 0$, can be calculated, for example, to the right of the barrier, where the wave function has the known form $\Psi_L(x) = t(E)e^{ikx}$. This gives

$$I_n = c_n^2 \Delta^2 e v_n T(n\Delta) = \frac{e}{h} \Delta T(n\Delta)$$

where $T(E) = |t(E)|^2$ is the transparency at the energy E . Summing the contributions of all packets, we find

$$I = \sum_{n=1}^N I_n = \frac{e}{h} \Delta \sum_{n=1}^N T(n\Delta) \xrightarrow{(\Delta \rightarrow 0)} \frac{e}{h} \int_0^\mu dE T(E)$$

where the sum over n transforms to the integral over μ in the limit $\Delta \rightarrow 0$. The conductance, defined as the ratio of the current I to the voltage $V = \mu/e$, can be written in the form

$$G = \frac{I}{V} = \frac{e^2}{h} \int_0^\mu \frac{dE}{\mu} T(E)$$

Expression (9) is a simple variant of the Landauer formula for the conductance [7, 27].

Since the continuous spectrum states cannot be normalized in the usual way, like the discrete spectrum states, it is not clear in advance what current is carried by each many-particle state constructed from the arbitrary states of the continuous spectrum. This problem can be solved by considering the wave packets and passing to the limit as we did above. Such a procedure can be used in an explicit form to analyze intricate problems, for example, to describe the full transport statistics, as was done in Ref. [28]. The current can be calculated using the rule (which can also be derived by the method outlined above) allowing the summation of the contributions to the current from continuous-spectrum states: if $\psi_\xi(x)$ satisfies a normalization condition generalizing (4),

$$\int dx \psi_\xi^*(x) \psi_{\xi'}(x) = c(\xi) \delta(\xi - \xi')$$

then the mean of the current operator is given by

$$I = \int \frac{d\xi}{c(\xi)} n(\xi) I_\xi$$

where I_ξ is the current from the particle in the state $\psi_\xi(x)$ and $n(\xi)$ is the occupation number, equal to 1 if the state with the subscript ξ is present in the many-particle wave function (Slater determinant) and to 0 otherwise (at finite temperatures $\Theta > 0$, the number $n(\xi)$ can take values between 0 and 1). In our case, we can choose $\xi = k$, $I_k = -e\hbar k T(E)/m$, $c(k) = 2\pi$, and

$$n(k) = \begin{cases} 1, & \hbar^2 k^2 / 2m < \mu \\ 0, & \hbar^2 k^2 / 2m > \mu \end{cases}$$

Substituting these expressions in Eq. (11), we obtain

$$I = \frac{e\hbar}{m} \int_0^{k(\mu)} \frac{dk}{2\pi} k T(E) = \frac{e}{h} \int_0^\mu dE T(E),$$

which coincides with Eq. (8). At the last calculation step, we switched from integration over the wave vector k to integration over energy E , using the one-dimensional density of states

$$\nu(E) = \frac{dk}{dE} = \frac{m}{\hbar^2 k}$$

This leads to the cancellation of the factor k in the integrand in Eq. (12). This implies that in the absence of scattering each energy interval carries the same current (per spin)

$$i_0 = \frac{\delta I}{\delta E} = \frac{e}{h}$$

which is a characteristic feature of the one-dimensional ballistic transport.

2.2. Two reservoirs In Sec. 2.1 we discussed the case of spinless electrons emitted by one reservoir. We now consider the more realistic case where spin-1/2 electrons are emitted by both reservoirs. We assume that the left reservoir with the electrochemical potential μ_L emits the "left" scattering states $\Psi_L(x)$ and the right reservoir with the electrochemical potential μ_R emits the "right" scattering states

$\Psi_R(x)$, see Fig. 1. Then the total current is determined by contributions from both reservoirs:

$$I_L = \frac{2e}{h} \int_0^{\mu_L} dE T(E)$$

and where the factor 2 appears due to the spin degeneracy, and in contrast to I_L , the current I_R determined by the right states acquires a minus sign because the wave vector and velocity for $\Psi_R(x)$ are opposite to those for $\Psi_L(x)$. Here, we used the important property of the scattering matrix following from its unitarity and symmetry under time reversal, namely, that the transmission probabilities for mutually inverse processes are equal.⁶ In our case, the transmission probability from left to right, $T = |t|^2$, is equal to the transmission probability from right to left, $T = T' = |t'|^2$. In the total current

$$I = I_L + I_R = \frac{2e}{h} \int_{\mu_R}^{\mu_L} dE T(E)$$

the contributions from energy intervals filled both on the left and on the right cancel while the states filled only in one reservoir make a contribution to the total current.

2.3. Landauer voltage drop Having discussed the current caused by the difference in electrochemical potentials, we now address the question about the voltage drop on a scatterer. First, we

determine the electron density produced in a nonequilibrium state, assuming that $\mu_L > \mu_R$, see Fig. 2. The left reservoir emits states (3) and the right reservoir emits the states $\Psi_{R,E}$. The total density to the right of the scatterer,

$$\begin{aligned} \rho_R &= 2 \int_0^{k(\mu_L)} \frac{dk}{2\pi} |\Psi_{L,E}(x)|^2 + 2 \int_0^{k(\mu_R)} \frac{dk}{2\pi} |\Psi_{R,E}(x)|^2 \\ &\approx 2 \int_0^{k(\mu_L)} \frac{dk}{2\pi} T(E) + 2 \int_0^{k(\mu_R)} \frac{dk}{2\pi} [1 + R(E)] \end{aligned}$$

is the sum of contributions from the left and right states, the factor 2 is due to spin degeneracy. Here we do not consider the details of Friedel oscillations with the period $\pi/k(\mu)$ (see below)

and perform averaging over several wavelengths $\propto \hbar/\sqrt{2m\mu}$. Calculating the density on the left gives

$$\rho_L \approx 2 \int_0^{k(\mu_L)} \frac{dk}{2\pi} [1 + R(E)] + 2 \int_0^{k(\mu_R)} \frac{dk}{2\pi} T(E)$$

In the case of nonequilibrium situation, $\mu_L \neq \mu_R$, and nonideal transparency, $T < 1$, the density on the right of the scatterer does not coincide with that on the left, see Fig. 1.

The difference in densities is given by

$$\rho_L - \rho_R = 4 \int_{k(\mu_R)}^{k(\mu_L)} \frac{dk}{2\pi} R(E)$$

where we use the relation $R(E) + T(E) = 1$. If the quantum conductor is electrically neutral, then this density difference should be compensated by the voltage drop across the scatterer, which bends the conduction band bottom. This voltage drop is called the Landauer voltage drop V_L and in the stationary case it can be found from the condition of electrical neutrality, which is assumed to take place in the equilibrium. In particular, the density should be the same on both sides of the barrier as shown in Fig. 2.

In the presence of a voltage drop V_L , the left states with the energy E (measured from the conduction band bottom in the right reservoir) have the form

$$\Psi_{L,E}(x) = \begin{cases} e^{ikx} + r(E)e^{-ikx}, & x \rightarrow -\infty \\ \sqrt{\frac{k}{\tilde{k}}} t(E) e^{i\tilde{k}x}, & x \rightarrow \infty \end{cases}$$

where $k(E) = \sqrt{2m(E - eV_L)/\hbar}$ and $\tilde{k}(E) = \sqrt{2mE}/\hbar$ are the wave vectors in the left and right asymptotic regions respectively. Similarly, the right scattering states are the wave vectors in the left and right asymptotic regions respectively. Similarly, the right scattering states are

$$\Psi_{R,E}(x) = \begin{cases} e^{-i\tilde{k}x} + r'(E)e^{i\tilde{k}x}, & x \rightarrow \infty \\ \sqrt{\frac{\tilde{k}}{k}} t'(E) e^{-ikx}, & x \rightarrow -\infty \end{cases}$$

The factor $\sqrt{k/\tilde{k}}$ appears due to the unitarity of the scattering matrix. We also note that the scattering problem must be solved taking the bending of the conduction band bottom due to the Landauer voltage V_L into account. For example, due to the appearance of this voltage, the right scattering states with energies $E < eV_L$ are completely reflected, $R(E) = 1$. The averaged density on the left, caused by the left scattering states, is given by

$$\rho_{LL} = 2 \int_0^{k(\mu_L)} \frac{dk}{2\pi} [1 + R(E)]$$

where the factor 2 is due to spin degeneracy. The density on the left, caused by the right states, takes the form

$$\rho_{LR} = 2 \int_{\tilde{k}(eV_L)}^{\tilde{k}(\mu_R)} \frac{d\tilde{k}}{2\pi} \frac{\tilde{k}}{k} T(E)$$

Similarly, calculating the density on the right, we find

$$\begin{aligned} \rho_{RL} &= 2 \int_0^{k(\mu_L)} \frac{dk}{2\pi} \frac{k}{\tilde{k}} T(E), \\ \rho_{RR} &= 2 \int_{\tilde{k}(eV_L)}^{\tilde{k}(\mu_R)} \frac{d\tilde{k}}{2\pi} [1 + R(E)] + 2 \int_0^{\tilde{k}(eV_L)} \frac{d\tilde{k}}{2\pi} [1 + 1], \end{aligned}$$

where the last term appears due to the right states completely reflected at the bottom of the conduction band. To simplify further calculations, we switch to integrals over energies. For ρ_{LL} , we then obtain $[dk = (m/\hbar^2 k) dE]$

$$\rho_{LL} = \frac{2}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{2}} \int_{eV_L}^{\mu_L} \frac{dE}{2\pi} \frac{1 + R(E)}{\sqrt{E - eV_L}}$$

Similarly, for ρ_{LR} we have $[d\tilde{k} = (m/\hbar^2 \tilde{k}) dE]$

$$\rho_{LR} = \frac{2}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{2}} \int_{eV_L}^{\mu_R} \frac{dE}{2\pi} \frac{T(E)}{\sqrt{E - eV_L}}$$

Calculations for ρ_{RL} and ρ_{RR} give

$$\begin{aligned} \rho_{RL} &= \frac{2}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{2}} \int_{eV_L}^{\mu_L} \frac{dE}{2\pi} \frac{T(E)}{\sqrt{E}} \\ \rho_{RR} &= \frac{2}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{2}} \int_{eV_L}^{\mu_R} \frac{dE}{2\pi} \frac{1 + R(E)}{\sqrt{E}} + \frac{2}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{2}} \int_0^{eV_L} \frac{dE}{2\pi} \frac{2}{\sqrt{E}} \end{aligned}$$

Summing the densities on the left, $\rho_L = \rho_{LL} + \rho_{LR}$, and using the relation $T(E) + R(E) = 1$, we obtain

$$\begin{aligned} \rho_L &= \frac{2}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{2}} \int_{eV_L}^{\mu_R} \frac{dE}{2\pi} \frac{2}{\sqrt{E - eV_L}} \\ &\quad + \frac{2}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{2}} \int_{\mu_R}^{\mu_L} \frac{dE}{2\pi} \frac{1 + R(E)}{\sqrt{E - eV_L}} \end{aligned}$$

while the total density on the right $\rho_R = \rho_{RL} + \rho_{RR}$ is given by

$$\rho_R = \frac{2}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{2}} \int_0^{\mu_R} \frac{dE}{2\pi} \frac{2}{\sqrt{E}} + \frac{2}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{2}} \int_{\mu_R}^{\mu_L} \frac{dE}{2\pi} \frac{T(E)}{\sqrt{E}}$$

Assuming the electric neutrality, we should equate the densities: ⁷

$$\int_{\mu_R}^{\mu_L} \frac{dE}{2\pi} \frac{1 + R(E)}{\sqrt{E - eV_L}} = \int_{\mu_R + eV_L}^{\mu_R} \frac{dE}{2\pi} \frac{2}{\sqrt{E}} + \int_{\mu_R}^{\mu_L} \frac{dE}{2\pi} \frac{T(E)}{\sqrt{E}}$$

Equation (33) allows one to calculate the voltage V_L for an arbitrary dependence transparency on energy and an arbitrary difference of electrochemical potentials.

We consider a simple linear case and find V_L for a small difference $\Delta\mu \equiv \mu_L - \mu_R \ll \mu_R$. Under such conditions, the voltage drop is also small, $|eV_L| \ll \mu_L$. We assume that $T(E)$ is constant on the interval $[\mu_R, \mu_L]$. Then replacing $\sqrt{E - eV_L}$ by \sqrt{E} in Eq. (33) and taking T and R out of the integrand, we express the Landauer voltage as

The voltage V_L is zero for an ideally transparent conductor and reaches the maximum $eV_L = \Delta\mu$ when all the electrons are reflected. The current is [see expressin(17)]

$$I = \frac{2e}{h} T \Delta\mu$$

which gives the Landauer resistance

$$\mathcal{R}_L = \frac{V_L}{I} = \frac{h}{2e^2} \frac{R}{T}$$

The absence of the voltage drop in an ideal conductor was the object of intensive discussions for a long time. It finally became clear that the voltage drop occurs even in this case, but in joints with reservoirs rather than in the conductor itself (see the discussion in Sec. 2.4).

2.4. Contact resistance Equating $\Delta\mu$ in Eq. (35) to the value specified by the bias voltage eV , we obtain the conductance $G = I/V$ in the form ⁸

$$G = \frac{2e^2}{h}T$$

Resistance (36) is different from the inverse of G in "Landauer formula" (37). We can assume that (37) is the conductance measured by the two-contact method, whereas resistance (36) is the resistance measured by the four-contact method. ⁹ The Landauer resistance takes only the voltage drop directly across the barrier into account. ¹⁰ However, in a one-dimensional conductor, the voltage drop also appears in contacts with reservoirs, which is the reason for the discrepancy between the two Landauer formulas. Subtracting V_L from the bias voltage $\Delta\mu = eV$, we obtain the voltage drop V_A at the conductor entrances:

$$V_A = \Delta\mu - eV_L = \Delta\mu T.$$

The total voltage drop can be written as the sum

$$\begin{aligned} V &= V_L + V_A = I\mathcal{R}_L + I\mathcal{R}_A \\ &= I \frac{h}{2e^2} \frac{1-T}{T} + I \frac{h}{2e^2} = I \frac{h}{2e^2 T} = \frac{I}{G} \end{aligned}$$

In the symmetric case, the voltage drop is distributed equally between contacts. The voltage drop $V_A/2$ at each boundary (contact) corresponds to the resistance

$$\mathcal{R}_S = \frac{h}{4e^2},$$

which is the quantum analogue of the known Sharvin resistance [30]. We can assume that this resistance is caused by the reflection of higher modes at the wire entrance (see Sec. 4 for the details).

Figure 3 shows the example of a ballistic conductor ($T = 1$). Applying a voltage, we obtain the nonzero current $I = 2e^2/hV$, although no voltage drop occurs in the one-dimensional conductor itself due to the absence of backward reflection. The distribution of the voltage equally between contacts has been studied in detail theoretically [31, 32] and verified experimentally [33, 34]. As a whole, the described situation is quite unusual from the standpoint of the classical local conductivity: the electric field inside the conductor is absent, although the total current is nonzero, see Fig. 4. It is also unusual that the

Joule heat dissipates far from the reservoirs due to slow energy relaxation, whereas the electromagnetic energy, from the standpoint of classical electrodynamics, enters the electron system at much smaller scales, in voltage drop regions in contacts and at the barrier.

Finally, we note that the oscillating part of the electron density (and its slowly changing part at a finite voltage), which we did not consider above, can lead to an additional scattering of electrons. Density oscillations (Friedel oscillations) are not completely screened and produce a spatially dependent electrostatic potential. The oscillating part of the potential is especially important because the oscillation period is equal to π/k_F and backscattering from it (by $2k_F$ in the momentum space) is strong [35]. Therefore, the transmission probability $T(E)$ taking the total scattering potential into account can strongly differ from the bare probability (determined on a local scatterer); in addition, this probability in general case depends on the voltage V . Assuming that the reflection amplitude is independent of energy, we can obtain the oscillating part of the density in equilibrium in the form

$$\delta n(x) = \frac{1}{|x|} \{ \text{Im}(r) [\cos(2k_F x) - 1] + \text{Re}(r) \sin(2k_F |x|) \}$$

The case of energy-independent r is realistic, for example, for almost complete reflection ($r \approx -1$), but similar oscillating dependences also appear for an arbitrary scatterer.

We emphasize once again the difference between our approach and more traditional methods: instead of calculating the nonlocal conductivity $\sigma(r, r')$ and using it in the expression

$$j_{\alpha}(r) = \int \sigma(r, r')_{\alpha\beta} E_{\beta}(r') dr'$$

we calculate the total conductance determining the total current $I = GV$ as a function of voltage. The convenience of such approach is obvious, because instead of calculating the self-consistent field E for use in Eq. (40), only the total voltage drop V must be known. In this case, the conductance can be expressed in terms of the probability of transmission through the conductor. (Yet, to exactly solve the scattering problem in the nonlinear case, the electrostatic potential inside the conductor must also be known.)

In Sec. 3 we consider a multichannel conductor as a waveguide for electrons to solve a broader class of problems.

3. WAVEGUIDES: THE MULTICHANNEL CASE Let us describe a quantum conductor as a wire smoothly connected to reservoirs. More formally, we consider the geometry convenient for the description of such a system.

A quasi-one-dimensional system is formed as a constriction with infinitely high walls (or with a potential increasing at infinity) in transverse directions (y, z) and transport is possible along the x axis only, see Fig. 5. Plane waves belonging to different modes can propagate along this x axis. In mesoscopic physics such modes are called channels. In transverse directions each channel has a spatial structure of the bound states. The waveguide can transfer many modes. At low temperatures in a narrow waveguide only the first mode is significant and the transport becomes effectively one-dimensional (we actually discussed this situation in Sec. 2). In the general case the number of conducting channels involved in transport is finite.

3.1. Mode quantization Let us consider now the simple case of translational invariance along the x axis. We want to show how modes appear due to the transverse motion quantization. We solve the Schrödinger equation

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(x, y, z) \right] \Psi(x, y, z) = E \Psi(x, y, z)$$

Other approaches for quantum electron transport

10.7 кинетика аморфных систем (??)

(от максимова)

(понадобиться - сделаю больше раздел, пока сойдет такой, не занимался этим, а на эту теорию есть отдельная запись.)

аморфные системы в двух словах

эээ

ну максимум там наверное шарит

3.1.

Туннельная модель

3.2.

Взаимодействие ДУС с фононами

3.4.

Релаксация фононов на ДУС

3.5.

Низкотемпературная теплопроводность аморфных систем

3.6.

Зависимость теплоемкости аморфных систем от времени

3.7.

Насыщение резонансного поглощения

3.8.

Диэлектрическая проницаемость аморфных систем

3.9.

Прыжковая проводимость

3.10.

Закон Мотта

3.11.

Кулоновская щель

11 Другие темы кинетики твердого тела

11.1 Кинетика сверхпроводников

Обсудим подробно кинетику сверхпроводников.

11.2 магнитные жидкости

(подумаю над местом этого параграфа)

11.2.1 Типичные темы (???)

Вывод уравнения течения магнитной жидкости

зависимость от времени среднего $x^2(t)$

(задача колоколова)

Пусть двумерный вектор x эволюционирует со временем по закону:

$$\dot{x}_\alpha = \sigma_{\alpha\beta}(t)x_\beta$$

Найдем зависимость от времени среднего $x^2(t)$, если $x(0) = (1, 0)$ и случайная матрица $\sigma_{\alpha\beta}(t)$, $\alpha, \beta = 1, 2$, обладает гауссовой статистикой с коррелятором:

$$\langle \sigma_{\alpha\beta}(t) \sigma_{\mu\nu}(t_0) \rangle = D \delta_{\alpha\mu} \delta_{\beta\nu} \delta(t - t_0)$$

Использовать, там где это необходимо, физическую (симметричную) регуляризацию δ -функции.

(???)

Кинематический режим эволюции магнитного поля

11.2.2 эффект магнитного динамо

мотивация его изучать

???

Эффект магнитного динамо в стационарном и хаотическом потоке жидкости

Part VII

Problems in Kinetics

Обсудим известные мне задачи по кинетике.
(тут прорешиваю Бурмистрова. их же где-то в теорию потом буду вставлять, здесь же просто нарешиваем задачи)

12 Типичные задачи

(по Бурмистрову и другим, тут очень много задач!)

12.0.1 Задачи на уравнение Ланжевена и броуновское движение

Белан.ВШЭ.л8.2 Коэффициент диффузии при $\langle \zeta(t_1) \zeta(t_2) \rangle \sim \exp\left(-\frac{|t_1 - t_2|}{\tau_0}\right)$

Эволюция координаты и скорости частицы описывается парой уравнений

$$\begin{aligned}\dot{x}(t) &= v(t) \\ \dot{v}(t) &= -\gamma v(t) + \zeta(t)\end{aligned}$$

где для стохастического процесса $\zeta(t)$ справедливо $\langle \zeta(t) \rangle = 0$, $\langle \zeta(t_1) \zeta(t_2) \rangle = 2\frac{\kappa}{\tau_0} \exp\left(-\frac{|t_1 - t_2|}{\tau_0}\right)$. Найдите коэффициент диффузии такой частицы.

Решение. (??? оказывается, не решил еще)

Белан.ВШЭ.л8.1 Диффузия на плоскости

Рассмотрим частицу, совершающую движение в плоскости с постоянной по модулю скоростью v_0 . Стохастическая динамика угла отклонения $\varphi(t)$ мгновенной скорости частицы $\vec{v}(t) = v_0(\cos \varphi(t), \sin \varphi(t))^T$ от направления оси x описывается уравнением

$$\frac{d\varphi(t)}{dt} = \xi(t)$$

где $\xi(t)$ - это Гауссов белый шум с нулевым средним $\langle \xi(t) \rangle = 0$ и парным коррелятором $\langle \xi(t_1) \xi(t_2) \rangle = 2\nu \delta(t_1 - t_2)$. Найдите время корреляции скорости и коэффициент диффузии такой частицы.

Решение. Коэффициент диффузии дается через коррелятор скоростей из формулы Грина-Кубо, сам коррелятор находим из определения, переписав его через вероятность положения частицы. Дальше переход к функции Грина для уравнения диффузии, которое решаем методом Фурье, дает эту вероятность.

(??? про метод в теории напишу, важно знать, что такой метод есть.)

Согласно формуле Кубо-Грина, коэффициент диффузии равен

$$D = \frac{1}{2} \int_0^{+\infty} d\tau C(\tau)$$

где парную корреляционную функцию C найдем из определения.

Скорость частицы запишем как

$$\vec{v}(t) = (v_0 \cos \varphi(t), v_0 \sin \varphi(t))^T$$

поэтому

$$\begin{aligned}C(\tau) &\equiv \langle \vec{v}(0) \cdot \vec{v}(t) \rangle = v_0^2 \langle \cos \varphi(0) \cos \varphi(t) \rangle + \langle \sin \varphi(0) \sin \varphi(t) \rangle = \\ &= v_0^2 \langle \cos[\varphi(t) - \varphi(0)] \rangle = \\ &= v_0^2 \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi_1 d\varphi_2 P(\varphi_2, t; \varphi_1, 0) \cos(\varphi_2 - \varphi_1).\end{aligned}$$

Здесь $P(\varphi_2, t; \varphi_1, 0) \equiv \langle \delta(\varphi(t) - \varphi_2) \delta(\varphi(0) - \varphi_1) \rangle$ - это совместная функция распределения пары значений случайного угла $0 \leq \varphi(t) < 2\pi$ в моменты времени t и 0 .

Функция плотности вероятности, очевидно, может быть записана как

$$P(\varphi_2, t; \varphi_1, 0) = G(\varphi_2, t | \varphi_1, 0) p(\varphi_1; 0),$$

где $p(\varphi_1; 0) = \frac{1}{2\pi}$ - частная функция распределения случайного угла $\varphi(t)$ в момент времени 0, а G - функция Грина уравнения диффузии на кольце, то есть решение начально-краевой задачи

$$\partial_t G(\varphi_2, t | \varphi_1, 0) = \nu \partial_{\varphi_2}^2 G(\varphi_2, t | \varphi_1, 0)$$

в области $0 \leq \varphi_2 < 2\pi$ с периодическим граничным условием $G(2\pi, t | \varphi_1, 0) = G(0, t | \varphi_1, 0)$ и дельта-функциональным начальным условием $G(\varphi_2, 0 | \varphi_1, 0) = \delta(\varphi_2 - \varphi_1)$.

(!?!?!?! теорию нужно доработать, пока такое с ходу выдавать не могу. пропишу эти формулы лучше!)

Разложим периодическую функцию $G(\varphi_2, t | \varphi_1, 0)$ в ряд Фурье при $\varphi_2 \in [2\pi]$:

$$G(\varphi_2, t | \varphi_1, 0) = \sum_{k=-\infty}^{+\infty} e^{ik\varphi_2} \tilde{n}(k; t)$$

где

$$\tilde{n}(k; t) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi_2 G(\varphi_2, t | \varphi_1, 0) e^{-ik\varphi_2}$$

Умножив $\partial_t G(\varphi_2, t | \varphi_1, 0) = \nu \partial_{\varphi_2}^2 G(\varphi_2, t | \varphi_1, 0)$ на $\frac{1}{2\pi} e^{-ik\varphi_2}$ и проинтегрируем по φ_2 от 0 до 2π , получаем ОДУ на эволюции коэффициентом ряда Фурье

$$\frac{d\tilde{n}(k; t)}{dt} = -\nu k^2 \tilde{n}(k; t).$$

(?? тут разве мы не просто подставляем функцию грина через n и все? проверю потом.)

Решение имеет вид

$$\tilde{n}(k; t) = \tilde{n}(0; t) e^{-\nu k^2 t} = \frac{1}{2\pi} e^{-ik\varphi_1 - \nu k^2 t},$$

где мы учли начальное условие $\tilde{n}(0; t) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi_2 \delta(\varphi_2 - \varphi_1) e^{-ik\varphi_2} = \frac{1}{2\pi} e^{-ik\varphi_1}$.

Подставим $\tilde{n}(k; t)$ в разложение функции Грина в ряд Фурье, получим

$$G(\varphi_2, t | \varphi_1, 0) = \frac{1}{2\pi} + \frac{1}{\pi} \sum_{k=1}^{+\infty} e^{-\nu k^2 t} \cos[k(\varphi_2 - \varphi_1)]$$

В итоге, подставляем в коррелятор скоростей:

$$\begin{aligned} C(\tau) &= \frac{v_0^2}{2\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi_1 d\varphi_2 \cos(\varphi_2 - \varphi_1) \left(\frac{1}{2\pi} + \frac{1}{\pi} \sum_{k=1}^{+\infty} e^{-\nu k^2 t} \cos[k(\varphi_2 - \varphi_1)] \right) = \\ &= \frac{v_0^2}{2\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi'_1 d\varphi'_2 \cos \varphi'_2 \left(\frac{1}{2\pi} + \frac{1}{\pi} \sum_{k=1}^{+\infty} e^{-\nu k^2 t} \cos[k\varphi'_2] \right) = \\ &= \frac{v_0^2}{\pi} e^{-\nu t} \int_0^{2\pi} d\varphi'_2 \cos^2 \varphi'_2 = v_0^2 e^{-\nu t} \end{aligned}$$

Отсюда коэффициент диффузии

$$D = \int_0^\infty e^{-\nu t} v_0^2 / 2 = \frac{v_0^2}{2\nu}$$

Колоколов-? Средние и асимптотики простейшего уравнения Ланжевена (???)

Рассмотрим броуновскую частицу, динамика которой подчиняется стохастическому уравнению

$$\frac{d\vec{v}}{dt} = -\gamma \vec{v} + \vec{\xi}, \quad \frac{d\vec{r}}{dt} = \vec{v}$$

где ξ имеет свойства:

$$\langle \xi_i \rangle = 0, \quad \langle \xi_i(t_1) \xi_j(t_2) \rangle = 2\gamma^2 D \delta_{ij} \delta(t_1 - t_2)$$

Решение

Колоколов-? Корреляторы (???)

Предполагая $\vec{r}(0) = 0$ и $\vec{v}(0) = 0$, вычислите следующие статистические моменты

$$\langle v_i(t) \rangle, \quad \langle v_i(t)v_j(t) \rangle, \quad \langle r_i(t) \rangle, \quad \langle r_i(t)r_j(t) \rangle, \quad \langle \xi_i(t)r_j(t) \rangle, \quad \langle \xi_i(t)v_j(t) \rangle, \quad \langle r_i(t)v_j(t) \rangle$$

Найдите асимптотическое поведение полученных величин при

$$\text{a) } t \ll \gamma^{-1} \quad \text{b) } t \gg \gamma^{-1}.$$

Колоколов-? Найти $\langle x(t)^2 \rangle$ для $\dot{x} = x\xi$

Динамика переменной x описывается уравнением

$$\dot{x} = x\xi$$

с начальным условием $x(0) = x_0 > 0$.

Найдите среднее $\langle x(t)^2 \rangle$, если для случайной величины ξ справедливо

$$\langle \xi(t_1)\xi(t_2) \rangle = 2D\delta(t_1 - t_2)$$

Решение

Колоколов-? Найти $\langle x(t)^2 \rangle$ для $\dot{x} = x + x\xi$

Динамика переменной x описывается уравнением

$$\dot{x} = x + x\xi$$

с начальным условием $x(0) = x_0 > 0$.

Найдите среднее $\langle x(t)^2 \rangle$, если для случайной величины ξ справедливо

$$\langle \xi(t_1)\xi(t_2) \rangle = 2D\delta(t_1 - t_2)$$

Решение

Колоколов-? Найти $\langle \sin[x(t)]\xi(t) \rangle$ для $\dot{x} = \xi$

Динамика переменной x описывается уравнением

$$\dot{x} = \xi$$

где для случайной величины ξ справедливо

$$\langle \xi(t_1)\xi(t_2) \rangle = 2D\delta(t_1 - t_2)$$

Найдите среднее

$$\langle \sin[x(t)]\xi(t) \rangle$$

Решение

Колоколов-? функция плотности вероятности для $\dot{x} = x\xi$

Динамика переменной x описывается уравнением

$$\dot{x} = x\xi$$

с начальным условием $x(0) = x_0 > 0$. Для случайной величины ξ справедливо

$$\langle \xi(t_1)\xi(t_2) \rangle = 2D\delta(t_1 - t_2)$$

Найдите функцию плотности вероятности $\rho(x, t) = \langle \delta(x - x(t)) \rangle_\xi$

Решение**Колоколов-?.6 средние квадрат и куб смещения для $\dot{x} = \xi$**

Динамика переменной x описывается уравнением

$$\dot{x} = \xi$$

с начальным условием $x(0) = 0$.

Решение**Колоколов-? Еще корреляторы**

Для случайной величины ξ справедливо

$$\langle \xi(t_1) \xi(t_2) \rangle = \frac{2D}{\tau} \exp\left(-\frac{|t_1 - t_2|}{\tau}\right)$$

Найдите средние

$$\langle x(t)^2 \rangle, \quad \langle x(t)^3 \rangle$$

Решение**БРМ-1 среднеквадратичное смещение $R(t)$ в уравнении Ланжевена**

Используя флуктуационно-диссипационную теорему, найти среднеквадратичное смещение $R(t)$ частицы массой $m = 1$, одномерное движение которой в термодинамически равновесной среде с температурой T подчиняется уравнению Ланжевена

$$\ddot{x}(t) + \gamma \dot{x}(t) = f(t),$$

где $\gamma > 0$ — коэффициент трения, связанный с подвижностью $\mu = 1/\gamma$, и $f(t)$ — случайная сила.

Решение**БРМ-2. Средний квадрат смещения Ланжевене + осцилляторе**

Частица массой m колеблется в одномерной гармонической ловушке с частотой ω_0 , находящейся в термодинамически равновесной среде с температурой T . Уравнение движения частицы имеет ланжевенский вид

$$m\ddot{x}(t) + \eta\dot{x}(t) + m\omega_0^2 x(t) = F(t),$$

где $\eta = m\gamma$ — коэффициент трения и $F(t)$ — случайная сила. Благодаря флуктуациям положение частицы $x(t)$ будет испытывать отклонения от $x = 0$. Используя флуктуационно-диссипационную теорему, найти средний квадрат $\langle x^2 \rangle$ положения частицы.

Решение (???? а фдт то как использовать (?!?????!))

12.0.2 Задачи на кинетику в рамках случайных процессов**Белан-ВШЭ-л5.1**

Динамика координаты частицы описывается следующим уравнением

$$\frac{dx(t)}{dt} = \xi(t)$$

где $\xi(t)$ — это Гауссов белый шум с нулевым средним $\langle \xi(t) \rangle = 0$ и парным коррелятором $\langle \xi(t_1) \xi(t_2) \rangle = 2D\delta(t_1 - t_2)$. Обозначим через T момент времени, когда частица впервые достигнет любой из точек $x = 0$ или $x = L > 0$. Полагая, что $x(0) = l$, где $0 < l < L$, вычислите

- вероятность выживания $p_{surv}(t)$;
- плотность распределения $P(T)$;
- среднее время первого достижения $\langle T \rangle$;
- вероятность p_L , что первое достижение произойдет в точке $x = 0$.

Решение задачи 1 Поместим в точку $x = L$ поглощающую стенку. Плотность распределения координаты частицы является решением следующей начально-краевой задачи

$$\begin{cases} \partial_t n = D \partial_x^2 n \\ n(x, 0) = \delta(x - l) \\ n(0, t) = n(L, t) = 0 \end{cases}$$

С учетом нулевых граничных условий ряд Фурье функции $n(x; t)$ имеет вид

$$n(x; t) = \sum_{k=1}^{+\infty} \tilde{n}_k(t) \sin \left[\frac{\pi k}{L} x \right]$$

где

$$\tilde{n}_k(t) = \frac{2}{L} \int_0^L n(x; t) \sin \left[\frac{\pi k}{L} x \right] dx.$$

Умножив уравнение диффузии на $\frac{2}{L} \sin \left[\frac{\pi k}{L} x \right]$ и проинтегрировав по x от 0 до L , получаем обыкновенное дифференциальное уравнение на эволюцию коэффициентов ряда Фурье

$$\frac{d\tilde{n}_k(t)}{dt} = -D \frac{\pi^2 k^2}{L^2} \tilde{n}_k(t)$$

решение которого имеет вид

$$\tilde{n}_k(t) = \tilde{n}_k(0) e^{-D k^2 t} = \frac{2}{L} \exp \left(-\frac{\pi^2 k^2 D}{L^2} t \right) \sin \left(\frac{\pi k}{L} l \right),$$

где мы учли начальное условие $\tilde{n}_k(0) = \frac{2}{L} \int_0^L n(x; 0) \sin \left[\frac{\pi k}{L} x \right] dx = \frac{2}{L} \sin \left(\frac{\pi k}{L} l \right)$. Значит

$$n(x; t) = \frac{2}{L} \sum_{k=1}^{\infty} \exp \left(-\frac{\pi^2 k^2 D}{L^2} t \right) \sin \left(\frac{\pi k}{L} l \right) \sin \left(\frac{\pi k}{L} x \right).$$

Тогда вероятность выживания равна

$$p_{\text{surv}}(t) = \int_0^L n(x; t) dx = \frac{2}{\pi} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1 - (-1)^k}{k} \sin \frac{\pi k l}{L} e^{-\frac{\pi^2 k^2 D}{L^2} t}$$

а плотность распределения случайного времени первого достижения имеет вид

$$\begin{aligned} P(T) &= - \left. \frac{dp_{\text{surv}}(t)}{dt} \right|_{t=T} = \\ &= \frac{2\pi D}{L^2} \sum_{k=1}^{\infty} (1 - (-1)^k) k \sin \frac{\pi k l}{L} \exp \left(-\frac{\pi^2 k^2 D}{L^2} T \right) \end{aligned}$$

Далее вычисляем среднее время первого достижения

$$\langle T \rangle = \int_0^{\infty} P(T) T dT = \frac{2}{\pi^3} \frac{L^2}{D} \sum_{k=1}^{+\infty} \frac{1 - (-1)^k}{k^3} \sin \frac{\pi k l}{L} = \frac{l(L-l)}{2D}$$

Наконец, вероятность того, что частица будет поглощена именно левой стенкой равна интегралу по времени от потока вероятности в точке $x = 0$. Для потока имеем

$$J_L(t) = D \partial_x n(x; t)|_{x=0} = \frac{2\pi D}{L^2} \sum_{k=1}^{\infty} k \exp \left(-\frac{\pi^2 k^2 D}{L^2} t \right) \sin \left(\frac{\pi k}{L} l \right)$$

и, следовательно,

$$p_L = \int_0^{+\infty} J_L(t) dt = \frac{2}{\pi} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k} \sin \left(\frac{\pi k}{L} l \right) = \frac{L-l}{L}$$

Белан-ВШЭ-л5.2

Рассмотрим одномерное броуновское движение в области $x > 0$ с непроницаемой стенкой в точке $x = 0$. Обозначим через T момент времени, когда частица впервые окажется в точке $x = L > 0$. Вычислите математическое ожидание времени первого достижения $\langle T \rangle$, если в нулевой момент времени частица находится в точке $x(0) = l$, где $0 < l < L$, а ее коэффициент диффузии равен D .

Решение задачи 2. Поставим в точке $x = L$ поглощающую стенку и воспользуемся методом изображений. А именно, можно утверждать, что плотность распределения координаты частицы $n(x; t)$ в нашей задаче (то есть на интервале $x \in [0, L]$ с непроницаемой стенкой в $x = 0$ и поглощающей стенкой в $x = L$) дается решением следующей начально-краевой задачи

$$\begin{cases} \partial_t n = D \partial_x^2 n, \\ n(x, 0) = \delta(x - l) + \delta(x + l), \\ n(-L; t) = n(L; t) = 0. \end{cases}$$

Словом, мы доопределили задачу на область $[-L, 0]$, введя вторую поглощающую стенку в точке $x = -L$, и подобрали начальное условие таким образом, чтобы задачи равенство нулю потока вероятности в точке $x = 0$ было гарантировано по построению. Используя результаты предыдущей задачи, получаем

$$\begin{aligned} n(x; t) &= \frac{1}{L} \sum_{k=1}^{\infty} e^{-\frac{\pi^2 k^2 D}{4L^2} t} \left[\sin\left(\frac{\pi k}{2L}(L+l)\right) + \sin\left(\frac{\pi k}{2L}(L-l)\right) \right] \sin\left(\frac{\pi k}{2L}(x+L)\right) = \\ &= \frac{2}{L} \sum_{k=1}^{\infty} e^{-\frac{\pi^2 k^2 D}{4L^2} t} \sin\left(\frac{\pi k}{2}\right) \cos\left(\frac{\pi k l}{2L}\right) \sin\left(\frac{\pi k}{2L}(x+L)\right). \end{aligned}$$

Значит

$$\begin{aligned} \langle T \rangle &= \int_0^{\infty} p_{\text{surv}}(t) dt = \int_0^{\infty} \int_0^L n(x; t) dt dx = \\ &= \frac{16L^2}{\pi^3 D} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m}{(2m+1)^3} \cos\left(\frac{(2m+1)\pi l}{2L}\right) = \frac{L^2 - l^2}{2D} \end{aligned}$$

Белан-ВШЭ-л5.3

Рассмотрим одномерное броуновское движение на интервале $[0, L]$, концы которого стартующей в точке $x = l$, для того чтобы побывать в каждой точке указанного интервала. Найдите среднее $\langle T_{\text{cover}} \rangle$, если коэффициент диффузии частицы равен D .

Белан-ВШЭ-л5.4

Две одинаковые броуновские частицы, коэффициент диффузии каждой из которых равен D , начинают одномерное движение, находясь на расстоянии L друг от друга. Обозначим через T случайное время, спустя которое они впервые встретятся. Найдите среднее гармоническое значение $\langle T^{-1} \rangle$.

Белан-ВШЭ-л5.5

Броуновская частица с коэффициентом диффузии D в начальный момент времени находилась на расстоянии L от поверхности шара, радиус которого равен $R < L$. Определите вероятность того, что частица никогда не столкнется с шаром.

12.0.3 Задачи на понимание основных законов кинетики

(тут очень хорошие задачи, соберу их! пока ничего не могу решить, потому что ничего не усвоено!!!)

МФТИ-з.5. распределение Максвелла обращает в нуль интеграл столкновений

Доказать, что локально-равновесное распределение Максвелла обращает в нуль интеграл столкновений. Проверить это утверждение для электрон-электронного и электрон-фононного интегралов столкновений.

МФТИ-з.6. Доказать и проверить Н-теорему Больцмана

Доказать Н-теорему Больцмана для газа сталкивающихся молекул. Проверить, что Н-теорема Больцмана справедлива в τ -приближении.

МФТИ-з.7. уравнение Эйлера из уравнения Навье–Стокса

Вывести уравнение Эйлера из уравнения Навье–Стокса.

МФТИ-3.8. при локально-равновесном распределении нет теплопроводности

Доказать, что при локально-равновесном распределении отсутствует теплопроводность.

МФТИ-3.9. диффузия легкого газа в тяжелом

Вычислить коэффициент диффузии легкого газа в тяжелом. Получить соотношение Эйнштейна между подвижностью и коэффициентом диффузии.

МФТИ-3.10. Элементарные свойства уравнения Паули (????)

Доказать, что уравнение кинетического баланса Паули сохраняет нормировку вероятности. Доказать, что уравнение Паули приводит к возрастанию энтропии. Решить уравнение Паули для двухуровневой системы.

МФТИ-3.11.*

Вычислить коэффициент теплопроводности диэлектрика в различных областях температуры. Качественно исследовать температурную зависимость коэффициентов переноса в металлах (рассмотреть электрон-электронные, электрон-примесные и электрон-фононное рассеяния).

12.0.4 Задачи на кинетику квантовых газов**МФТИ-дз1.8 Влияние фермионов на движущуюся стенку в них (!?!?!?)**

Имеется плоская стенка, которая с небольшой скоростью движется через равновесный газ фермионов. Столкновения фермионов со стенкой носят зеркальный характер. Найти силу сопротивления, испытываемую стенкой. Также самое сделать для бозонов. Рекомендуется перед решением этих задач вспомнить определение тензора плотности потока импульса и обсудить его физический смысл. Как изменится решение задачи, если стенка является полупроницаемой мембраной, т.е., с вероятностью $D < 1$ частица может проходить сквозь стенку? Обсудить случай диффузного отражения от стенки.

Решение (????) (очень крутая задача, пока не знаю как решать, но буду скоро смотреть.)

12.0.5 Задачи на кинетику в гидродинамике

(!!! тут крутые задачи на оценку интеграла столкновений, подготовлюсь к ним!)

Колоколов.34.1) Колмогоровские спектры для поверхностных капиллярных волн

Найти колмогоровские стационарные спектры для поверхностных капиллярных волн на мелкой и глубокой воде.

(??? в теорию мб перенесу это.)

Решение Кинетическое уравнение для трехволнового взаимодействия имеет вид

$$\frac{\partial}{\partial t} n_{\mathbf{k}} = I[n_{\mathbf{k}}] \equiv \pi \int \frac{d\mathbf{k}_1 d\mathbf{k}_2}{(2\pi)^d} (R_{\mathbf{k};\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2} - R_{\mathbf{k}_1;\mathbf{k},\mathbf{k}_2} - R_{\mathbf{k}_2;\mathbf{k},\mathbf{k}_1}),$$

где

$$R_{\mathbf{k};\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2} = |V_{\mathbf{k};\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2}|^2 [n_1 n_2 - n_{\mathbf{k}} (n_1 + n_2)] \delta(\omega_{\mathbf{k}} - \omega_1 - \omega_2) \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2),$$

а $V_{\mathbf{k};\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2}$ — матричный элемент трехволнового взаимодействия.

Для теплового равновесного спектра $n_{\mathbf{k}}^0 = T/\omega_{\mathbf{k}}$ в интеграле столкновений $I[n_{\mathbf{k}}]$ зануляется каждый R -член, поскольку

$$R_{\mathbf{k};\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2} \sim (\omega_{\mathbf{k}} - \omega_1 - \omega_2) \delta(\omega_{\mathbf{k}} - \omega_1 - \omega_2).$$

Кинетическое уравнение сохраняет полную энергию E :

$$\frac{dE}{dt} = \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^d} \omega_{\mathbf{k}} \dot{n}_{\mathbf{k}} = \pi \int \frac{d\mathbf{k} d\mathbf{k}_1 d\mathbf{k}_2}{(2\pi)^{2d}} \omega_{\mathbf{k}} (R_{\mathbf{k};\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2} - R_{\mathbf{k}_1;\mathbf{k},\mathbf{k}_2} - R_{\mathbf{k}_2;\mathbf{k},\mathbf{k}_1}).$$

После переобозначения переменных интегрирования во втором ($\mathbf{k} \leftrightarrow \mathbf{k}_1$) и третьем ($\mathbf{k} \leftrightarrow \mathbf{k}_2$) R -членах получим, что

$$\frac{dE}{dt} = \pi \int \frac{d\mathbf{k} d\mathbf{k}_1 d\mathbf{k}_2}{(2\pi)^{2d}} (\omega_k - \omega_1 - \omega_2) R_{\mathbf{k}; \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} = 0$$

поскольку R -член содержит $\delta(\omega_k - \omega_1 - \omega_2)$. Локальное условие сохранения энергии запишем в виде

$$\frac{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}}{\partial t} = -\text{div}_{\mathbf{k}} \mathbf{p}$$

где $\varepsilon_{\mathbf{k}} = \omega_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}}$ - плотность энергии, а \mathbf{p} - плотность потока энергии. Для изотропной системы $\mathbf{p} \parallel \mathbf{k}$, так что для двумерной системы $d = 2$ получим:

$$\text{div}_{\mathbf{k}} \mathbf{p} = \frac{1}{k} \frac{\partial}{\partial k} (kp)$$

откуда

$$p = -\frac{1}{k} \int_0^k \omega_{\mathbf{q}} \dot{n}_{\mathbf{q}} q dq,$$

а полный поток энергии в пространстве волновых векторов $P = \int dS_{\mathbf{k}} p$ равен

$$P_{d=2} = -2\pi \int_0^k \omega_{\mathbf{q}} I_{\mathbf{q}} q dq$$

Для трехмерной системы аналогично находим

$$P_{d=3} = -4\pi \int_0^k \omega_{\mathbf{q}} I_{\mathbf{q}} q^2 dq$$

Колоколов-? Конкретные системы

Найдем теперь для некоторых конкретных систем колмогоровские стационарные спектры вида $n_{\mathbf{k}} \sim 1/k^b$ с постоянным потоком энергии P по спектру.

1а) Поверхностные капиллярные волны на мелкой воде. В этом случае

$$d = 2, \omega_k \sim k^2, V_{k,12} \sim k_1 k_2.$$

Тогда

$$[n_1 n_2 - n_k (n_1 + n_2)] \sim 1/k^{2b}, \delta(\omega_k - \omega_1 - \omega_2) \sim 1/k^2, |V|^2 \sim k^4,$$

так что

$$I_q \sim \int_0^q d^2 k_1 \frac{1}{k_1^2} \frac{1}{k_1^{2b}} k_1^4 \sim q^{4-2b}$$

Поэтому

$$P_{d=2} \sim \int_0^k q^2 I_{\mathbf{q}} q dq \sim k^{8-2b} = \text{Const} \rightarrow b = 4.$$

Таким образом, стационарный спектр для поверхностных капиллярных волн на мелкой воде имеет вид

$$n_k = \frac{\text{Const}}{k^4} \sim \frac{1}{\omega_k^2},$$

называющийся спектром Каца-Конторовича.

16) Поверхностные капиллярные волны на глубокой воде. В это случае

$$d = 2, \omega_k \sim k^{3/2}, \quad V_{k,12} \sim (k_1 k_2 / k)^{1/4} k_1 k_2 \sim k^{9/4}.$$

Тогда

$$[n_1 n_2 - n_k (n_1 + n_2)] \sim 1/k^{2b}, \delta(\omega_k - \omega_1 - \omega_2) \sim 1/k^{3/2}, |V|^2 \sim k^{9/2},$$

так что

$$I_q \sim \int_0^q d^2 k_1 \frac{1}{k_1^{3/2}} \frac{1}{k_1^{2b}} k_1^{9/2} \sim q^{5-2b}$$

Поэтому

$$P_{d=2} \sim \int_0^k q^{3/2} I_q q dq \sim k^{17/2-2b} = \text{Const} \rightarrow b = 17/4.$$

Таким образом, стационарный спектр для поверхностных капиллярных волн на глубокой воде имеет вид

$$n_k = \frac{\text{Const}}{k^{17/4}}$$

- спектр Захарова-Филоненко.

12.1 Задачи на кинетику твердых тел

(очень даже мб это буду писать в записи про твердое тело.)

12.1.1 Задачи на типичную кинетику электронов

БРМ-

3. Для рассеяния электронов на упругих немагнитных примесях найти в борновском приближении интеграл столкновений. Используя кинетическое уравнение Больцмана, вычислить время столкновений, транспортное время столкновений и определить электрическую проводимость. Считать спектр электронов, равным $\varepsilon(\rho) = p^2/2m$, а концентрацию примесей, равной n_i . Рассмотреть следующие потенциалы взаимодействия электрона с примесью:

- точечный потенциал $u(\mathbf{r}) = u_0 \delta(\mathbf{r})$;
- экранированный кулоновский потенциал $u(\mathbf{r}) = (Ze^2/r) \exp(-\kappa r)$.

БРМ-4. Термоэлектрика снова

В качестве простейшей модели для описания термоэлектрических явлений можно использовать кинетическое уравнение Больцмана в приближении времени релаксации (τ -приближение) и изотропную модель свободных электронов с дисперсией $\varepsilon(\rho) = p^2/2m$. Для простоты считать, что время столкновений зависит только от энергии электрона $\tau = \tau(\varepsilon)$.

а) Найти выражения для коэффициентов электропроводности σ , Зеебека S (дифференциальной термо-ЭДС), Пельтье Π и теплопроводности κ .

б) Определить поток энергии \mathbf{Q} , поток энтропии \mathbf{F} и диссипативную функцию R . з требования положительной определенности диссипативной функции показать положительность коэффициентов электропроводности σ и теплопроводности κ .

БРМ-5.

Пользуясь результатами предыдущей задачи, вычислить коэффициенты электропроводности σ , Зеебека S , Пельтье Π и теплопроводности κ для двух случаев:

- металла (вырожденный электронный газ) и
 - полупроводника (невырожденный больцмановский электронный газ).
- Найти коэффициент эффективности термоэлектрических явлений ZT

$$ZT = \frac{S^2 \sigma T}{\kappa}$$

и число Лоренца L

$$L = \frac{\kappa}{\sigma T}.$$

Считать, что время рассеяния τ зависит от энергии степенным образом $\tau(\varepsilon) \sim \varepsilon^{r-1/2}$.

12.1.2 Задачи кинетики для магнитных явлений

(??? это пока не смотрел, что-то много всего, статфиз подучить к этому нужно и пока не актуально.)

Колоколов.л.3.2 Гамильтониан трехволнового взаимодействия спиновых волн

Найти гамильтониан трехволнового дипольного взаимодействия для спиновых волн.

Указание (??? добавлю потом его, а то что-то стартовать даже не понятно с чего.)

Решение (???? суть решения в чем??? оно большое, важно написать это.)

Сперва соображениями про магнитный момент находим полный гамильтониан (какими???), дальше долго выделяем части 2-го и 3-го порядка, дальше долго диагонализуем. (В целом задача жесть большая какая)

В узлах кристаллической решетки расположены магнитные моменты \mathbf{S} , которые взаимодействуют друг с другом и внешним магнитным полем. Микроскопический модельный гамильтониан имеет вид

$$H = - \sum_i \mathbf{B}_0(\mathbf{r}_i) \cdot \mathbf{S}(\mathbf{r}_i) - \sum_{ij} J_{ij} \mathbf{S}(\mathbf{r}_i) \cdot \mathbf{S}(\mathbf{r}_j) - \frac{1}{2} \sum_{ij} \mathbf{h}_j(\mathbf{r}_i) \cdot \mathbf{S}(\mathbf{r}_i).$$

Первый член описывает взаимодействие спина в i -м узле решетки с координатой \mathbf{r}_i с внешним магнитным полем, второй член - так называемое обменное взаимодействие, приводящее при положительном знаке J к ферромагнитному упорядочиванию при температуре ниже критической, третий член описывает слабое диполь-дипольное взаимодействие между спинами, где $\mathbf{h}_j(\mathbf{r}_i)$ - магнитное поле, создаваемое j -м спином в i -м узле решетки.

Нас будут интересовать длинноволновые возбуждения намагниченности, поэтому перейдем к непрерывному описанию, вводя плотность намагниченности $\mathbf{M}(\mathbf{r})$, так, чтобы полные магнитные моменты совпадали:

$$\int \mathbf{M}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \sum_i \mathbf{S}(\mathbf{r}_i)$$

Тогда первый член в гамильтониане записывается как

$$H_0 = - \int \mathbf{B}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{M}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}$$

Второй член -

$$H_{ex} = J \int (\nabla \mathbf{M}(\mathbf{r}))^2 d\mathbf{r}.$$

В третьем члене магнитное поле диполя \mathbf{h} представим как $\mathbf{h} = -\nabla \phi$, где

$$\phi(\mathbf{r}_1) = \frac{\mathbf{M}(\mathbf{r}_2) \cdot \mathbf{r}}{r^3} = -\mathbf{M}(\mathbf{r}_2) \cdot \nabla \frac{1}{r} = -4\pi i \int \frac{\mathbf{M}(\mathbf{r}_2) \cdot \mathbf{q}}{q^2} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \frac{d^3 q}{(2\pi)^3}$$

и $\mathbf{r} \equiv \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$. Тогда третий член равен

$$H_{dd} = 2\pi \int d\mathbf{r}_1 \int d\mathbf{r}_2 \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \cdot \frac{(\mathbf{M}(\mathbf{r}_1) \cdot \mathbf{q})(\mathbf{M}(\mathbf{r}_2) \cdot \mathbf{q})}{q^2} e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)}.$$

Интеграл по q дает вклад, пропорциональный $\delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$, однако для длинноволновых спиновых волн это несущественно, поскольку для учета диполь-дипольного взаимодействия мы должны ограничить область интегрирования условием $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| > a$ - размера решетки, чтобы исключить самовоздействие. Разлагая $\mathbf{M}(\mathbf{r})$ в ряд Фурье,

$$\mathbf{M}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{M}_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$$

получим

$$H_{dd} = 2\pi \sum_{\mathbf{k}} (\mathbf{M}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{n})(\mathbf{M}_{-\mathbf{k}} \cdot \mathbf{n}), \quad \mathbf{n} = \frac{\mathbf{k}}{|\mathbf{k}|}, \quad |\mathbf{k}| < \frac{1}{a}.$$

Теперь следует выбрать канонические переменные и записать в гамильтоновой форме феноменологические уравнения движения Ландау - Лифшица:

$$\partial_t \mathbf{M}(\mathbf{r}, t) = g \left[\frac{\delta H}{\delta \mathbf{M}} \times \mathbf{M}(\mathbf{r}, t) \right]$$

которые описывают прецессию вектора намагниченности \mathbf{M} вокруг эффективного магнитного поля $\delta H / \delta \mathbf{M}$.

Отметим, что квадрат намагниченности есть сохраняющаяся величина, поскольку

$$\partial_t \mathbf{M}^2 = 2\mathbf{M} \cdot \partial_t \mathbf{M} = 2g\mathbf{M} \cdot \left[\frac{\delta H}{\delta \mathbf{M}} \times \mathbf{M} \right] = 0.$$

В достаточно сильном внешнем магнитном поле (или при низких температурах), направление которого выберем вдоль оси z , вектор намагниченности \mathbf{M} под действием внешних возмущений или теплового движения лишь слабо отклоняется от оси z , т. е. $M_x \sim M_y \ll M_z$, так что уравнения движения принимают вид

$$\partial_t M_x = gM_z \frac{\delta H}{\delta M_y}, \quad \partial_t M_y = -gM_z \frac{\delta H}{\delta M_x}.$$

Удобно перейти к циркулярным переменным $M_{\pm} = M_x \pm iM_y$, тогда

$$\partial_t M_+ = -2igM_z \frac{\delta H}{\delta M_-}, \quad \partial_t M_- = 2igM_z \frac{\delta H}{\delta M_+}.$$

В линейном приближении, когда $M_z \approx M_0 = \text{Const}$, определим новые канонические переменные из соотношений $M_+(\mathbf{r}, t) = \sqrt{2gM_0}a(\mathbf{r}, t)$, $M_-(\mathbf{r}, t) = \sqrt{2gM_0}a^*(\mathbf{r}, t)$ и получим канонические уравнения:

$$\partial_t a = -i \frac{\delta H}{\delta a^*}, \quad \partial_t a^* = i \frac{\delta H}{\delta a}.$$

Поскольку $M_z = \sqrt{M_0^2 - M_+ M_-}$ зависит только от произведения aa^* , будем искать точные преобразования к новым каноническим переменным в виде $M_+ = \sqrt{2gM_0}af(aa^*)$, $M_- = \sqrt{2gM_0}a^*f(aa^*)$.

Находя неизвестную функцию f из условия сохранения канонического вида уравнений движения, получим $f = \sqrt{1 - gaa^*/2M_0}$. Для наших целей достаточно знать, что поправка к M_{\pm} имеет третий порядок по переменным a . Из равенства $\mathbf{M}^2 = M_0^2 = M_z^2 + M_+ M_-$ находим $M_z \approx M_0 - gaa^*$ с точностью до членов 4-го порядка.

Если пренебречь H_{dd} , то после перехода к фурье-компонентам получим

$$H = \int gB_0 a(\mathbf{r})a^*(\mathbf{r})d\mathbf{r} + 2gM_0 J \int (\nabla a(\mathbf{r}))(\nabla a^*(\mathbf{r}))d\mathbf{r} = \sum_{\mathbf{k}} \omega_k a_{\mathbf{k}}^* a_{\mathbf{k}},$$

где $\omega_k = gB_0 + 2gM_0 Jk^2 \equiv \omega_H + \omega_{ex}(kb)^2$, здесь b - расстояние между узлами решетки, а B_0 - внешнее магнитное поле, направленное вдоль оси z .

Члены второго H_2 и третьего H_3 порядка Теперь извлечем из H_{dd} члены второго H_2 и третьего H_3 порядка по новым каноническим переменным a, a^* . Запишем члены $\mathbf{M}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{n}$ через циркулярные переменные:

$$\mathbf{M}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{n} = M_z(\mathbf{k})n_z + \frac{1}{2} [M_+(\mathbf{k})n_- + M_-(\mathbf{k})n_+]$$

M_z содержит члены второго порядка по a, a^* , M_{\pm} - члены первого и третьего порядка. Поэтому вклад в H_2 дадут произведения $M_{\pm} \cdot M_{\mp}$, а в H_3 - произведения $M_z \cdot M_{\pm}$:

$$\begin{aligned} H_{dd}^{(2)} &= \frac{\pi}{2} \sum_{\mathbf{k}} [M_+(\mathbf{k})n_- + M_-(\mathbf{k})n_+] [M_+(-\mathbf{k})n_- + M_-(-\mathbf{k})n_+] = \\ &= \frac{\pi}{2} \sum_{\mathbf{k}} [n_-^2 M_+(\mathbf{k})M_+(-\mathbf{k}) + n_+^2 M_-(\mathbf{k})M_-(-\mathbf{k})] + \\ &+ \frac{\pi}{2} \sum_{\mathbf{k}} n_- n_+ (M_+(\mathbf{k})M_-(-\mathbf{k}) + M_-(\mathbf{k})M_+(-\mathbf{k})). \end{aligned}$$

Подставляя $M_+(\mathbf{k}) = \sqrt{2gM_0}a(\mathbf{k})$, $M_-(\mathbf{k}) = \sqrt{2gM_0}a^*(\mathbf{k})$, получаем:

$$\begin{aligned} H_{dd}^{(2)} &= \pi g M_0 \sum_{\mathbf{k}} [n_-^2 a(\mathbf{k})a(-\mathbf{k}) + n_+^2 a^*(\mathbf{k})a^*(-\mathbf{k})] + \\ &+ \pi g M_0 \sum_{\mathbf{k}} n_- n_+ (a(\mathbf{k})a^*(-\mathbf{k}) + a^*(\mathbf{k})a(-\mathbf{k})). \end{aligned}$$

Из вещественности

$$M_{x,y}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} M_{x,y}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$$

следует $M_{x,y}^*(\mathbf{k}) = M_{x,y}(-\mathbf{k})$, откуда $M_+(-\mathbf{k}) = M_-^*(\mathbf{k})$, т. е. $a(-\mathbf{k}) = a(\mathbf{k})$. Таким образом,

$$H_{dd}^{(2)} = \pi g M_0 \sum_{\mathbf{k}} [n_-^2 a(\mathbf{k}) a(\mathbf{k}) + n_+^2 a^*(\mathbf{k}) a^*(\mathbf{k}) + 2n_- n_+ a(\mathbf{k}) a^*(\mathbf{k})].$$

Собирая все квадратичные вклады, получим:

$$\begin{aligned} H^{(2)} &= \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^* a_{\mathbf{k}} (\omega_H + \omega_{ex} k^2 b^2 + 2\pi g M_0 n_- n_+) + \\ &+ \sum_{\mathbf{k}} \pi g M_0 (a_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} n_-^2 + a_{\mathbf{k}}^* a_{\mathbf{k}}^* n_+^2) \equiv \\ &\equiv \sum_{\mathbf{k}} [A_k a_{\mathbf{k}}^* a_{\mathbf{k}} + B_k a_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} n_-^2 + B_k^* a_{\mathbf{k}}^* a_{\mathbf{k}}^* n_+^2]. \end{aligned}$$

Обычно $\omega_H + \omega_{ex} k^2 b^2 \gg \pi g M_0 \equiv \omega_m/4$, т. е. $A_k \gg |B_k|$.

Диагонализация Осталось диагонализировать $H^{(2)}$, используя $(u-v)$ -преобразования Боголюбова, вводя новые канонические переменные b_k, b_k^* :

$$a_{\mathbf{k}} = u_k b_{\mathbf{k}} + v_k b_{\mathbf{k}}^*, \quad a_{\mathbf{k}}^* = u_k b_{\mathbf{k}}^* + v_k^* b_{\mathbf{k}}.$$

Чтобы уравнения сохранили свой канонический вид

$$\partial_t a_{\mathbf{k}} = -i \frac{\delta H}{\delta a_{\mathbf{k}}^*} \rightarrow \partial_t b_{\mathbf{k}} = -i \frac{\delta H}{\delta b_{\mathbf{k}}^*}$$

следует выбрать $u_k^2 - |v_k|^2 = 1$, а чтобы недиагональные члены занулились - надо выбрать

$$u_k^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{A_k}{\omega_k} \right), \quad |v_k|^2 = \frac{1}{2} \left(\frac{A_k}{\omega_k} - 1 \right).$$

В результате получим:

$$H^{(2)} = \sum_{\mathbf{k}} \omega_k b_{\mathbf{k}}^* b_{\mathbf{k}}, \quad \text{где } \omega_k = \sqrt{A_k^2 + B_k^2}.$$

Таким образом, вклад от членов B_k в ω_k имеет второй порядок малости, и в пределе $A_k \gg |B_k|$ их можно просто отбросить. Для нахождения $H^{(3)}$ следует подставить

$$\begin{aligned} M_z(\mathbf{k}) &= \frac{1}{\sqrt{V}} \int (M_z(\mathbf{r}) - M_0) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{r} = \frac{1}{\sqrt{V}} \int (-g) a^*(\mathbf{r}) a(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{r} = \\ &= \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} (-g) a_{\mathbf{k}_1} a_{\mathbf{k}_2}^* \Delta(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}). \end{aligned}$$

Получим

$$H_{dd}^{(3)} = \pi \sum_{\mathbf{k}} [n_z n_+ (M_z(\mathbf{k}) M_-(-\mathbf{k}) + M_z(-\mathbf{k}) M_-(\mathbf{k})) + \text{c.c.}].$$

Переходя к каноническим переменным a, a^* , имеем:

$$H_{dd}^{(3)} = \frac{\pi(-g)\sqrt{8gM_0}}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \sin \theta_k \cos \theta_k e^{i\phi_k} a_{\mathbf{k}_1} a_{\mathbf{k}_2}^* a_{\mathbf{k}}^* \Delta(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}) + \text{c.c.}$$

После симметризации по \mathbf{k}, \mathbf{k}_2 получаем:

$$\begin{aligned} H_{dd}^{(3)} &= -\sqrt{\frac{g\omega_m^2}{32M_0V}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} (\sin 2\theta_k e^{i\phi_k} + \sin 2\theta_{k_2} e^{i\phi_{k_2}}) a_{\mathbf{k}_1} a_{\mathbf{k}_2}^* a_{\mathbf{k}}^* \Delta(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}) \\ &+ \text{c.c.} \equiv \frac{1}{2\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} V_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}} a_{\mathbf{k}_1} a_{\mathbf{k}_2}^* a_{\mathbf{k}}^* \Delta(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}) + \text{c.c.} \end{aligned}$$

Колоколов.л.з.3 Декремент затухания спиновых волн за счет трехволнового взаимодействия

Найти декремент затухания спиновых волн за счет трехволнового взаимодействия для:

- 1) длинных волн ($\omega_{ex}k^2a^2 \ll \omega_H$);
- 2) вблизи порога распада.

Решение Рассмотрим затухание спиновых волн за счет взаимодействия с тепловыми магнонами. Закон дисперсии спиновых волн имеет вид $\omega_{\mathbf{k}} = \omega_H + \omega_{ex}a^2k^2$. 1. Затухание длинных волн ($\omega_{ex}k^2a^2 \ll \omega_H$) В этом случае возможно только слияние волны с тепловыми магнонами, поскольку процесс распада запрещен (см. ниже). Рассмотрим спиновую волну с волновым вектором \mathbf{k} , распространяющуюся перпендикулярно внешнему магнитному полю. Выберем систему координат с осью z вдоль внешнего магнитного поля и осью x вдоль волнового вектора \mathbf{k} спиновой волны, считая ее начальную амплитуду много большей теплового фона (рис. 13). В выбранной системе координат $\theta_k = \pi/2$, так что $\sin 2\theta_k = 0$ и квадрат матричного элемента трехволнового взаимодействия для процесса слияния имеет вид

$$|V_{\mathbf{k}+\mathbf{q};\mathbf{k},\mathbf{q}}|^2 = \frac{\omega_m^2 g}{8M_0} \sin^2 2\theta_q$$

Кинетическое уравнение для процесса слияния

$$\dot{n}_{\mathbf{k}} = 2\pi \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} |V_{\mathbf{k}+\mathbf{q};\mathbf{k},\mathbf{q}}|^2 [-n_{\mathbf{k}}n_{\mathbf{q}} + n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}(n_{\mathbf{k}} + n_{\mathbf{q}})] \delta(\omega_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \omega_{\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{q}})$$

в случае $n_{\mathbf{k}} \gg n_{\mathbf{q}}, n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}$ имеет решение вида $n_{\mathbf{k}}(t) \sim \exp(-2\gamma_{\mathbf{k}}t)$, где декремент затухания спиновой волны равен

$$\gamma_{\mathbf{k}} = \frac{g\omega_m^2 T \omega_{\mathbf{k}}}{64\pi^2 M_0} \int \frac{d\mathbf{q} \sin^2 2\theta_q}{\omega_{\mathbf{q}} \omega_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}} \delta(\omega_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \omega_{\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{q}})$$

Здесь было использовано, что $n_{\mathbf{q}} \approx n_{\mathbf{q}}^0 = T/\omega_{\mathbf{q}}, n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \approx n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^0 = T/\omega_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}$

Из сохранения энергии $\omega_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} = \omega_{\mathbf{k}} + \omega_{\mathbf{q}}$ следует

$$\omega_H + \omega_{ex}a^2(\mathbf{k} + \mathbf{q})^2 = 2\omega_H + \omega_{ex}a^2(k^2 + q^2),$$

откуда

$$q = \frac{\omega_H}{2k\omega_{ex}a^2 \sin \theta_{\mathbf{q}} \cos \phi_{\mathbf{q}}}$$

где $\theta_{\mathbf{q}}, \phi_{\mathbf{q}}$ — полярный и азимутальный углы в выбранной системе координат. Это равенство означает, в частности, что $\cos \phi_{\mathbf{q}} > 0$. Поскольку $\sin \theta_{\mathbf{q}} \cos \phi_{\mathbf{q}} \leq 1$, то

$$\omega_{ex}q^2a^2 \geq \frac{\omega_{ex}a^2\omega_H^2}{4k^2\omega_{ex}^2a^4} \gg \omega_H,$$

т. е. $q \gg k$ и, следовательно, $\omega_{\mathbf{q}} \approx \omega_{ex}q^2a^2 \approx \omega_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}$. Удобно дельтафункцию $\delta(\omega_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \omega_{\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{q}})$ переписать в виде

$$\delta(\omega_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \omega_{\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{q}}) = \delta(\omega_H - \alpha q) = \frac{1}{\alpha} \delta(q - \omega_H/\alpha),$$

где $\alpha = 2k\omega_{ex}a^2 \sin \theta_{\mathbf{q}} \cos \phi_{\mathbf{q}}$. Тогда

$$\begin{aligned} \gamma_{\mathbf{k}} &= \frac{g\omega_m^2 T \omega_{\mathbf{k}}}{64\pi^2 M_0} \int d\Omega_{\mathbf{q}} \int \frac{q^2 dq \sin^2 2\theta_q}{\omega_{ex}^2 a^4 q^4} \delta(\omega_H - \alpha q) = \\ &= \frac{g\omega_m^2 T \omega_{\mathbf{k}} k}{32\pi^2 M_0 \omega_H^2 \omega_{ex} a^2} \int d\Omega_{\mathbf{q}} \sin^2 2\theta_q \sin \theta_q \cos \phi_q. \end{aligned}$$

Угловой интеграл $I_q = \int d\Omega_{\mathbf{q}} \sin^2 2\theta_q \sin \theta_q \cos \phi_q$ равен

$$\begin{aligned} I_q &= \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \cos \phi_q d\phi_{\mathbf{q}} \int_0^{\pi} \sin^2 2\theta_q \sin \theta_q d\theta_q = \\ &= \int_0^{\pi} \sin^2 2\theta_q (1 - \cos 2\theta_q) d\theta_q = \frac{\pi}{2}. \end{aligned}$$

Окончательно

$$\gamma_{\mathbf{k}} = \frac{g\omega_m^2 T \omega_{\mathbf{k}} k}{64\pi M_0 \omega_H^2 \omega_{ex} a^2}$$

2. Затухание спиновых волн вблизи порога распада Найдем вклад в декремент затухания спиновых волн от процесса распада вблизи его порога. Минимальная частота спиновой волны с законом дисперсии $\omega_{\mathbf{k}} = \omega_H + \alpha k^2$ ($\alpha \equiv \omega_{ex} a^2$), при которой возможен ее распад на две другие, находится из сохранения частоты и волнового вектора

$$\omega_{\mathbf{k}} = \omega_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} + \omega_{\mathbf{q}}$$

Удобно представить

$$\mathbf{q} = \frac{\mathbf{k}}{2} + \delta\mathbf{q}, \quad \mathbf{k} - \mathbf{q} = \frac{\mathbf{k}}{2} - \delta\mathbf{q}$$

Тогда, подставляя в уравнение сохранения частоты, получим:

$$2\alpha\delta q^2 = \frac{\alpha k^2}{2} - \omega_H$$

следовательно, $\alpha k^2 > 2\omega_H$ и $(\omega_{\mathbf{k}})_{\min} = 3\omega_H$.

Пусть $\omega_{\mathbf{k}} = 3\omega_H + \varepsilon$. Тогда

$$\delta(\omega_{\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \omega_{\mathbf{q}}) = \delta(2\alpha\delta q^2 - \varepsilon/2)$$

Таким образом, вблизи порога распада $\delta q \sim \sqrt{\varepsilon} \ll k$, следовательно, $\mathbf{k} - \mathbf{q} \approx \mathbf{q} \approx \mathbf{k}/2$. Значит, все вектора направлены в одну сторону и поэтому

$$|V_{\mathbf{k};\mathbf{k}-\mathbf{q},\mathbf{q}}|^2 \approx \frac{\omega_m^2 g}{2M_0} \sin^2 2\theta_k$$

Кинетическое уравнение для распада:

$$\dot{n}_{\mathbf{k}} = \pi \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} |V_{\mathbf{k};\mathbf{k}-\mathbf{q},\mathbf{q}}|^2 [n_{\mathbf{q}} n_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - n_{\mathbf{k}} (n_{\mathbf{q}} + n_{\mathbf{k}-\mathbf{q}})] \delta(\omega_{\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \omega_{\mathbf{q}}).$$

Поэтому вклад в декремент затухания от распада равен

$$\gamma_{\mathbf{k}} = \frac{\pi}{2} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} |V_{\mathbf{k};\mathbf{k}-\mathbf{q},\mathbf{q}}|^2 [n_{\mathbf{q}} + n_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}] \delta(\omega_{\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \omega_{\mathbf{q}}).$$

Учитывая малую величину ε только в аргументе дельта-функции, получим:

$$[n_{\mathbf{q}} + n_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}] \delta(\omega_{\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \omega_{\mathbf{q}}) \approx \frac{4T}{3\omega_H} \delta(2\alpha\delta q^2 - \varepsilon/2).$$

Тогда

$$\gamma_{\mathbf{k}} = \frac{g\omega_m^2 T \sin^2 2\theta_{\mathbf{k}}}{24\pi^2 \omega_H} \int d^3 q \delta(2\alpha\delta q^2 - \varepsilon/2)$$

Так как $\mathbf{q} = \mathbf{k}/2 + \delta\mathbf{q}$, то $d\mathbf{q} = d\delta\mathbf{q}$, и поэтому

$$\int d^3 q \delta(2\alpha\delta q^2 - \varepsilon/2) = \int d^3 \delta q \frac{1}{2\alpha} \delta(\delta q^2 - \varepsilon/4\alpha) = \frac{\pi}{\alpha} \sqrt{\frac{\varepsilon}{4\alpha}}$$

Окончательно

$$\gamma_{\mathbf{k}} = \frac{\sqrt{\omega_k - 3\omega_H} g\omega_m^2 T \sin^2 2\theta_{\mathbf{k}}}{48\pi\omega_H (\omega_{ex} a^2)^{3/2}}$$

Зависимость вида $\sqrt{\omega_k - 3\omega_H}$ неаналитична и характерна почти для всех пороговых явлений. Вклад слияния в этой области может быть больше, но он не имеет особенностей по k , и поэтому распадный вклад хорошо различим.

Колоколов.34.2) колмогоровские стационарные спектры для спиновых волн

Найти колмогоровские стационарные спектры для поверхностных спиновых волн.

Решение Для случая $\omega_{ex} k^2 a^2 \gg \omega_H$ закон дисперсии имеет вид $\omega_k \sim k^2$, а матричный элемент от k не зависит. Оказывается, что угловая зависимость у всех трех членов в I_k одинакова, $\sim (1 + 2 \cos^2 \theta - 3 \cos^4 \theta)$, поэтому

$$I_q \sim \int_0^q d^3 k_1 \frac{1}{k_1^2} \frac{1}{k_1^{2b}} \sim q^{1-2b}$$

Таким образом,

$$P_{d=3} \sim \int_0^k q^2 q^{1-2b} q^2 dq \sim k^{6-2b} = \text{Const} \rightarrow b = 3.$$

Стационарный спектр для спиновых волн имеет вид

$$n_k = \frac{\text{Const}}{k^3}.$$

3) Звуковые волны в трехмерном пространстве. В это случае $d = 3, \omega_k \sim k, V_{k,12} \sim k^{3/2}$. Тогда $[n_1 n_2 - n_k (n_1 + n_2)] \sim 1/k^{2b}, \delta(\omega_k - \omega_1 - \omega_2) \sim 1/k, |V|^2 \sim k^3$, так что

$$I_q \sim \int_0^q d^3 k_1 \frac{1}{k_1} \frac{1}{k_1^{2b}} k_1^3 \sim q^{5-2b}.$$

Поэтому

$$P_{d=3} \sim \int_0^k q q^{5-2b} q^2 dq \sim k^{9-2b} = \text{Const} \rightarrow b = 9/2.$$

Таким образом, стационарный спектр для звуковых волн в трехмерном пространстве имеет вид

$$n_k = \frac{\text{Const}}{k^{9/2}} \sim \frac{1}{\omega_k^{9/2}}$$

- спектр Захарова - Сагдеева.

БРМ-6 Термогальваномагнитные явления

В качестве простейшей модели для описания термогальваномагнитных явлений в магнитном поле можно использовать кинетическое уравнение Больцмана в приближении времени релаксации (τ -приближение) и изотропную модель свободных электронов с дисперсией $\varepsilon(p) = p^2/2m$. Для простоты считать, что время столкновений зависит только от энергии электрона $\tau = \tau(\varepsilon)$, а магнитное поле достаточно слабое $(eH/mc)\tau = \Omega\tau \ll 1$ чтобы можно было ограничиться линейным по полю приближением.

а) Найти выражения для плотности электрического тока j и для диссипативного потока энергии q .

б) Вычислить коэффициенты Холла R , Нернста N и Ледюка-Риги L для случая металла (вырожденный электронный газ).

БРМ-

7. Найти тензор электропроводности металла $\sigma_{\alpha\beta}$ в постоянном однородном магнитном поле \mathbf{H} , считая что функция распределения электронов $n(p)$ подчиняется кинетическому уравнению Больцмана в приближении времени релаксации $\tau = \tau(\varepsilon)$, и предполагая простой электронный спектр $\varepsilon(p) = p^2/2m$.

12.1.3 Задачи на кинетику в металле и в нормальной ферми-жидкости

БРМ-

8. Определить в борновском приближении интеграл столкновений для вырожденной ферми-жидкости. Матричный элемент взаимодействия двух фермионов считать равным $U(q)$, где q - переданный импульс в результате столкновения двух фермионов. Найти зависимость времени релаксации τ от энергии и температуры в области энергий возбуждений и температур, малых по сравнению с энергией Ферми ε_F .

БРМ-

9. Определить в борновском приближении интеграл столкновений в случае двумерного вырожденного ферми-газа. Матричный элемент взаимодействия двух фермионов считать равным $U(q)$, где q - переданный импульс в результате столкновения двух фермионов. Найти зависимость времени релаксации τ от энергии и температуры в области энергий возбуждений и температур, малых по сравнению с энергией Ферми ε_F .

БРМ-10.

Неравновесные состояния ферми-жидкости описываются функцией распределения квазичастиц, зависящей от координат, импульсов и времени $n = n(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$. При нулевой температуре или при достаточно низких температурах столкновения между квазичастицами становятся настолько редкими, что ими можно полностью пренебречь. В отсутствие столкновений между частицами справедлива теорема Лиувилля о тождественном обращении в нуль полной производной по времени от функции распределения

$$\frac{dn}{dt} = \frac{\partial n}{\partial t} + \{H, n\} = 0,$$

где $\{H, n\}$ - скобки Пуассона для гамильтониана H и функции распределения n . Используя следующее кинетическое уравнение

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} \frac{\partial n}{\partial \mathbf{r}} - \frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial n}{\partial \mathbf{p}} = 0,$$

рассмотреть малые колебания функции распределения при $T = 0$. Найти условия, когда возможно распространение незатухающих волн, получивших название нуль-звук. Считать, что функция взаимодействия квазичастиц не зависит от импульсов $f(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = f_0$.

БРМ-

11. Найти дисперсию и поглощение низкочастотного и высокочастотного звука в нормальной изотропной ферми-жидкости при низких температурах. Для расчета воспользоваться интегралом столкновений $\text{St}[n_p]$ в приближении эффективного времени релаксации $\tau = \tau(T)$ и в представлении, которое позволяет учесть законы сохранения полного числа частиц, импульса и энергии

$$\text{St}[n_p] = -\frac{1}{\tau} [\delta n_p - \langle \delta n_p \rangle - 3 \langle \delta n_p \cos \theta \rangle \cos \theta].$$

Здесь $\delta n_p = n_p - n_0(\varepsilon_p)$ — отклонение функции распределения квазичастиц от равновесной функции распределения $n_0(\varepsilon_p)$. Угловые скобки обозначают усреднение по всем возможным направлениям вектора \mathbf{p} , полярный и азимутальный углы которого, соответственно, равны θ и φ ,

$$\langle \dots \rangle = \int \dots \frac{d\Omega_p}{4\pi}, \quad \Omega_p = (\theta, \varphi).$$

Считать, что функция взаимодействия квазичастиц не зависит от импульсов и отвечает отталкиванию $f(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = f_0 > 0$.

12.1.4 Задачи на Кинетические коэффициенты**БРМ-**

12. Как правило, линейризованное кинетическое уравнение сводится к неоднородному интегральному уравнению вида

$$\int d^3 p' W(\mathbf{p}, \mathbf{p}') [\Phi(\mathbf{p}) - \Phi(\mathbf{p}')] = f(\mathbf{p})$$

с положительно определенным симметричным ядром $W(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = W(\mathbf{p}', \mathbf{p})$ и $W(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \geq 0$, неизвестной функцией $\Phi(\mathbf{p})$ и заданной функцией $f(\mathbf{p})$, зависящей от внешних полей. Область интегрирования распространяется на все импульсное \mathbf{p} -пространство. 2.5. Электрон-фононное рассеяние в металле. Кинетические коэффициенты а) Показать, что интегральное уравнение может быть выведено из требования безусловного экстремума для следующего функционала

$$F[\Phi(\mathbf{p})] = \frac{1}{2} \iint W(\mathbf{p}, \mathbf{p}') [\Phi(\mathbf{p}) - \Phi(\mathbf{p}')]^2 d^3 p d^3 p' - \int d^3 p f(\mathbf{p}) \Phi(\mathbf{p})$$

б) Доказать следующий вариационный принцип, который может быть использован для отыскания решения интегрального уравнения. Минимальное значение отношения

$$R[\Phi(\mathbf{p})] = \frac{\iint W(\mathbf{p}, \mathbf{p}') [\Phi(\mathbf{p}) - \Phi(\mathbf{p}')]^2 d^3 p d^3 p'}{[\int d^3 p f(\mathbf{p}) \Phi(\mathbf{p})]^2}$$

дается функцией $\Phi(\mathbf{p})$, которая является решением интегрального уравнения. С помощью выбора разумных пробных функций вариационный принцип позволяет получать некоторое приближение к истинному решению интегрального уравнения.

БРМ-

13. В идеальном периодическом кристалле электрон не рассеивается. Тепловые колебания атомов кристаллической решетки около положения равновесия, которые могут быть описаны как набор элементарных колебательных квантов - фононов, ведут к нарушению строгой периодичности и, как следствие, приводят к рассеянию электрона, которое обычно рассматривают как процесс поглощения или испускания фононов. Найти коэффициент электропроводности металла σ и транспортное время рассеяния τ_{tr} электрона, взаимодействующего с тепловыми колебаниями кристаллической решетки. Дискретностью решетки ионов пренебречь и считать кристаллическую решетку непрерывной средой. Указание. Рассмотреть модель металла, представляющего собой изотропную ферми-жидкость с квадратичным законом дисперсии электронов $\varepsilon_p = p^2/2m$. В качестве дополнительного упрощения считать, что фононы представлены только одной акустической ветвью с дисперсией $\omega_k = sk$, где s - скорость звука. Фононный спектр ограничен максимальным волновым вектором $k_D \sim \pi/a$, означающим отсутствие колебаний с длиной волны меньше, чем межатомное расстояние a . При решении задачи учесть, что концентрация электронов в металле $n \sim 1/a^3$, импульс Ферми $p_F \sim \hbar/a$ и, следовательно, можно считать величины p_F и $\hbar k_D$ одного порядка $p_F \sim \hbar k_D$, не делая между ними количественного различия. Воспользоваться также условием малости отношения скорости звука к скорости Ферми $s/v_F \sim \sqrt{m/M} \ll 1$ в меру квадратного корня из отношения массы электрона m к массе иона M . Возможным отклонением функции распределения фононов N_k от равновесной функции Планка или эффектом увлечения фононов электронами пренебречь (приближение Блоха).

БРМ-

14. Как правило, металлы обладают хорошей теплопроводностью, которая обусловлена переносом тепла электронами проводимости и ограничена рассеянием электронов на колебаниях ионной решетки - фононах. В качестве простейшей модели металла можно выбрать модель металла из предыдущей задачи, т. е. считать металл изотропной ферми-жидкостью с законом дисперсии электронов $\varepsilon_p = p^2/2m$ и, в которой имеется единственная акустическая ветвь с дисперсией фононов $\omega_k = sk$, где s - скорость звука.

Вычислить коэффициент теплопроводности металла κ и соответственное время электрон-фононного рассеяния $\tau_{\kappa}(T)$, используя в качестве решения линеаризованного кинетического уравнения приближенную пробную функцию распределения электронов следующего вида:

$$n_p = n_0(\varepsilon_p) + \delta n_p, \quad \delta n_p = n'_0(\varepsilon_p) \Phi_p,$$

где

$$\Phi_p = \Phi_p^{(0)} \tau_{\kappa}(T), \quad \Phi_p^{(0)} = \frac{\varepsilon_p - \mu}{T} (v_p \nabla T).$$

Здесь $n_0(\varepsilon_p)$ - равновесная функция распределения электронов, μ - химический потенциал электронов, $v_p = p/m$ - скорость электронов и T - температура металла.

При решении задачи воспользоваться приближением Блоха, когда пренебрегается возможным отклонением функции распределения фононов N_k от равновесной функции Планка, т. е. эффектом увлечения фононов электронами, который, вообще говоря, существенен в области температур низких по сравнению с температурой Дебая Θ_D . Для интеграла столкновений и матричного элемента электрон-фононного взаимодействия воспользоваться результатами предыдущей задачи.

БРМ-

15. Найти низкотемпературный коэффициент Зеебека S для металла, воспользовавшись моделью свободных электронов с законом дисперсии $\varepsilon_p = p^2/2m$ и предполагая, что фононы в металле представлены только одной акустической ветвью со скоростью звука s и дисперсией $\omega = sk$. При решении задачи воспользоваться законом сохранения суммарного импульса электронной и фононной подсистем и его следствием для следующей комбинации электронного и фононного интегралов столкновений:

$$\int p \text{St}_e[n, N] \frac{2d^3p}{(2\pi\hbar)^3} + \int \hbar k \text{St}_{ph}[N, n] \frac{d^3k}{(2\pi)^3} = 0,$$

где интегрирование ведется по всем импульсам электрона и волновым векторам фонона.

БРМ-16 Рассеяние электронов в магнитной примеси

Для описания процессов рассеяния электронов проводимости в металле с магнитными примесями, имеющими ненулевой спин, часто используется $s-d$ обменная модель. В ней обменное взаимодействие электрона проводимости со всеми спинами магнитных примесей записывается в виде суммы по всем примесям, случайно расположенных в точках $\mathbf{r} = \mathbf{R}_a$,

$$U(\mathbf{r}) = \sum_a u(\mathbf{r} - \mathbf{R}_a) \quad \text{и} \quad u(\mathbf{r}) = J(\boldsymbol{\sigma} \mathbf{S}) \delta(\mathbf{r}).$$

Здесь $\sigma = (\sigma^x, \sigma^y, \sigma^z)$ - матрицы Паули, S_α - оператор спина примеси, расположенной в узле $\mathbf{r} = \mathbf{R}_\alpha$, и J - обменный интеграл, который обычно мал по сравнению с энергией Ферми ε_F , отнесенной к плотности электронов n ($J \ll \varepsilon_F/n$).

Считая спектр электронов, равным $\varepsilon_p = p^2/2m$, а концентрацию магнитных примесей, равной n_i , найти в первом и во втором борновском приближении амплитуду и вероятность рассеяния электронов. Во втором борновском приближении учесть принцип Паули при анализе суммы по промежуточным состояниям в членах второго порядка. Концентрация магнитных примесей мала ($n_i \ll n$) и возможной корреляцией между спинами примесей пренебречь.

Вычислить температурный вклад в электрическое сопротивление металла $\rho(T)$, возникающий от рассеяния электронов проводимости на локализованных магнитных примесях, с точностью до членов J^3 по обменной константе (эффект Кондо).

12.1.5 Задачи на Эффект Кондо

12.1.6 Задачи на Прыжковая проводимость Мотта

БРМ-

17. Внесение примесного атома донорного типа в идеальный чистый полупроводник, например, легирование кремния атомами фосфора, приводит к образованию водородоподобного связанного состояния электрона с радиусом локализации a и энергией ε . Волновая функция такого электронного состояния сосредоточена вблизи примесного атома и экспоненциально спадает при удалении от примесного центра согласно $\psi(r) \sim \exp(-r/a)$. В силу случайного неупорядоченного расположения примесных атомов в кристаллической решетке полупроводника энергия связи электрона с примесным центром имеет, вообще говоря, также случайное значение. При достаточно малой концентрации примесных атомов $na^3 \ll 1$ перекрытие волновых функций электрона, отвечающим разным примесным центрам невелико, и электрон вовлекается в процесс переноса электрического заряда только за счет прыжков (перескоков) с одного примесного центра на другой с изменением энергии электрона, равной разности между энергиями связи на различных центрах. Подобные механизмы переноса заряда в неупорядоченных электронных системах часто называют прыжковой проводимостью. Найти с экспоненциальной точностью низкотемпературную зависимость проводимости $\sigma(T)$ при следующих предположениях: а) существенны прыжки электрона только на примесные центры с энергиями ε_λ , лежащими в достаточно малой окрестности Δ уровня Ферми μ так, что $|\mu - \varepsilon_\lambda| \leq \Delta \ll \mu$. Температура - достаточно низкая, т. е. $\Delta \gg T$, и характерные изменения энергии при перескоках существенно превосходят температуру;

б) считать, что плотность состояний в окрестности Δ уровня Ферми постоянна и равна $g(\mu)$; в) радиус локализации a не зависит от энергии ε_λ ; 2) предполагать наличие теплового равновесия за счет испускания или поглощения фононов, взаимодействие с которыми обеспечивает выполнение закона сохранения энергии при перескоках электрона с одного уровня на другой. Для упрощения считать, что фононы представлены одной акустической ветвью с частотой $\omega_k = sk$, и ограничиться только однофотонными процессами в силу достаточно низкой температуры по сравнению с максимальной энергией фононов $\hbar\omega_D$.

БРМ-

18. В предположениях предыдущей задачи о прыжковом механизме проводимости определить показатель степени p в законе Мотта

$$\rho(T) \sim \exp(T_0/T)^p$$

для сопротивления тонкой пленки (двумерного) легированного полупроводника.

БРМ-

19. В предыдущих двух задачах при рассмотрении прыжкового механизма проводимости в слабо легированном полупроводнике предполагалось, что электроны, локализованные на примесных центрах, не взаимодействуют между собой и плотность электронных состояний $g(\varepsilon)$ постоянна в окрестности уровня Ферми μ . Наличие кулоновского взаимодействия между электронами на разных примесных центрах нарушает это свойство так, что плотность состояний $g(\varepsilon)$ обращается в нуль в точке $\varepsilon = \mu$. Это явление $g(\mu) = 0$, названное кулоновской щелью, существенно влияет на вид температурной зависимости сопротивления легированного полупроводника.

Предполагая, что плотность электронных состояний вблизи уровня Ферми следует закону

$$g(\varepsilon) = g_0 \left(\frac{|\varepsilon - \mu|}{\varepsilon_0} \right)^\beta,$$

где $\beta = 2$ в пространстве $d = 3$ и $\beta = 1$ в пространстве $d = 2$, определить показатель степени p в законе Мотта

$$\rho(T) \sim \exp(T_0/T)^p$$

для электропроводности слабо легированного полупроводника при низких температурах.

12.1.7 Задачи на Кулоновская щель

12.1.8 Задачи на Кинетика фононов в диэлектрике

БРМ-20.

В твердом диэлектрике тепловые колебания атомов кристаллической решетки около положения равновесия могут быть описаны как набор колебательных квантов - фононов, которые в совокупности образуют разреженный газ элементарных возбуждений. В кристалле, в котором элементарная ячейка состоит из ν атомов, полный спектр колебаний насчитывает 3ν ветвей или, соответственно, 3ν типов фононов. Весь спектр подразделяется на три акустические ветви, из которых одна продольная и две поперечные, и на остальные $3(\nu - 1)$ оптические ветви колебаний.

Определить коэффициент теплопроводности κ в диэлектрике, воспользовавшись кинетическим уравнением для функции распределения фононов $N_k(t, r)$ в приближении времени релаксации τ . Для упрощения считать, что диэлектрик обладает кубической симметрией и фононы представлены только одной акустической ветвью с дисперсией $\omega = \omega(k)$.

12.1.9 Задачи на Теплопроводность диэлектрика

12.1.10 Задачи на кинетику нормальной и сверхтекучей жидкости

БРМ-21.

В рамках феноменологического подхода вывести уравнения гидродинамики несверхтекучей изотропной жидкости, воспользовавшись термодинамическими тождествами и уравнениями сохранения массы, импульса, энергии и роста энтропии. Найти диссипативную функцию R и получить уравнение движения вязкой жидкости (уравнение Навье-Стокса).

12.1.11 Задачи на Звуковые колебания и диссипация

БРМ-

22. Пользуясь результатами предыдущей задачи для диссипативной функции R , найти коэффициент поглощения звука $\alpha(\omega)$ с частотой ω в несверхтекучей изотропной жидкости, если известны коэффициенты сдвиговой и объемной вязкости η, ζ , а также коэффициент теплопроводности κ .

БРМ-

23. В рамках феноменологического подхода вывести уравнения двухскоростной гидродинамики сверхтекучей изотропной жидкости без включения в рассмотрение диссипативных эффектов. Применить для вывода законы сохранения массы, импульса, энергии, энтропии и преобразование Галилея.

Воспользоваться следующими представлениями о сверхтекучей жидкости. В сверхтекучей жидкости одновременно возможны два независимых течения. Первое - сверхтекучее течение со скоростью v_s и плотностью сверхтекучей компоненты ρ_s . Второе - нормальное течение со скоростью v_n и плотностью нормальной компоненты ρ_n . Плотности сверхтекучей и нормальной компонент в сумме составляют полную плотность жидкости $\rho = \rho_n + \rho_s$. Кроме того, сверхтекучее течение потенциально $\text{rot } v_s = 0$.

БРМ-

24. В сверхтекучей жидкости возможно существование двух типов звуковых колебаний: первый и второй звуки. Пользуясь найденными в предыдущей задаче гидродинамическими уравнениями сверхтекучей жидкости, найти скорости первого и второго звуков. Для простоты пренебречь отличием коэффициента теплового расширения α_V от нуля и, который при достаточно низких температурах, как правило, пренебрежимо мал.

12.1.12 Задачи на бесстолкновительную плазму

БРМ-25 Пространственно-частотная дисперсия диэлектрической
проницаемости бесстолкновительной плазме

Найти пространственно-частотную дисперсию диэлектрической проницаемости $\varepsilon_{\alpha\beta}(\omega, k)$ в бесстолкновительной изотропной плазме, когда столкновения между частицами плазмы не играют существенной роли. Выделить из диэлектрической проницаемости $\varepsilon_{\alpha\beta}(\omega, k)$ продольную и поперечную компоненты.

При решении воспользоваться кинетическими уравнениями и уравнениями Максвелла. В первом приближении полностью пренебречь движением положительных ионов благодаря сильному неравенству в соотношении между массами иона и электрона $M \gg m$.

Решение (??? честно, пока хз, чет на это нормальных методов пока нету.)

БРМ-

26. Пользуясь результатами предыдущей задачи для диэлектрической проницаемости бесстолкновительной электронной плазмы, найти дебаевский радиус экранирования r_D и частоты собственных продольных и поперечных колебаний плазмы.

БРМ-

27. Найти пространственно-частотную дисперсию диэлектрической проницаемости $\varepsilon(\omega, \mathbf{k})$ тонкой металлической пленки, рассматривая последнюю как двумерный слой бесстолкновительной электронной плазмы. Найти дисперсию $\omega = \omega(k)$ продольных плазменных колебаний (плазмонов).

БРМ-

28. В графене, представляющий собой монослой графита, зависимость энергии электронов от импульса $p = (p_x, p_y)$ описывается безмассовым дираковским спектром $\varepsilon_p = v\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}$, где v — скорость электронов и $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$ — матрицы Паули, и соответственно электронный спектр равен $\varepsilon_p = \pm v|\mathbf{p}|$. Плотность состояний $g(\varepsilon)$ определяется интегралом

$$g(\varepsilon) = \nu \int \frac{d^2p}{(2\pi\hbar)^2} [\delta(\varepsilon - vp) + \delta(\varepsilon + vp)] = \nu \frac{|\varepsilon|}{2\pi\hbar^2 v^2},$$

где $\nu = 2 \times 2$ — кратность вырождения спектра по спину электрона и двум подзонам.

Пользуясь моделью и результатами предыдущей задачи, найти продольную диэлектрическую проницаемость $\varepsilon_l(\omega, k)$ и дисперсию $\omega = \omega(k)$ продольных плазменных колебаний (плазмонов) в графене.

12.1.13 Задачи на Диэлектрическая проницаемость

12.1.14 Задачи на Продольные и поперечные колебания

12.1.15 Задачи на Макроскопическое квантовое туннелирование

БРМ-

29. Частица массой M находится в потенциале $U_0(q)$ и взаимодействует с внешней средой — термостатом, который представляет собой бесконечный набор $\{\alpha\}$ фононов, т. е. осцилляторов с частотами ω_α . Гамильтониан среды — энергия осцилляторов:

$$H_{\text{ср}} = \sum_{\alpha} \left(\frac{m\dot{x}_{\alpha}^2}{2} + \frac{m\omega_{\alpha}^2 x_{\alpha}^2}{2} \right)$$

и каждая из сил, действующих на частицу, пропорциональна отклонению осциллятора x_{α} от положения равновесия $x_{\alpha} = 0$. Потенциал взаимодействия частицы со средой равен

$$U_{\text{вз}} = \sum_{\alpha} qC_{\alpha}x_{\alpha},$$

где C_{α} — константа взаимодействия. Спектральная плотность колебаний фононов вводится согласно

$$J(\Omega) = \frac{\pi}{2} \sum_{\alpha} \frac{C_{\alpha}^2}{m\omega_{\alpha}} \delta(\Omega - \omega_{\alpha}).$$

Предполагая, что в спектре фононов имеются сколь угодно малые частоты и $J(\Omega) = \eta\Omega$ ($\eta > 0$), исключить переменные среды x_{α} и найти эффективное уравнение движения частицы в среде. Также определить коэффициент трения, случайную силу и коррелятор случайной силы. Влиянием частицы на среду пренебречь и считать, что среда все время находится в термодинамическом равновесии при температуре T .

БРМ-

30. Частица массой M находится в потенциале $U_0(q)$ и взаимодействует с внешней средой - термостатом, который представляет собой бесконечный набор $\{\alpha\}$ фононов, т. е. осцилляторов с частотами ω_α . Гамильтониан среды - энергия осцилляторов:

$$H_{\text{вз}} = \sum_{\alpha} \left(\frac{m\dot{x}_{\alpha}^2}{2} + \frac{m\omega_{\alpha}^2 x_{\alpha}^2}{2} \right).$$

Потенциал взаимодействия частицы со средой, вообще говоря, нелинейный и равен

$$U_{\text{вз}} = \sum_{\alpha} \gamma(q) C_{\alpha} x_{\alpha},$$

где C_{α} - константа взаимодействия. Спектральная плотность колебаний в среде определена как

$$J(\Omega) = \frac{\pi}{2} \sum_{\alpha} \frac{C_{\alpha}^2}{m\omega_{\alpha}} \delta(\Omega - \omega_{\alpha}).$$

Предполагая $J(\Omega) = \eta\Omega$ ($\eta > 0$), исключить переменные среды x_{α} и найти эффективное уравнение движения частицы в среде. Также определить перенормировку потенциала $U_0(q)$ и коэффициент трения $\mu(q)$. Эта задача является обобщением предыдущей задачи на случай нелинейного взаимодействия между частицей и средой.

БРМ-

31. Преодоление частицей потенциального барьера (рис. 2.1), отделяющего метастабильное состояние с локальным минимумом энергии от состояния с более низкой энергией, при низких температурах происходит с помощью квантового туннелирования, а при высоких температурах барьер преодолевается классически, термоактивационным способом. Пусть потенциальный барьер удовлетворяет условию квазиклассичности и вероятность туннелирования из потенциальной ямы настолько мала, что частица успевает прийти в термодинамическое равновесие, определяемое температурой T , пока она находится в классически доступной области потенциала. Рис. 2.1. Потенциальный рельеф. Найдите зависимость скорости распада $\Gamma = \Gamma(T)$ метастабильного состояния с экспоненциальной точностью. Выразить ответ через экстремаль для движения частицы в инвертированном потенциале $\tilde{U}(q) = -U(q)$ на оси мнимого времени τ . Определить температуру перехода T_q от квантового режима распада метастабильного состояния к классическому термоактивационному режиму. Масса частицы равна M .

БРМ-

32. Движение частицы в результате ее взаимодействия с диссипативной внешней средой подчиняется уравнению

$$M\ddot{q} + \mu(q)\dot{q} + U'(q) = f(t)$$

с силой трения, пропорциональной скорости частицы \dot{q} , и коэффициентом трения $\mu(q)$. Частица находится в метастабильном состоянии, отделенном от основного состояния с меньшей энергией потенциальным барьером. Сила трения влияет на вероятность туннелирования через потенциальный барьер и на скорость распада метастабильного состояния. Внешнюю диссипативную среду можно промоделировать бесконечным набором фононов $\{\alpha\}$, т. е. осцилляторов с частотами ω_{α} , и описать гамильтонианом

$$H_{\text{ср}} = \sum_{\alpha} \left(\frac{m\dot{x}_{\alpha}^2}{2} + \frac{m\omega_{\alpha}^2 x_{\alpha}^2}{2} \right)$$

Частица массой M находится в потенциале $U_0(q)$ и взаимодействует со средой, согласно

$$U_{\text{вз}} = \sum_{\alpha} \gamma(q) C_{\alpha} x_{\alpha}$$

где C_{α} - константа взаимодействия. Спектральная плотность колебаний вводится соотношением

$$J(\Omega) = \frac{\pi}{2} \sum_{\alpha} \frac{C_{\alpha}^2}{m\omega_{\alpha}} \delta(\Omega - \omega_{\alpha}) = \eta\Omega \quad (\eta > 0).$$

Пусть частица находится в потенциальной яме в метастабильном состоянии, которое отделено от основного состояния потенциальным барьером. Известно, что сила трения влияет на вероятность туннелирования через потенциальный барьер и, соответственно, на

скорость распада метастабильного состояния. Туннелирование в условиях, когда в физической системе присутствует диссипация энергии, называется макроскопическим квантовым туннелированием.

Пользуясь результатами предыдущих задач и представлениями о квантовом туннелировании как о движении частицы в мнимом времени τ , определить эффективное действие $S_{\text{eff}}[q(\tau)]$ и найти с экспоненциальной точностью вероятность распада метастабильного состояния $\Gamma(T)$ в диссипативной среде. Оценить температуру T_q перехода с классического термоактивационного режима распада на квантовый режим. Потенциальный барьер удовлетворяет условию квазиклассичности и вероятность туннелирования из потенциальной ямы настолько мала, что частица в яме находится в термодинамическом равновесии со средой при температуре T .

БРМ-

33. Частица массой M находится в потенциальной яме, образованной кубической параболой

$$U(q) = \frac{1}{2} M \omega^2 q^2 \left(1 - \frac{q}{q_c}\right).$$

Коэффициент трения μ очень велик, так что $\mu \gg M\omega$, и силы трения много больше сил инерции. Движение частицы в классически доступной области представляет собой аperiodическое затухание, отвечающее уравнению

$$\mu \dot{q} + U'(q) = 0.$$

Найти с экспоненциальной точностью скорость распада метастабильного состояния $\Gamma(T)$ в зависимости от температуры.

12.1.16 Задачи о зародышах

БРМ-34. Зародыши (?)

Фазовый переход первого рода в конденсированной среде происходит путем возникновения зародышей стабильной фазы в метастабильной среде. Энергетически невыгодный эффект возникновения границы раздела между фазами компенсируется выигрышем в объемной энергии при достаточно большом размере зародыша. В результате тепловых гетерофазных флуктуаций возникает критический зародыш, который способен преодолеть потенциальный барьер.

Вблизи абсолютного нуля температур классический термоактивационный механизм не эффективен и распад метастабильной конденсированной среды обусловлен квантовыми гетерофазными флуктуациями, т. е. туннельным механизмом преодоления зародышем новой фазы потенциального барьера, отделяющего стабильное состояние системы от метастабильного. Квантовые явления, сопровождающие такой распад метастабильной конденсированной среды, получили название макроскопической квантовой нуклеации.

Физические системы, в которых существуют фазовые переходы первого рода и при нуле температуры, - это прежде всего гелиевые системы, в которых наблюдаются явления кристаллизации передавленного жидкого гелия, кавитации газовых пузырьков в жидкой фазе при отрицательных давлениях, фазового расслоения пересыщенных растворов изотопов гелия $^3\text{He} - ^4\text{He}$. Есть и более экзотические примеры такие как коллапс метастабильного конденсата в бозе-газе с притяжением или фазовый переход типа деконфайнмента с образованием кваркового вещества из ядерной материи в коре нейтронных звезд.

Итак, пусть в метастабильной жидкости плотностью ρ образуется сферический зародыш новой фазы радиусом R и плотностью $\rho' = \rho + \Delta\rho$ с энергией

$$U(R) = 4\pi\sigma R^2 - \frac{4\pi R^3}{3} \rho' \Delta\mu = 4\pi\sigma R^2 \left(1 - \frac{R}{R_c}\right),$$

где σ — поверхностное натяжение, $\Delta\mu > 0$ — разность термодинамических потенциалов, ответственная за степень неравновесности метастабильной фазы, и $R_c \sim 1/\Delta\mu$ — критический радиус зародыша. Определить кинетическую энергию зародыша $K(R, \dot{R})$, его эффективную массу $M(R)$ и найти с экспоненциальной точностью зависимость скорости распада метастабильной фазы $\Gamma(T) \sim \exp(-A)$ от ее температуры T . При решении воспользоваться приближениями макроскопического зародыша, его квазистационарного роста и бездиссипативной среды.

а) Считать, что метастабильная и стабильная фазы находятся достаточно близко к фазовому равновесию $\Delta\mu = 0$ и критический радиус зародыша R_c много больше межатомных расстояний, так что критический зародыш содержит большое число частиц, являясь макроскопическим образованием.

б) Считать жидкую фазу несжимаемой $\rho = \text{const}$, что оправдано при скоростях роста зародыша $\dot{R}(t)$ малых по сравнению со скоростью звука.

в) Пренебречь диссипативными процессами вязкости и теплопроводности, возникающими при росте зародыша новой фазы.

Решение (???)

БРМ-35.

В предыдущей задаче, посвященной явлению макроскопической квантовой нуклеации в фазовых переходах первого рода, в примере о распаде метастабильной жидкости одно из упрощающих приближений было предположение о бездиссипативном характере роста зародыша новой стабильной фазы. В этом приближении полная энергия зародыша $E = K + U$, представляющая собой сумму кинетической $K(R, \dot{R})$ и потенциальной $U(R)$ энергий, сохраняется. Вообще говоря, это не так и рост зародыша новой фазы сопровождается диссипацией его энергии, связанной с наличием вязкости (внутреннего трения) и теплопроводности в метастабильной среде. Вязкость (внутреннее трение) возникает в результате неоднородного распределения скорости жидкости вокруг зародыша, а теплопроводность вследствие выделения или поглощения скрытой теплоты фазового перехода $L(T)$ на границе зародыша.

Рассмотреть влияние вязкости и теплопроводности на рост сферического зародыша, предполагая выполненными приближения макроскопичности и квазистационарного (медленного) роста зародыша. Найти уравнение роста зародыша и определить влияние вязкости и теплопроводности на температурное поведение вероятности распада метастабильного состояния жидкости $\Gamma(T)$. Рассмотреть два режима роста:

а) гидродинамический, когда критический радиус зародыша R_c много больше длины свободного пробега $l(T)$ возбуждений в среде;

б) баллистический, когда критический радиус зародыша R_c много меньше длины свободного пробега $l(T)$ возбуждений. Коэффициенты вязкости и теплопроводности равны $\eta(T)$ и $\kappa(T)$, соответственно.

12.1.17 Задачи на кинетику нейтронов**Колоколов-6. Замедление нейтронов**

Найти стационарное пространственное распределение в зависимости от энергии для точечного источника моноэнергетических нейтронов, замедляющихся в среде в результате упругого рассеяния на ядрах массой $A \gg 1$, считая сечение рассеяния не зависящим от энергии нейтрона.

Качественное рассмотрение. При рассеянии легкой частицы массой m (нейтрона), движущейся со скоростью v , на неподвижной частице массой $M \approx Am$, переданный импульс меняется от нулевого до максимального $\Delta P \approx 2mv$, так что теряемая энергия $\Delta \varepsilon \approx (\Delta P)^2/2M \sim (m/M)\varepsilon$. Тогда для того, чтобы замедлиться от энергии ε_0 до ε , нейтрону потребуется испытать число соударений N , определяемое из соотношения $(1 - m/M)^N \sim \varepsilon/\varepsilon_0$, т. е. $N \sim (M/m) \ln(\varepsilon_0/\varepsilon)$.

Если длина свободного пробега равна λ , то вероятность $P(r)$ оказаться на расстоянии r за N шагов длиной λ в результате случайного блуждания пропорциональна

$$P(r) \sim \exp\left(-\frac{3r^2}{2N\lambda^2}\right) = \exp\left(-\frac{3r^2}{2\lambda^2(M/m) \ln(\varepsilon_0/\varepsilon)}\right).$$

Эта же величина определяет и распределение числа нейтронов по энергии с точностью до предэкспоненциального множителя.

Описание замедления нейтронов с помощью уравнения Фоккера - Планка. Для количественного описания процесса замедления нейтронов рассмотрим кинетическое уравнение для функции распределения нейтронов $f(\vec{r}, \vec{p})$ по импульсам \vec{p} и координатам \vec{r} в стационарном случае при отсутствии внешних полей:

$$\vec{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} = \int d^3 \vec{p}_1 [w(\vec{p}, \vec{p}_1) f(\vec{p}_1) - w(\vec{p}_1, \vec{p}) f(\vec{p})],$$

где $w(\vec{p}_1, \vec{p}) d^3 \vec{p}_1$ - вероятность рассеяния в единицу времени нейтрона из состояния с импульсом \vec{p} в состояние с импульсом \vec{p}_1 в интервале $d^3 \vec{p}_1$.

При рассеянии нейтронов на тяжелых ядрах с массой $M \gg m$ относительное изменение энергии нейтрона мало, и если им вовсе пренебречь, то в правой части в интеграле столкновений надо положить $|\vec{p}_1| = |\vec{p}|$. В этом случае вероятность рассеяния $w(\vec{p}_1, \vec{p})$ симметрична относительно перестановки импульсов и интеграл столкновений I_0 принимает вид

$$I_0[f] = \int d^3 \vec{p}_1 w(\vec{p}_1, \vec{p}) [f(\vec{p}_1) - f(\vec{p})]$$

Ищем решение кинетического уравнения в виде

$$f(\vec{r}, \vec{p}) = f_0(\vec{r}, |\vec{p}|) + g(\vec{r}, \vec{p}),$$

где f_0 зависит лишь от модуля импульса, и, следовательно, $I_0[f_0] = 0$, а g является малой поправкой. Получающемуся кинетическому уравнению

$$\vec{v} \cdot \frac{\partial f_0}{\partial \vec{r}} = \int d^3 \vec{p}_1 w(\vec{p}_1, \vec{p}) [g(\vec{p}_1) - g(\vec{p})]$$

удовлетворяет функция

$$g(\vec{r}, \vec{p}) = -\vec{v} \cdot \frac{\partial f_0}{\partial \vec{r}} \tau(|\vec{p}|),$$

где

$$\tau^{-1}(|\vec{p}|) = \int d^3 \vec{p}_1 w(\vec{p}_1, \vec{p}) [1 - \cos \theta],$$

а θ - угол между импульсами \vec{p} и \vec{p}_1 . По порядку величины τ - время свободного пробега нейтрона между столкновениями.

Поскольку нас интересует функция распределения нейтронов $f(\vec{r}, \varepsilon)$ по энергиям ε и координатам \vec{r} , в кинетическом уравнении (661) нужно усреднить функцию $f(\vec{r}, \vec{p})$ по всем направлениям импульсов:

$$f(\vec{r}, \varepsilon) = \langle f(\vec{r}, \vec{p}) \rangle = \int \frac{d\Omega_p}{4\pi} f(\vec{r}, \vec{p}).$$

Тогда при усреднении в левой части кинетического уравнения от члена $\langle \vec{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} \rangle$ останется лишь вклад от g : $\langle \vec{v} \cdot \frac{\partial g}{\partial \vec{r}} \rangle = \langle \vec{v} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{r}} (-\tau \vec{v} \cdot \frac{\partial f_0}{\partial \vec{r}}) \rangle = -\tau v^2 \frac{\partial^2 f_0}{\partial r_i \partial r_j} \int \frac{d\Omega_p}{4\pi} \frac{p_i p_j}{p^2} = -\frac{\tau v^2}{3} \frac{\partial^2 f_0}{\partial r^2}$. (668) Представив вероятность перехода в единицу времени $w(\vec{p}_1, \vec{p}) d^3 \vec{p}_1 = v N d\sigma$, где N - плотность числа рассеивающих нейтроны ядер, $d\sigma$ - дифференциальное сечение рассеяния, выражение для τ можно переписать в виде

$$\tau^{-1}(|\vec{p}|) = \int d^3 \vec{p}_1 w(\vec{p}_1, \vec{p}) [1 - \cos \theta] = \int v N d\sigma [1 - \cos \theta] = v N \sigma_{tr} \equiv \frac{v}{\lambda},$$

где величину $\sigma_{tr} \equiv \int d\sigma [1 - \cos \theta]$ называют транспортным сечением столкновений, а $\lambda \equiv 1/N\sigma_{tr}$ - длина свободного пробега нейтрона. Тогда коэффициент диффузии нейтронов D равен $\tau v^2/3 = \lambda v/3$.

Учтем теперь в интеграле столкновений небольшое изменение энергии нейтрона при рассеянии на тяжелых ядрах ($\Delta\varepsilon/\varepsilon \sim m/M$). Для этого выделим явно из вероятности перехода $w(\vec{p}_1, \vec{p})$ дельтафункцию, учитывающую законы сохранения энергии и импульса при упругом рассеянии нейтрона на ядрах:

$$w(\vec{p}_1, \vec{p}) = W \delta(\varepsilon - \varepsilon' - \Delta), \quad w(\vec{p}, \vec{p}_1) = W \delta(\varepsilon - \varepsilon' + \Delta),$$

где $\Delta = (\vec{p} - \vec{p}_1)^2/2M$ - энергия отдачи ядра при рассеянии нейтрона, а W зависит от $|\vec{p}|, |\vec{p}_1|$ и θ - угла между импульсами и симметрична относительно перестановки \vec{p} и \vec{p}_1 . (Например, по теории возмущений

$$dw(\vec{p}_1, \vec{p}) = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle \vec{p}_1 | \hat{V} | \vec{p} \rangle \right|^2 \delta(\varepsilon_i - \varepsilon_f) d^3 \vec{p}_1,$$

где \hat{V} - рассеивающий потенциал ядра, $\varepsilon_i, \varepsilon_f$ - начальная и конечная энергия системы "нейтрон + ядро".)

Тогда часть интеграла столкновений I_1 , связанная с изменением энергии нейтрона при рассеянии, есть

$$I_1 = \int d^3 \vec{p}_1 W [-f_0(\varepsilon) \delta(\varepsilon - \varepsilon' - \Delta) + f_0(\varepsilon') \delta(\varepsilon - \varepsilon' + \Delta)]$$

Здесь в функции распределения взят только основной вклад f_0 . Разлагая выражение в квадратных скобках по малому параметру Δ , получаем

$$I_1 = \int d^3 \vec{p}_1 W \Delta \left[2f_0(\varepsilon) \delta'(\varepsilon - \varepsilon') + \frac{\partial f_0(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \delta(\varepsilon - \varepsilon') \right].$$

Первый член запишем как

$$\begin{aligned} 2f_0 \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \int d^3 \vec{p}_1 W \Delta \delta(\varepsilon - \varepsilon') - 2f_0 \int d^3 \vec{p}_1 W \delta(\varepsilon - \varepsilon') \frac{\partial \Delta}{\partial \varepsilon} = \\ = 2f_0 \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \left[\frac{2m\varepsilon v}{M} \frac{1}{\lambda} \right] - 2f_0 \frac{m}{M} \frac{v}{\lambda} = \frac{4f_0 m v}{M \lambda}, \end{aligned}$$

где использовано $v = \sqrt{2\varepsilon/m}$ и

$$\delta(\varepsilon - \varepsilon') \Delta = \delta(\varepsilon - \varepsilon') \frac{2m\varepsilon}{M} (1 - \cos \theta), \quad \delta(\varepsilon - \varepsilon') \frac{\partial \Delta}{\partial \varepsilon} = \delta(\varepsilon - \varepsilon') \frac{m}{M} (1 - \cos \theta).$$

Второй член в I_1 дает вклад

$$\frac{\partial f_0(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \int d^3 \vec{p}_1 W \Delta \delta(\varepsilon - \varepsilon') = \frac{\partial f_0(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \frac{2m\varepsilon v}{M \lambda}.$$

Суммируя вклады, получаем

$$I_1 = \frac{2m}{M\lambda} \left(2f_0 v + v\varepsilon \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) = \frac{2\sqrt{2m}}{M\lambda} \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} \frac{\partial}{\partial \varepsilon} (f_0 \varepsilon^2).$$

Более общий способ приведения интеграла столкновений к дивергентному виду приведен в приложении. Для стационарного распределения, с учетом $\lambda = \text{Const}$, $v = \sqrt{2\varepsilon/m}$, получаем

$$-\frac{\lambda}{3} \sqrt{\frac{2\varepsilon}{m}} \frac{\partial^2 f_0}{\partial r^2} = \frac{2\sqrt{2m}}{M\lambda} \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} \frac{\partial}{\partial \varepsilon} (f_0 \varepsilon^2)$$

После умножения этого уравнения на $\varepsilon^{3/2}$, имеем

$$-\frac{\lambda^2}{6} \frac{M}{m} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (\varepsilon^2 f) = \varepsilon \frac{\partial}{\partial \varepsilon} (\varepsilon^2 f)$$

Вводя обозначения

$$q \equiv \varepsilon^2 f, \quad \tau \equiv \frac{\lambda^2}{6} \frac{M}{m} \ln \frac{\varepsilon_0}{\varepsilon},$$

где ε_0 - начальная энергия нейтрона, так что значение $\varepsilon = \varepsilon_0$ соответствует $\tau = 0$, получаем окончательно уравнение типа теплопроводности:

$$\frac{\partial q}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 q}{\partial r^2}$$

Начальному условию при $\tau = 0$ (т. е. $\varepsilon = \varepsilon_0$) $f(\varepsilon_0, r) \sim \delta(r)$ - точечный источник моноэнергетических нейтронов в начале координат - соответствует решение

$$q = A \exp\left(-\frac{r^2}{4\tau}\right)$$

Возвращаясь к исходным обозначениям, имеем

$$f(\varepsilon, r) = \frac{A}{\varepsilon^2} \exp\left[-\frac{3r^2}{2\lambda^2(M/m) \ln(\varepsilon_0/\varepsilon)}\right].$$

Из этого выражения следует, что вероятность найти нейтрон с энергией ε заметно отлична от нуля на расстояниях, не превышающих

$$r_\varepsilon \sim \lambda \sqrt{\frac{M}{m} \ln(\varepsilon_0/\varepsilon)}$$

Вблизи начала координат плотность потока нейтронов в единичном энергетическом интервале $\Phi(\varepsilon)$, равная произведению скорости на плотность числа нейтронов, есть

$$\Phi(\varepsilon) = f(\varepsilon) \rho(\varepsilon) v \sim \frac{1}{\varepsilon^2} \sqrt{\varepsilon} \sqrt{\varepsilon} \sim \frac{1}{\varepsilon},$$

что выражает хорошо известный "закон" Ферми. Естественно, что гауссово распределение устанавливается на расстоянии от источника $r > \lambda$. Однако оно нарушается и на достаточно больших расстояниях, так как там доминируют нейтроны, пролетевшие расстояние r без столкновений, поскольку вероятность этого пропорциональна $\exp(-r/\lambda)$ и спадает гораздо медленнее гауссового распределения. Приравнявая показатели экспонент для этих двух распределений, получаем оценку максимального расстояния от источника, где еще применимо диффузионное приближение

$$r_{\max} \sim \lambda \frac{M}{m} \ln(\varepsilon_0/\varepsilon).$$

Отметим, что $r_{\max} \gg r_\varepsilon$ для $M \gg m, \varepsilon_0 \gg \varepsilon$.

12.1.18 Задачи на Элементы диаграммной техники Келдыша для неравновесных систем

БРМ-36.

Одним из систематических методов нахождения квантового кинетического уравнения является использование контура Келдыш из точки $t_0 = -\infty + i\beta$, где $\beta = 1/T$ — обратная температура, и заканчивающийся в точке $t_1 = -\infty$, можно схематически изобразить в виде последовательности трех линий $C = C_\tau + C_- + C_+$ (рис. 2.2). Линия C_τ выходит из точки $t_0 = -\infty + i\beta$ и приходит в точку $-\infty + i\delta$, из которой начинается линия C_- , идущая вдоль действительной оси времени t и приходящая в точку $t = +\infty$. Далее контур поворачивает в обратном направлении к конечной точке $t_1 = -\infty$ и проходит под 2.13. Элементы диаграммной техники Келдыша для неравновесных систем 33 действительной осью времени t , образуя часть C_+ общего контура C . На контуре Келдыша C вводится упорядочение по времени, показанное стрелками на рис. 2.2, т. е. момент времени t на части контура C_- всегда раньше момента времени t' на части контура C_+ . (В этой и последующих задачах мы подразумеваем систему единиц, в которой постоянная Планка равна единице $\hbar = 1$.)

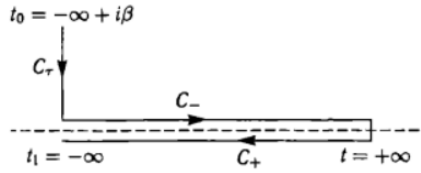


Figure 3

а) Найти для электрона, энергия которого $\varepsilon = \varepsilon_p - \mu$, функцию Грина $G(t, t')$, удовлетворяющую уравнению

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t} - \varepsilon\right) G(t, t') = \delta(t - t')$$

где время t и t' меняется вдоль контура Келдыша C . Функция Грина электрона, как частицы отвечающей ферми-статистике, подчиняется условию антипериодичности

$$G(t_1, t) = -G(t_0, t).$$

б) Отдельно рассмотреть значения функции Грина $G(t, t')$, когда моменты времени t и t' лежат на одинаковых и разных частях контура Келдыша C

БРМ-37.

Функция Грина $G(t, t')$ бозе-частицы с энергией $\varepsilon = \varepsilon_p - \mu$ на контуре Келдыша C подчиняется тому же уравнению, что и функция Грина электрона

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t} - \varepsilon\right) G(t, t') = \delta(t - t').$$

Время t и t' меняется вдоль контура Келдыша C . Отличие бозевской статистики от статистики Ферми состоит только в условии периодичности. Для бозевских частиц накладывается следующее граничное условие

$$G(t_1, t) = +G(t_0, t).$$

Найти функцию Грина бозе-частицы $G(t, t')$ на контуре Келдыша C и ее значения, когда моменты времени t и t' лежат на одинаковых и разных частях контура C .

БРМ-

38. Контурная функция Грина \widehat{G} в пространстве Келдыша может быть реализована в виде матрицы 2×2 :

$$\widehat{G} = \begin{pmatrix} G^{--} & G^{-+} \\ G^{+-} & G^{++} \end{pmatrix}.$$

Компоненты матрицы не являются линейно независимыми и связаны с запаздывающей G^R , опережающей G^A и аномальной G^K функциями Грина следующими тождествами:

$$G^R = G^{--} - G^{-+} = G^{+-} - G^{++},$$

$$G^A = G^{--} - G^{+-} = G^{-+} - G^{++},$$

$$G^K = G^{-+} + G^{+-} = G^{--} + G^{++}.$$

С помощью преобразования поворота R в пространстве Келдыша можно привести контурную функцию Грина \widehat{G} к треугольному виду - антидиагональному

$$R^{-1}\widehat{G}R \rightarrow \widehat{G} = \begin{pmatrix} 0 & G^A \\ G^R & G^K \end{pmatrix}$$

или, дополняя вращение R матрицей отражения P , можно привести к диагональному виду Ларкина-Овчинникова

$$R^{-1}P\widehat{G}R \rightarrow \widehat{G} = \begin{pmatrix} G^R & G^K \\ 0 & G^A \end{pmatrix}.$$

Найти матрицы преобразования R и P .

БРМ-

39. Функция Грина $D_{\omega_0}(t, t')$ фононов с дисперсией $\omega_0 = \omega_0(k)$, где k — волновой вектор, удовлетворяет уравнению

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \omega_0^2(k)\right) D_{\omega_0}(t, t') = \omega_0^2(k) \delta(t - t').$$

Время t и t' изменяются вдоль контура Келдыша C (рис. 2.2). Фононы как бесспиновые частицы подчиняются статистике Бозе и на функцию Грина $D_{\omega_0}(t, t')$ накладывается условие периодичности

$$D_{\omega_0}(t_0, t') = D_{\omega_0}(t_1, t'),$$

которое выполняется тождественно при произвольной зависимости от фононной частоты $\omega_0 = \omega_0(k)$ и связывает значения функции Грина в начальной t_0 и конечной t_1 точках контура Келдыша C .

Найти функцию Грина фононов $D_{\omega_0}(t, t')$ на контуре Келдыша C . 2.13. Элементы диаграммной техники Келдыша для неравновесных систем **V**³⁵

БРМ-

40. Во внешнем поле потенциала $U(t)$ функция Грина $G(t, t')$ электрона, энергия которого ξ , удовлетворяет следующему уравнению:

$$\left(i\frac{\partial}{\partial t} - \xi - U(t)\right) G(t, t') = \delta(t - t'),$$

где оба момента времени t и t' лежат на контуре Келдыша C (рис. 2.2). а) Найти поправку первого порядка $\delta G(t, t')$ по возмущающему потенциалу $U(t)$ к функции Грина свободного электрона $G_0(t, t') = G_0(t - t')$

б) Определить возмущение распределения плотности электронов $\delta n(t)$ под действием потенциала $U(t)$, используя соотношение

$$n(t) = -2iG^{-+}(t, t),$$

которое связывает распределение плотности частиц $n(t)$ с компонентой функции Грина $G^{-+}(t, t')$. Коэффициент 2 учитывает наличие спина у электрона.

Разложить возмущение $\delta n(t)$ в интеграл Фурье по частоте ω и, получив соотношение $\delta n(\omega) = \chi(\omega)U(\omega)$, выразить восприимчивость или функцию линейного отклика $\chi(\omega)$ через запаздывающую G_0^R и опережающую G_0^A функции Грина, предполагая тепловое равновесие электронов с температурой T .

Записать выражение для мацубаровской восприимчивости $\chi^M(\omega_n) = \chi(\omega = i\omega_n)$ на четных мацубаровских частотах $\omega_n = 2\pi nT$ ($n = 0, \pm 1, \pm 2 \dots$), используя мацубаровские частотные функции Грина $\mathfrak{b}(\varepsilon_k)$, которые для фермионов определены на нечетных мацубаровских частотах $\varepsilon_k = \pi T(2k + 1)$

12.2 Задачи на кинетику других систем

12.2.1 Задачи про синхронизацию

Белан-л10.31. В Курамото r от K при а) $K - K_c \ll K_c$, б) $K \gg K_c$

Для модели Курамото найдите амплитуду параметра порядка r как функцию от константы взаимодействия K в предположении а) $K - K_c \ll K_c$, б) $K \gg K_c$.

Решение а) Уравнение самосогласования в первом порядке и дает ответ.
При $K - K_c \ll K_c$ из

$$\frac{\pi}{2} g(\Omega_0) K + \frac{\pi}{16} g''(\Omega_0) K^3 r^2 = 1$$

находим

$$r \approx \frac{4}{\pi} \frac{\sqrt{K - K_c}}{\sqrt{|g''(\Omega_0)| K_c^2}}.$$

Решение б) Уравнение самосогласования после каких-то преобразований (????? чет за пару минут и не понял, какие они?) дает ответ.

При $K \gg K_c$ из

$$K \int_{-\pi/2}^{+\pi/2} d\theta \cos^2 \theta g(\Omega_0 + K r \sin \theta) = 1$$

имеем

$$K \int_{-\pi/2}^{+\pi/2} d\theta (1 - \theta^2) g(\Omega_0 + K r \theta) \approx 1$$

$$\frac{1}{r} \int_{-\pi K r/2}^{+\pi K r/2} d\omega \left(1 - \frac{\omega^2}{K^2 r^2}\right) g(\Omega_0 + \omega) \approx 1$$

$$\frac{1}{r} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega g(\Omega_0 + \omega) - \frac{1}{K^2 r^3} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \omega^2 g(\Omega_0 + \omega) \approx 1$$

$$\frac{1}{r} - \frac{\sigma_\Omega^2}{K^2 r^3} \approx 1$$

Так как в рассматриваемом пределе $r = 1 - \delta$, где $\delta \ll 1$, то

$$1 + \delta - \frac{\sigma_\Omega^2}{K^2} (1 + 3\delta) \approx 1$$

$$\delta \approx \frac{\sigma_\Omega^2}{K^2}$$

Итак

$$r \approx 1 - \frac{\sigma_\Omega^2}{K^2}$$

Белан-л10.32. В Курамото r от K при $g(\Omega) = \frac{\gamma}{\pi(\gamma^2 + (\Omega - \Omega_0)^2)}$

В модели Курамото найдите амплитуду параметра порядка как функцию от константы взаимодействия, если $g(\Omega) = \frac{\gamma}{\pi(\gamma^2 + (\Omega - \Omega_0)^2)}$.

Белан-л10.33. K_c в Сакагучи-Курамото, если $g(\Omega) = \frac{\gamma}{\pi(\gamma^2 + (\Omega - \Omega_0)^2)}$

В модели Сакагучи-Курамото определите критическую константу взаимодействия K_c , если $g(\Omega) = \frac{\gamma}{\pi(\gamma^2 + (\Omega - \Omega_0)^2)}$

Белан-л10.34.

В модели Сакагучи-Курамото определите зависимость параметра порядка $r(K)$ от константы взаимодействия чуть выше точки перехода K_c , если собственные частоты всех осцилляторов одинаковы.

Решение задачи 4 Если $K \gg D$, то фазы соседних осцилляторов близки друг у другу, так что можно перейти к континуальному пределу

$$\partial_t \theta(n, t) = K \partial_n^2 \theta(n, t) + \xi(n, t)$$

где

$$\langle \xi(n, t) \rangle = 0, \quad \langle \xi(n, t_1) \xi(m, t_2) \rangle = 2D \delta(n - m) \delta(t_1 - t_2).$$

Выполним преобразование Фурье по координате и времени

$$\theta(n, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} dq d\omega e^{iqn - i\omega t} \tilde{\theta}(q, \omega)$$

где

$$\tilde{\theta}(q, \omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dn dt}{(2\pi)^2} e^{-iqn + i\omega t} \theta(n, t).$$

На Фурье-компоненты получаем алгебраическое уравнение

$$-i\omega \tilde{\theta}(q, \omega) = -Kq^2 \tilde{\theta}(q, \omega) + \tilde{\xi}(q, \omega)$$

решение которого имеет вид

$$\tilde{\theta}(q, \omega) = \frac{\tilde{\xi}(q, \omega)}{Kq^2 + i\omega}$$

Подставляем в (52)

$$\theta(n, t) = \int dq d\omega e^{iqn - i\omega t} \frac{\tilde{\xi}(q, \omega)}{Kq^2 + i\omega}$$

Тогда разность фаз равна

$$\theta(n, t) - \theta(m, t) = \int dq d\omega e^{-i\omega t} (e^{iqn} - e^{iqm}) \frac{\tilde{\xi}(q, \omega)}{Kq^2 + i\omega}$$

Белан-л10.35.

Рассмотрим модель Сакагучи-Курамото, где все осцилляторы имеют одинаковые частоты. Покажите, что состояние с равномерным распределением осцилляторов по фазе линейно неустойчиво к малым возмущениям при $K > K_c$.

Белан-л10.36. Коррелятор двух Сакагуч-Курамото

Рассмотрим неограниченно большой ансамбль фазовых осцилляторов, собственная частота каждого из которых равна Ω_0 . Осцилляторы расположены в узлах линейной решетки и взаимодействуют только со своими ближайшими соседями. Эволюция фазы n -го осциллятора подчиняется уравнению

$$\dot{\theta}_n = \Omega_0 + K \sin(\theta_{n+1} - \theta_n) + K \sin(\theta_{n-1} - \theta_n) + \xi_n(t)$$

где $K > 0$ - константа взаимодействия, $\xi_n(t)$ - гауссов белый шум с нулевым первым моментом $\langle \xi_n(t) \rangle = 0$ и парным коррелятором $\langle \xi_n(t_1) \xi_m(t_2) \rangle = 2D \delta_{nm} \delta(t_1 - t_2)$. Предполагая, что $K \gg D$, вычислите статистически-стационарную корреляционную функцию $\langle (\theta_n(t) - \theta_m(t))^2 \rangle$.

Решение задачи 6 Вычисляем среднеквадратичное значение

$$\begin{aligned} \langle (\theta(n, t) - \theta(m, t))^2 \rangle &= \int dq_1 dq_2 d\omega_1 d\omega_2 e^{-i(\omega_1 + \omega_2)t} (e^{iq_1 n} - e^{iq_1 m}) (e^{iq_2 n} - e^{iq_2 m}) \frac{\langle \tilde{\xi}(q_1, \omega_1) \tilde{\xi}(q_2, \omega_2) \rangle}{(Kq_1^2 + i\omega_1)(Kq_2^2 + i\omega_2)} = \\ &= \int dq_1 dq_2 d\omega_1 d\omega_2 e^{-i(\omega_1 + \omega_2)t} (e^{iq_1 n} - e^{iq_1 m}) (e^{iq_2 n} - e^{iq_2 m}) \frac{2D \delta(q_1 + q_2) \delta(\omega_1 + \omega_2)}{(Kq_1^2 + i\omega_1)(Kq_2^2 + i\omega_2)} = \\ &= 8D \int \frac{dq d\omega}{K^2 q^4 + \omega^2} \sin^2 \left[\frac{q(n-m)}{2} \right] = \\ &= \frac{8\pi D}{K} \int \frac{dq}{q^2} \sin^2 \left[\frac{q(n-m)}{2} \right] = \\ &= \frac{4\pi D}{K} |n-m| \int \frac{dx}{x^2} \sin^2 x = \\ &= \frac{4\pi^2 D}{K} |n-m| \end{aligned}$$

где мы учли, что

$$\begin{aligned} \langle \tilde{\xi}(q_1, \omega_1) \tilde{\xi}(q_2, \omega_2) \rangle &= \int \frac{dn_1 dn_2 dt_1 dt_2}{(2\pi)^4} e^{-iq_1 n_1 + i\omega_1 t_1} e^{-iq_2 n_2 + i\omega_2 t_2} \langle \xi(n_1, t_1) \xi(n_2, t_2) \rangle = \\ &= 2D \int \frac{dn dt}{(2\pi)^2} e^{-i(q_1 + q_2)n + i(\omega_1 + \omega_2)t} = 2D \delta(q_1 + q_2) \delta(\omega_1 + \omega_2). \end{aligned}$$

Длина корреляции l , то есть характерный масштаб вдоль цепи в пределах на которого осцилляторы синхронизованы, оценивается из условия $\langle (\theta(n, t) - \theta(n+l, t))^2 \rangle \sim 1$. Значит $l \sim K/D$.

Аппендикс: важный интеграл для данной задачи (в матем тоже впишу его.)

Для вычисления интеграла $\int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{\sin^2 x}{x^2}$ рассмотрим функцию $f(u) = \int_0^{+\infty} dx \frac{\sin^2(xu)}{x^2}$. Ее Лаплас образ равен

$$\tilde{f}(s) \equiv \int_0^{+\infty} du e^{-su} f(u) = \int_0^{+\infty} \frac{dx}{x^2} \int_0^{+\infty} du e^{-su} \sin^2(xu) = \frac{2}{s} \int_0^{+\infty} \frac{dx}{4x^2 + s^2} = \frac{\pi}{2s^2}$$

где мы использовали следующую цепочку равенств

$$\begin{aligned} \int_0^{+\infty} du e^{-su} \sin^2(xu) &= -\frac{1}{s} \int_0^{+\infty} d(e^{-su}) \sin^2(xu) = \\ &= -\frac{1}{s} e^{-su} \sin^2(xu) \Big|_0^{+\infty} + \frac{2x}{s} \int_0^{+\infty} du e^{-su} \sin(xu) \cos(xu) = \\ &= \frac{x}{s} \int_0^{+\infty} du e^{-su} \sin(2xu) = \frac{x}{s} \operatorname{Im} \left[\int_0^{+\infty} du e^{(2ix-s)u} \right] = \frac{x}{s} \operatorname{Im} \left[\frac{1}{2ix-s} \right] = \frac{2x^2}{s(s^2 + 4x^2)} \end{aligned}$$

Выполним обратное преобразование Лапласа

$$f(u) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma} e^{su} \tilde{f}(s) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma} \frac{\pi e^{su}}{2s^2} = \frac{\pi}{2} \operatorname{res}_{s=0} \frac{e^{su}}{s^2} = \frac{\pi}{2} \lim_{s \rightarrow 0} \frac{de^{su}}{ds} = \frac{\pi}{2} u$$

Значит $\int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{\sin^2 x}{x^2} = 2f(1) = \pi$.

Белан-л10.3?. В модели Сакагуч-Курамото $r(K)$ при $g(\Omega) = \delta(\Omega - \Omega_0)$.

В модели Сакагуч-Курамото найти $r(K)$ при $g(\Omega) = \delta(\Omega - \Omega_0)$.

Решение В случае $g(\Omega) = \delta(\Omega - \Omega_0)$ стационарное решение уравнения Фоккера-Планка $\partial_t n(\theta | \omega) = -\partial_{\theta}[(\omega - Kr \sin \theta)n(\theta | \omega)] + D\partial_{\theta}^2 n(\theta | \omega)$, удовлетворяющее периодическому граничному условию $n(\theta) = n(\theta + 2\pi)$, имеет вид

$$n(\theta) = C \exp\left(\frac{Kr}{D} \cos \theta\right)$$

Из условия нормировки $\int_{-\pi}^{+\pi} n(\theta) d\theta = 1$ находим

$$C = \frac{1}{2\pi I_0\left(\frac{Kr}{D}\right)}$$

где $I_n(z) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} d\alpha e^{z \cos \alpha + i n \alpha}$ - модифицированная функция Бесселя первого рода. Запишем уравнение самосогласования

$$r = \int_{-\pi}^{+\pi} e^{i\theta} n(\theta) d\theta = \frac{I_1\left(\frac{Kr}{D}\right)}{I_0\left(\frac{Kr}{D}\right)}$$

Так как $I_0(0) = 1$ и $I_1(0) = 0$, то при любом K имеется тривиальное нулевое решение r . Пусть $r \neq 0$ и $Kr \ll 1$. Используя разложения $I_0(z) = 1 + \frac{z^2}{4} + o(z^2)$ и $I_1(z) = \frac{z}{2} + \frac{z^3}{16} + o(z^3)$, запишем

$$r \approx \frac{Kr}{2D} - \frac{K^3 r^3}{16D^3}$$

Отсюда видно, что при $K > K_c = 2D$ появляется ненулевое решение. Если $K - K_c \ll K_c$, то

$$r \approx \sqrt{\frac{K - K_c}{K_c}}$$

12.2.2 Задачи про кинетику полимеров

Белан-ВШЭ-л10.2. Радиус инерции идеальной цепи-кольца

Вычислите радиус инерции длинной идеальной цепи, замкнутой в кольцо. Ответ выразите через контурную длину цепи L и длину Куна $l_{\text{eff}} \ll L$.

Решение (???)

Радиус инерции R_g полимерного кольца определен как

$$R_g^2 = \frac{1}{2L^2} \int_0^L \int_0^L dl_1 dl_2 \langle (\vec{r}(l_1) - \vec{r}(l_2))^2 \rangle,$$

где вектор $\vec{r}(l)$ задает положение в пространстве участка кольца, имеющего контурную координату l , а угловые скобки $\langle \dots \rangle$ обозначают усреднение по случайным конформациям. Плотность распределения $P_{\text{coil}}(\vec{R}; s, L)$ вектора $\vec{R} \equiv \vec{r}(l_1) - \vec{r}(l_2)$, соединяющего два участка полимерного кольца, разделенных контурным расстоянием $s = |l_1 - l_2|$, имеет вид где $\vec{r}(s)$ - случайная координата трехмерного процесса Винера в момент времени s , $\text{Pr}_d[\dots | \dots]$ обозначает плотность распределения координаты трехмерного процесса Винера при заданном наборе условий, а $P(\vec{R}; s) \equiv \text{Pr}_d[\vec{r}(s) = \vec{R} | \vec{r}(0) = \vec{0}]$ дается формулой (3).

Из (13) находим среднеквадратичное расстояние между двумя участками кольца

$$\langle (\vec{r}(l_1) - \vec{r}(l_2))^2 \rangle = \frac{l_{\text{eff}}}{L} s(L - s).$$

Подстановка в формулу для радиуса инерции дает

$$\begin{aligned} R_g^2 &= \frac{l_{\text{eff}}}{2L^3} \int_0^L \int_0^L dl_1 dl_2 |l_1 - l_2| (L - |l_1 - l_2|) = \\ &= \frac{l_{\text{eff}}}{L^3} \int_0^L dl_1 \int_0^{l_1} dl_2 (l_1 - l_2) (L - l_1 + l_2) = \frac{l_{\text{eff}} L}{12} \end{aligned}$$

Таким образом, радиус инерции полимерного кольца в $\sqrt{2}$ раз меньше радиуса инерции линейной цепи той же контурной длины.

Колоколов.л.-5.1. Коррелятор концов цепи Рауза

Найти корреляционную функцию расстояния между концами цепи $\langle \mathbf{R}(t)\mathbf{R}(0) \rangle$, используя уравнение Ланжевена.

Указание (!!!!!!!)

Решение В качестве примера применения уравнения Ланжевена рассмотрим динамику полимерной цепи в жидкости при температуре T . Конкретнее, найдем корреляционную функцию

$$\langle \mathbf{R}(t)\mathbf{R}(0) \rangle$$

Решение В качестве примера применения уравнения Ланжевена рассмотрим динамику полимерной цепи в жидкости при температуре T . Конкретнее, найдем корреляционную функцию

$$\langle \mathbf{R}(t)\mathbf{R}(0) \rangle$$

где $\mathbf{R}(t)$ - расстояние между концами полимерной цепи в момент времени t . Эта величина (точнее, ее фурье-образ) связана с интенсивностью неупругого рассеяния света полимерной цепью.

Если интересоваться крупномасштабным поведением полимерной цепи, например, если длина волны рассеиваемого излучения $\lambda \gg a \sim 10^{-7}$ см - характерного размера звена цепи, то детали строения полимера несущественны и можно использовать простую модель.

Для описания полимера мы выберем самую простую модель "бусинки на пружинках", которая пригодна для описания крупномасштабного поведения. Гармонический потенциал взаимодействия между достаточно далеко отстоящими друг от друга звеньями цепи имеет энтропийное происхождение и получается следующим образом.

Рассмотрим предельно гибкую цепь, состоящую из последовательности n шарнирно соединенных жестких сегментов длины l . Найдем вероятность $P_n(\mathbf{r})$ того, что расстояние между точками цепи, разделенными n звеньями, будет \mathbf{r} . Ввиду независимости ориентаций отдельных сегментов цепи вероятность найти концы сегментов цепи в точках $\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n$ есть

$$P_n(\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n) = g(\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1) g(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \dots g(\mathbf{x}_{n-1}, \mathbf{x}_n),$$

где для свободно сочлененной цепи

$$g(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \frac{1}{4\pi l^2} \delta(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'| - l)$$

есть вероятность найти один конец мономера (жесткого стержня) в точке \mathbf{x}' , если другой конец находится в точке \mathbf{x} , с нормировкой

$$\int g(\mathbf{x}, \mathbf{x}') d\mathbf{x}' = 1$$

Чтобы найти $P_n(\mathbf{r})$, нам нужно проинтегрировать по всем промежуточным положениям концов сегментов $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{n-1}$:

$$\begin{aligned} P_n(\mathbf{r}) &= \int P_n(\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n = \mathbf{x}_0 + \mathbf{r}) d\mathbf{x}_1 \dots d\mathbf{x}_{n-1} = \\ &= \int \delta \left[\sum_{i=0}^{n-1} \mathbf{y}_i - \mathbf{r} \right] \prod_{i=0}^{n-1} [g(\mathbf{y}_i) d\mathbf{y}_i], \end{aligned}$$

где $\mathbf{y}_i = \mathbf{x}_{i+1} - \mathbf{x}_i$. Используя интегральное представление δ -функции

$$\delta(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{x}) d\mathbf{k}$$

получаем

$$P_n(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{r}) g_k^n d\mathbf{k}$$

где

$$g_k = \int g(\mathbf{y}) \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{y}) d\mathbf{y}$$

Для $g(\mathbf{y}) = (4\pi l^2)^{-1} \delta(|\mathbf{y}| - l)$ имеем

$$g_k = \frac{1}{4\pi l^2} \int_0^\infty \delta(|\mathbf{y}| - l) 2\pi y^2 dy \int_{-1}^{+1} d(\cos \theta) \exp(iky \cos \theta) = \frac{\sin kl}{kl}.$$

Для $n \gg 1$ основной вклад дает область интегрирования $k \ll 1/l$, так что $(\sin(kl))/(kl) \approx 1 - k^2 l^2/6$ и g_k^n можно представить в виде

$$g_k^n \approx (1 - k^2 l^2/6)^n \approx e^{-k^2 l^2 n/6}.$$

Тогда

$$\begin{aligned} P_n(\mathbf{r}) &= \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk_x}{2\pi} e^{-ik_x r_x - k_x^2 l^2 n/6} \right) \cdot \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk_y}{2\pi} e^{-ik_y r_y - k_y^2 l^2 n/6} \right) \\ &\cdot \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk_z}{2\pi} e^{-ik_z r_z - k_z^2 l^2 n/6} \right) = \left(\frac{3}{2\pi n l^2} \right)^{3/2} e^{-\frac{3r^2}{2nl^2}} \end{aligned}$$

Мы получили так называемую Гауссову модель полимерной цепи. Видно, что можно выбирать другое число звеньев цепи n' и их длину l' , получая такое же распределение $P(r)$ при условии $n'l'^2 = nl^2$. Из определения $P(r)$ следует, что эта величина пропорциональна статсумме цепи с закрепленными концами $Z_n(r)$. Тогда свободная энергия цепи есть

$$F_n = -T \ln Z_n = \text{Const} + \frac{3Tr^2}{2nl^2}.$$

Теперь, если интересоваться крупномасштабным поведением, можно ввести эффективную длину звена цепи $a = \ln^{1/2}$, и свободная энергия цепи равна

$$F = F(0) + \sum_{i=1}^N \frac{3T(\mathbf{x}_{i+1} - \mathbf{x}_i)^2}{2a^2}.$$

Это выражение позволяет найти силу \mathbf{g}_i , действующую на i -е звено (или бусинку) со стороны соседних звеньев цепи

$$\mathbf{g}_i = -\frac{\partial F}{\partial \mathbf{x}_i} = \frac{3T}{a^2} (\mathbf{x}_{i+1} + \mathbf{x}_{i-1} - 2\mathbf{x}_i).$$

Уравнение Ланжевена теперь принимает вид

$$\xi \frac{\partial \mathbf{x}_i}{\partial t} = \frac{3T}{a^2} (\mathbf{x}_{i+1} + \mathbf{x}_{i-1} - 2\mathbf{x}_i) + \mathbf{f}_i(t),$$

где ξ - коэффициент трения, $\mathbf{f}_i(t)$ - флуктуационная сила, действующая на i -е звено. Удобно считать величину i непрерывной переменной, так что это уравнение можно переписать как

$$\xi \frac{\partial \mathbf{x}_i}{\partial t} = k \frac{\partial^2 \mathbf{x}_i}{\partial i^2} + \mathbf{f}_i(t)$$

где введено обозначение $k = 3T/a^2$. В этом уравнении влияние среды, связанное с трением, мгновенно (нет запаздывания), поэтому естественно считать, что корреляционная функция случайной силы пропорциональна дельта-функции

$$\langle f_\alpha(t, i) f_\beta(t', j) \rangle = 2\xi T \delta(i - j) \delta_{\alpha\beta} \delta(t - t')$$

Поскольку на концах цепи упругая сила действует только с одной стороны, граничные условия имеют вид

$$\left. \frac{\partial \mathbf{x}_i}{\partial i} \right|_{i=0} = 0, \quad \left. \frac{\partial \mathbf{x}_i}{\partial i} \right|_{i=N} = 0.$$

Решение, согласующееся с этими граничными условиями, ищем в виде

$$\mathbf{x}(t, i) = \mathbf{y}_0(t) + \sum_{p=1}^{\infty} \mathbf{y}_p(t) \cos \frac{\pi p i}{N}$$

Величина $\mathbf{y}_0(t)$ определяет движение центра масс \mathbf{X} цепи, поскольку

$$\mathbf{X}(t) = \frac{1}{N} \int_0^N \mathbf{x}(i, t) di = \mathbf{y}_0$$

Из уравнения Ланжевена получаем

$$\xi \frac{\partial \mathbf{y}_0}{\partial t} = \frac{1}{N} \int_0^N \xi \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial t} di = \frac{1}{N} \int_0^N \left[k \frac{\partial^2 \mathbf{x}}{\partial i^2} + \mathbf{f}(i, t) \right] di = \frac{1}{N} \int_0^N \mathbf{f}(i, t) di,$$

так как $\left. \frac{\partial \mathbf{x}_i}{\partial i} \right|_{i=0, N} = 0$. Тогда

$$\mathbf{y}_0(t) - \mathbf{y}_0(0) = \frac{1}{N\xi} \int_0^t dt' \int_0^N \mathbf{f}(i, t') di$$

Среднеквадратичное смещение центра масс за время t

$$\begin{aligned} \langle (\mathbf{y}_0(t) - \mathbf{y}_0(0))^2 \rangle &= \\ &= \frac{1}{N^2 \xi^2} \int_0^t dt' \int_0^t dt'' \int_0^N di \int_0^N dj \delta(i - j) \delta(t - t') 6\xi T = \frac{6T}{N\xi} t \end{aligned}$$

позволяет найти коэффициент диффузии D_c полимерной цепи

$$D_c = \frac{T}{N\xi}$$

который оказывается в N раз меньше коэффициента диффузии одного звена. Компоненты

$$\mathbf{y}_p(t) = \frac{2}{N} \int_0^N di \mathbf{x}(t, i) \cos \frac{\pi p i}{N} \quad p = 1, 2, \dots$$

с $p > 0$ описывают внутренние движения в цепи. Используя уравнение Ланжевена, получим

$$\frac{\partial \mathbf{y}_p}{\partial t} = \frac{2}{N\xi} \int_0^N di \left[k \frac{\partial^2 \mathbf{x}}{\partial i^2} + \mathbf{f}(i, t) \right] \cos \frac{\pi p i}{N} = \frac{2}{N\xi} \mathbf{f}_p(t) - \frac{1}{\tau_p} \mathbf{y}_p(t),$$

где

$$\mathbf{f}_p(t) = \int_0^N \mathbf{f}(i, t) \cos \frac{\pi p i}{N} di, \quad \tau_p = \frac{N^2 \xi}{k \pi^2 p^2}.$$

При интегрировании этого уравнения удобно начальное условие отнести к моменту времени $t' \rightarrow -\infty$ и выбрать его равным нулю, поскольку его влияние из-за трения пренебрежимо мало. Тогда решением уравнения Ланжевена является

$$\mathbf{y}_p(t) = \frac{2}{N\xi} \int_{-\infty}^t \exp\left(-\frac{t-t'}{\tau_p}\right) \mathbf{f}_p(t') dt'$$

Используя выражение для коррелятора случайной силы, находим

$$\langle f_p(t) \rangle = 0, \quad \langle f_{p\alpha}(t) f_{q\beta}(t') \rangle = T N \xi \delta_{pq} \delta_{\alpha\beta} \delta(t - t').$$

Теперь можно вычислить коррелятор

$$\begin{aligned}\langle y_p(t)y_q(0) \rangle &= \frac{12T\delta_{pq}}{N\xi} \int_{-\infty}^t dt' \int_{-\infty}^0 dt'' e^{-(t-t'-t'')/\tau_p} \delta(t' - t'') = \\ &= \frac{6T\tau_p\delta_{pq}}{N\xi} e^{-t/\tau_p}\end{aligned}$$

Расстояние между концами цепи можно представить в виде

$$\mathbf{R}(t) = \mathbf{x}(t, N) - \mathbf{x}(t, 0) = \sum_{p=1,2,3,4,\dots} [(-1)^p - 1] \mathbf{y}_p(t) = -2 \sum_{p=1,3,5,\dots} \mathbf{y}_p(t).$$

Тогда при использовании выражения для $\langle y_p(t)y_q(0) \rangle$ зависимость от времени коррелятора расстояния между концами цепи имеет вид

$$\langle \mathbf{R}(t)\mathbf{R}(0) \rangle = \frac{8Na^2}{\pi^2} \sum_{p=1,3,5,\dots} \frac{1}{p^2} \exp\left(-\frac{tp^2}{\tau_1}\right).$$

Минимальное время релаксации, $\tau_1 = N^2a^2\xi/(3T\pi^2)$, определяет поведение коррелятора расстояния между концами цепи на больших временных масштабах.

При $t = 0$ воспроизводится хорошо известный результат $\langle \mathbf{R}^2 \rangle = Na^2$, поскольку

$$\sum_{p=1,3,5,\dots} \frac{1}{p^2} = \sum_{p=1,2,3,4,\dots} \frac{1}{p^2} - \sum_{p=2,4,6,\dots} \frac{1}{p^2} = \sum_{p=1,3,5,\dots} \frac{1}{p^2} \left(1 - \frac{1}{4}\right) = \frac{\pi^2}{8},$$

где использовано

$$\sum_{p=1,2,3,4,\dots} \frac{1}{p^2} = \zeta_2(1) = \int_0^\infty \frac{xdx}{e^x - 1} = \frac{\pi^2}{6}.$$

Белан-ВШЭ-л10.1. $\langle \vec{R}^4 \rangle$ в свободно сочлененной цепи

Свободно-сочлененная цепь это последовательность из N жестких сегментов одинаковой длины, различные сегменты выбирают свою ориентацию в пространстве независимо друг от друга. Найдите точное выражение для статистического момента $\langle \vec{R}^4 \rangle$, где \vec{R} - вектор, соединяющий концы цепи.

Решение (???) (додумаю и впишу)

Решение через интеграл по траекториям Суть в том, что (???? супер крутые формулы для корреляторов есть через него (????))
(там жуть про это, мб когда-то дойду, теория пока для него очень слабая.)

Колоколов.л.-5.2. Полимер в случайном потоке

Найти функцию распределения по размерам полимера, помещенного в случайный поток.
Указание (!!?!?!?!)

Решение (!?!?!?! тут метод через статсумму, такое еще новое!!!)

Гибкий полимер, состоящий из N звеньев длиной l , принимает в жидкости запутанную, клубковую конфигурацию с характерным размером $R_0 = \sqrt{N}l \ll Nl$ - длины цепи в растянутом состоянии. Помещенный в турбулентный поток, полимер принимает вытянутую конфигурацию, так что его можно приближенно описать, указывая лишь расстояние между концами цепи. Как правило, характерный размер полимера даже в растянутом состоянии гораздо меньше вязкого масштаба турбулентного потока, поэтому действующая со стороны потока жидкости растягивающая сила

пропорциональна расстоянию между концами цепи R . Уравнение Ланжевена принимает вид

$$\frac{dR}{dt} = \sigma(t)R + f(R),$$

где σ - градиент скоростей в турбулентном потоке. Его среднее значение и среднеквадратичное отклонение задаются соотношениями $\langle \sigma(t) \rangle = \lambda$, $\langle (\sigma(t) - \lambda)(\sigma(t') - \lambda) \rangle = D\delta(t - t')$, а $f(R)$ - упругая сила натяжения полимера, имеющая энтропийное происхождение. Найдём сначала вид функции $f(R)$ для модели свободно-сочлененной цепи из N звеньев длиной l . Действие внешней силы \vec{F} на каждое

звено полимерной цепи эквивалентно действию потенциала $U_i = -\vec{F} \cdot \vec{r}_i$, где r_i — радиус вектор i -го звена.

Расстояние между концами цепи R в этом случае находится из

$$R = \frac{1}{Z} \prod_{i=1}^N \int_{-1}^{+1} \left(\sum_i l \cos \theta_i \right) e^{\beta F l \cos \theta_i} 2\pi d(\cos \theta_i),$$

где статсумма Z равна

$$Z = \prod_{i=1}^N \int_{-1}^{+1} e^{\beta F l \cos \theta_i} 2\pi d(\cos \theta_i)$$

$\beta = 1/T$ — обратная температура, θ_i — угол между i -м звеном и направлением внешней силы \vec{F} . Размер полимера под действием внешней силы определяется выражением $R = N \frac{\int_{-1}^{+1} l \cos \theta_i e^{\beta F l \cos \theta_i} d(\cos \theta_i)}{\int_{-1}^{+1} e^{\beta F l \cos \theta_i} d(\cos \theta_i)} = \frac{N}{\beta F} \left[\frac{\beta F l (e^{\beta F l} + e^{-\beta F l})}{e^{\beta F l} - e^{-\beta F l}} - 1 \right]$. Из 3-го закона Ньютона следует, что упругая сила в равновесии должна компенсировать внешнюю силу, т. е. $f(R) = -F(R)$. Для слабого растяжения, $\beta f l \ll 1$,

$$R \approx -\frac{1}{3} N l^2 \beta f, \text{ откуда } f \approx -\frac{3TR}{Nl^2},$$

тогда как для сильного растяжения, $\beta f l \gg 1$,

$$R \approx Nl + \frac{N}{\beta f}, \text{ откуда } f(R) \approx -\frac{T}{l(1 - R/Nl)}.$$

Для последующего применения удобно описывать зависимость силы от растяжения во всем интервале (\sqrt{Nl}, Nl) с помощью интерполяционной формулы

$$f \approx -\frac{T}{l} \left(2x + \frac{x}{1-x} \right),$$

где $x = R/Nl$. Полученные формулы справедливы лишь при $R \gg \sqrt{Nl}$, когда полимерная цепь растянута и ее поведение можно описывать в терминах силы $f(R)$ энтропийного происхождения. Найдём теперь функцию распределения $P(\rho, t)$ по размерам полимера ρ , используя уравнение Ланжевена (ρ ввели, чтобы не путать с $R(t)$). По определению

$$P(\rho, t) = \langle \delta(\rho - R(t)) \rangle.$$

Тогда

$$\frac{\partial P(\rho, t)}{\partial t} = \left\langle -\frac{dR}{dt} \frac{\partial}{\partial \rho} \delta(\rho - R(t)) \right\rangle = \frac{\partial j(\rho, t)}{\partial \rho}$$

где

$$j(\rho, t) = -\left\langle \frac{dR}{dt} \delta(\rho - R(t)) \right\rangle = -\rho \langle \sigma(t) \delta(\rho - R(t)) \rangle - f(\rho) P(\rho, t).$$

Величина $R(t)$ коррелирует с $\sigma(t)$. Поэтому для вычисления $\langle \sigma(t) \delta(\rho - R(t)) \rangle$ представим $R(t)$ в виде

$$R(t) \approx R(t - \varepsilon) + \int_{t-\varepsilon}^t \sigma(t') R(t') dt' + \varepsilon f(R),$$

где $\varepsilon \rightarrow 0$. Последние два члена малы, и можно разложить δ -функцию по малому параметру, что дает

$$\begin{aligned} \langle \sigma(t) \delta(\rho - R(t)) \rangle &= \lambda P(\rho) - \left\langle (\sigma(t) - \lambda) \int_{t-\varepsilon}^t \sigma(t') R(t') dt' \frac{\partial}{\partial \rho} \delta(\rho - R(t)) \right\rangle = \\ &= \lambda P(\rho) - \frac{\partial}{\partial \rho} \frac{D}{2} \rho P(\rho), \end{aligned}$$

где мы использовали $\int_0^\infty \delta(x) dx = 1/2$ и перешли к пределу $\varepsilon \rightarrow 0$. Окончательно для функции распределения $P(\rho, t)$ по размерам цепи получаем уравнение типа Фоккера - Планка:

$$\frac{\partial}{\partial t} P(\rho, t) = \frac{\partial}{\partial \rho} (-f(\rho) P - \lambda \rho P) + \frac{D}{2} \frac{\partial}{\partial \rho} \left[\rho \frac{\partial}{\partial \rho} (\rho P) \right] \equiv \frac{\partial j}{\partial \rho}$$

где

$$j = (-f(\rho) - \lambda \rho) P(\rho, t) + \frac{D\rho}{2} \frac{\partial}{\partial \rho} (\rho P(\rho, t)).$$

Найдем стационарное решение этого уравнения с $j = 0$ (полимеры не рождаются и не уничтожаются). Тогда, заменяя $\rho \rightarrow R$, получим из (651)

$$\frac{d(RP)}{RP} = \frac{2(f(R) + \lambda R)dR}{DR^2}$$

откуда

$$P(R) = A \frac{1}{R} \exp \left(\frac{2}{D} \int^R \frac{(f(r') + \lambda r') dr'}{r'^2} \right),$$

где A - нормировочная постоянная. Наиболее интересен случай сильного растяжения полимера (возможность разрыва цепи не рассматриваем). Используя интерполяционную формулу для силы (644), получаем

$$\begin{aligned} \frac{2}{D} \int^R \frac{(f(r') + \lambda r') dr'}{r'^2} &= \\ &= -\frac{2T}{DNl^2} \int^{R/Nl} \left(\frac{2}{x} + \frac{1}{x(1-x)} \right) dx + \frac{2\lambda}{D} \int^{R/Nl} \frac{dx}{x}. \end{aligned}$$

Вычисляя интегралы, находим

$$P(R) = \frac{A}{Nl} \left(\frac{R}{Nl} \right)^{a-1} \left(1 - \frac{R}{Nl} \right)^b$$

где

$$a = \frac{2}{D} \left(\lambda - \frac{3T}{Nl^2} \right), \quad b = \frac{2T}{DNl^2}.$$

Это распределение имеет смысл (нормируемо) только в достаточно сильном растягивающем потоке, $a > 0$ ($\lambda > 3T/Nl^2$), поскольку мы изначально предполагали, что цепь является сильно вытянутой и ее можно описать одномерной моделью. Естественно, что детали поведения функции распределения зависят от используемой модели полимера. Нормировочная постоянная A определяется из условия

$$\frac{A}{Nl} \int_0^1 x^{a-1} (1-x)^b dx = \frac{A}{Nl} \frac{\Gamma(a)\Gamma(b+1)}{\Gamma(a+b+1)} = 1.$$

Тогда моменты равны

$$\overline{R^n} = (Nl)^n \frac{\Gamma(a+n)\Gamma(a+b+1)}{\Gamma(a)\Gamma(a+b+1+n)}.$$

В частности,

$$\bar{R} = \frac{Nla}{a+b+1}, \quad \overline{R^2} = \frac{(Nl)^2 a(a+1)}{(a+b+1)(a+b+2)},$$

где использовано $\Gamma(z+1) = z\Gamma(z)$. Наибольший интерес представляет поведение цепи вблизи порога $a \ll 1$ ($D \gg \lambda - 3T/Nl^2$) (где оно слабо зависит от используемой модели полимера): $\bar{R} \approx \frac{Nla}{b+1}$, $\overline{R^2} \approx \frac{(Nl)^2 a}{(b+1)(b+2)}$, откуда $\frac{\overline{R^2} - \bar{R}^2}{\bar{R}^2} \approx \frac{b+1}{a(b+2)} \gg 1$, т. е. длина цепи сильно флуктуирует. Условие $a \ll 1$ следует уточнить. Поскольку мы считали цепь вытянутой по сравнению с равновесным значением, то из $\bar{R} > l\sqrt{N}$ следует, что $a > (1+b)/\sqrt{N}$.

Part VIII

Other Topics and Special Methods

В кинетике много особых моделей, которые иногда становятся нужны, их тут и пропишу.

??? мб это же перекину в раздел про кинетику твердых тел?

13 Кинетика фазовых переходов и образования зародышей (??)

(пока не особо прорабатывал.)

13.1 Основы фазовых переходов

обзор кинетики фазовых переходов

??

природа перенасыщения

почему происходит перенасыщение?

13.2 Кинетика фазовых переходов первого рода, Образование зародышей

13.2.1 Критический размер зародыша

задача 11 дз часть 1/2.

Найти критический размер зародыша.

итоговый критический размер

вывод

13.2.2 Скорость роста зародыша

Используя уравнение Фоккера-Планка в пространстве размеров зародышей, найти скорость роста зародыша.

задача 11 дз, часть 2/2.

итоговая критическая скорость

скорость роста границы зародыша в случае сохраняющегося параметра порядка

$$\frac{dR}{dt} = \frac{Const'}{R} \left(\psi - \frac{2\sigma}{R} \right) \equiv \frac{Const}{R} \left(\frac{1}{R_c} - \frac{1}{R} \right).$$

вывод в рамках модели релаксационного уравнения

Вычисление скорости роста зародышей новой фазы может быть выполнено в достаточно общем виде с использованием кинетических моделей.

В модели с несохраняющимся параметром порядка $\phi(\mathbf{r}, t)$ (модель типа А) используется релаксационное уравнение

$$\partial_t \phi = -\Gamma \frac{\delta H}{\delta \phi}, \quad H = \int d\mathbf{r} \left[\frac{c}{2} (\nabla \phi)^2 + U(\phi) \right]$$

со слегка несимметричным потенциалом $U(\phi)$, показанным на рисунке рядом.

Высокий потенциальный барьер не позволяет всей системе одновременно перейти в термодинамически устойчивое состояние,

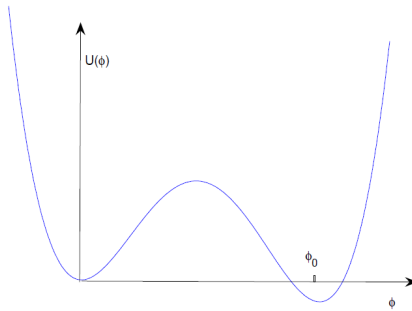


Figure 4

поскольку вероятность такого сценария пропорциональна $e^{(-U_0 V)}$, где V - объем системы.

Следовательно, образование новой фазы возможно только за счет образования и роста зародыша новой фазы - области конечного объема, занятой энергетически более выгодной фазой в море метастабильной фазы.

Член $c(\nabla \phi)^2/2$ описывает поверхностную энергию зародыша.

Полная энергия "круглого" зародыша

$$F = S_d \sigma - V_d \psi$$

где S_d, V_d - соответственно площадь и объем d -мерного зародыша, σ - поверхностная энергия границы.

Сначала оценим толщину переходной области λ .

Энергия границы имеет оценку

$$E_w \sim S_d \lambda \left[c (\phi_0 / \lambda)^2 + U_0 \right]$$

Минимизируя это выражение по λ , получим

$$\lambda \sim \phi_0 \sqrt{c/U_0}, \quad \sigma \sim \phi_0 \sqrt{cU_0}$$

Далее рассмотрим зародыши, у которых размер зародыша $R \gg \lambda$, т.

е.

достаточно продвинутой стадии роста зародыша.

Скорость изменения размера зародыша получим, умножив обе части релаксационного уравнения на $\delta H / \delta \phi$ и проинтегрировав по объему (измеряя время в единицах $1/\Gamma$); слева получится dF/dt - производная по времени от энергии внутри зародыша.

Тогда

$$\frac{dR}{dt} \frac{\partial F}{\partial R} = - \int \left(\frac{\delta H}{\delta \phi} \right)^2 dV = - \int \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} \right)^2 dV$$

$\partial_t \phi$ отлична от нуля только на движущейся стенке; пусть за время δt стенка сдвигается на свою толщину λ , тогда $\delta \phi(R) = \phi_0$ при $\delta t dR/dt = \lambda$, откуда

$$\frac{\partial \phi(R)}{\partial t} = \frac{\phi_0}{\lambda} \frac{dR}{dt}$$

Поскольку

$$\int \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} \right)^2 dV \sim \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} \right)^2 \lambda S_d \sim \left(\frac{dR}{dt} \right)^2 \frac{\phi_0^2}{\lambda} S_d,$$

то мы получим

$$\frac{\phi_0^2}{\lambda} \frac{dR}{dt} = - \frac{1}{S_d} \frac{\partial F}{\partial R}$$

где F задано уравнением $F = S_d \sigma - V_d \psi$.

Таким образом,

$$\frac{dR}{dt} = \frac{\lambda}{\phi_0^2} \left(\psi - \frac{2\sigma}{R} \right) \equiv C \text{ onst} \left(\frac{1}{R_c} - \frac{1}{R} \right)$$

В качестве примера модели типа А можно привести образование и рост пузырька пара в перегретой жидкости.

В данном случае параметром порядка служит разность плотностей пара и жидкости, а несохранение параметра порядка объясняется баллистической (недиффузионной) доставкой молекул воды с поверхности внутрь пузырька.

С другой стороны, процесс конденсации пара в жидкость должен описываться с учетом локального сохранения параметра порядка, поскольку в данном случае рост зародыша жидкой фазы обусловлен диффузионной доставкой большого числа молекул из гораздо менее плотной фазы пара.

вывод в рамках уравнения непрерывности

В этой модели (модель В) скорость изменения параметра порядка получается из уравнения непрерывности

$$\partial_t \phi = -\nabla j$$

где плотность потока в силу сохранения параметра порядка определяется разной степенью отклонения от равновесия в различных пространственных точках

$$j = -\nabla \frac{\delta H}{\delta \phi}$$

так что

$$\partial_t \phi = \Delta \frac{\delta H}{\delta \phi}$$

с тем же самым выражением для H , исходным релаксационным уравнением (и, следовательно, оценками толщины стенки и скорости изменения параметра порядка), что и в модели типа А.

Меняется лишь уравнение движения

$$\frac{dR}{dt} \frac{\partial F}{\partial R} = \int \frac{\partial \phi}{\partial t} \left(\frac{1}{\Delta} \frac{\partial \phi}{\partial t} \right) dV$$

где для $d = 3$

$$\left(\frac{1}{\Delta} \frac{\partial \phi}{\partial t}\right)(\mathbf{r}, t) = - \int \frac{1}{4\pi |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \frac{\partial \phi}{\partial t}(\mathbf{r}', t) dV'.$$

Тогда имеем оценку

$$\int \frac{\partial \phi}{\partial t} \left(\frac{1}{\Delta} \frac{\partial \phi}{\partial t}\right) dV \sim \frac{1}{R} \left(\int \frac{\partial \phi}{\partial t} dV\right)^2 \sim \frac{1}{R} \left(\frac{\phi_0 dR/dt}{\lambda} \cdot \lambda S_d\right)^2 \sim \phi_0^2 \left(\frac{dR}{dt}\right)^2 \frac{S_d^2}{R}.$$

В итоге получаем скорость роста границы зародыша в случае сохраняющегося параметра порядка

$$\frac{dR}{dt} = \frac{Const'}{R} \left(\psi - \frac{2\sigma}{R}\right) \equiv \frac{Const}{R} \left(\frac{1}{R_c} - \frac{1}{R}\right).$$

13.3 Другое о фазовых переходах

(тут много что есть, пока просто указываю, займусь - буду улучшать структуры)

13.3.1 Кинетика фазовых переходов первого рода, Стадия коалесценции

13.3.2 (!!) Релаксация параметра порядка вблизи точки фазового перехода второго рода

13.3.3 Динамическая масштабная инвариантность

13.3.4 Релаксация в жидком гелии вблизи А-точки

13.3.5 Метастабильные состояния и зародыши новой фазы

13.3.6 Классическая и квантовая кинетика образования зародышей

13.3.7 примеры фазовых переходов

пузырьки при закипании воды применим эту теорию для описания этого.

(?)

13.3.8 Слабая локализация (????)

есть в программе.

жесть какая-то.

(пока не планирую заниматься, чисто так, для объема добавил. мб когда-то столкнусь с этим)

обзор

(вики)

Слабая локализация (англ. weak localization) — совокупность явлений, обусловленных эффектом квантово-механической интерференции электронов самих с собой в слабо разупорядоченных материалах с металлическим типом проводимости[1].

Явления слабой локализации являются универсальными и проявляются в любых неупорядоченных проводниках — в металлическом стекле, тонких металлических плёнках, системах с двумерным электронным газом и тому подобное.

Причиной слабой локализации служит изменение скорости диффузии электронов благодаря интерференции электронных волн, многократно рассеивающихся на дефектах кристаллической решётки.

При низких температурах, когда сопротивление проводника определяется преимущественно рассеянием на случайном потенциале, что создаётся дефектами, интерференция приводит к квантовым поправкам в классической электропроводности.

Экспериментально слабая локализация проявляется явлениями отрицательного магнетосопротивления, нехарактерной для металлов температурной зависимости электрического сопротивления при низких температурах, универсальными флуктуациями проводимости в мезоскопических образцах и тому подобное.

Происхождение термина «слабая локализация» объясняется тем, что интерференционные явления можно интерпретировать как предвестник андерсоновского перехода металл-диэлектрик, когда при достаточно сильном уровне беспорядка происходит полная локализация электронов[2].

вкратце теория

Слабая локализация возникает из-за интерференции электрона самого с собой благодаря возможности его движения в одну и ту же точку различными траекториями.

До открытия эффектов слабой локализации считалось, что квантово-механические явления интерференции существуют в основном для подвижных электронов в монокристаллах.

В первую очередь, это дифракция электронов[10].

Однако выяснилось, что эти явления не только существуют в неупорядоченных системах, но и могут усиливаться в таких системах[1][5].

В отличие от кристаллов, где потенциал поля, в котором движутся электроны, меняется периодически, в средах с беспорядком он меняется случайным образом.

Электроны, энергия которых меньше максимальных значений потенциала, локализуются в потенциальных ямах, образованных случайным потенциалом.

Если длина локализации невелика по сравнению с расстояниями между центрами локализации, электрон в потенциальной яме находится до тех пор, пока тепловые колебания атомов не перекинут его в соседнюю потенциальную яму.

Такой перенос электронов называется прыжковым транспортом[11].

Примером материалов, в которых осуществляется прыжковый транспорт, являются аморфные полупроводники[12].

Электроны с более высокими энергиями не локализуются в случайных потенциальных ямах, а рассеиваются на них.

Можно предположить, что среда с беспорядком состоит из хаотично расположенных силовых центров, на каждом из которых электрон рассеивается изотропно, то есть, может с одинаковой вероятностью отклониться на любой угол от первоначальной траектории движения.

Если бы электрон был классической частицей, то вероятность обнаружить электрон, рассеянный на хаотически расположенных силовых центрах, не зависела бы от угла рассеяния, однако, учёт корпускулярно-волнового дуализма меняет картину[1].

Квантовые поправки к проводимости

хз

история

Эффект слабой локализации — отрицательное магнетосопротивление — экспериментально обнаружил в 1948 году сотрудник Института точной механики и вычислительной техники АН СССР Ченцов Г.

А.[3].

В течение длительного времени (почти 30 лет) его безуспешно пытались объяснить разного рода теориями.

Так, например, в соответствии с развитой Ютакой Тоязавой (англ.

Yutaka Toyozawa) моделью, некоторая часть примесных атомов в кристалле могут захватывать лишние электроны и, таким образом, приобретают магнитный момент — так называемый локальный спин[4].

Поскольку спины взаимодействующих электронов могут быть не параллельны, при рассеянии возможна переориентация спина, то есть, возникает дополнительный неупругий механизм рассеяния носителей тока.

Во внешнем магнитном поле происходит ориентация спинов по полю, причем доля ориентированных по полю спинов возрастает с увеличением магнитного поля и понижением температуры.

В результате неупругий механизм рассеяния частично выключается магнитным полем, что приводит к уменьшению электрического сопротивления.

Однако сравнение теоретических расчетов с экспериментом показывает, для согласия с экспериментом магнитный момент рассеивающего центра должен достигать десятков магнетонов Бора.

Этот и ряд других экспериментальных фактов показали, что невозможно объяснить экспериментальные данные в рамках модели Тоязавы[4].

Выдвигались и другие модели для объяснения отрицательного магнетосопротивления.

Однако они не были обобщающими или базировались на заведомо ложных представлениях об увеличении концентрации носителей тока в магнитном поле.

И только в 1979 году это явление было объяснено как универсальное явление, которое наблюдается в любом проводнике при определённых условиях[5].

Количественная теория слабой локализации была построена в 1981 группой советских физиков-теоретиков: Борисом Альтшулером, Аркадием Ароновым, Анатолием Ларкиным и Давидом Хмельницким[6].

Она была подтверждена многочисленными экспериментами, а авторы за эту работу в 1993 году получили премию Европейского физического общества.

В том же 1981 году Юрий Шарвин и Дмитрий Юрьевич Шарвин обнаружили осцилляции сопротивления в тонкостенном цилиндре при изменении магнитного поля[7].

В 1985 году экспериментальным путём было подтверждено существование слабой локализации для электромагнитных волн[8][9].

13.4 Теория протекания

14 Exact solutions for the statistics of extrema of some random 1D landscapes, Application to the equilibrium and the dynamics of the toy model by Pierre Le Doussal Cécile Monthus

Abstract

The real-space renormalization group (RSRG) method introduced previously for the Brownian landscape is generalized to obtain the joint probability distribution of the subset of the important extrema at large scales of other one-dimensional landscapes. For a large class of models we give exact solutions obtained either by the use of constrained path-integrals in the continuum limit, or by solving the RSRG equations via an Ansatz which leads to the Liouville equation. We apply in particular our results to the toy model energy

landscape, which consists in a quadratic potential plus a Brownian potential, which describes, among others, the energy of a single domain wall in a 1D random field Ising model (RFIM) in the presence of a field gradient. The measure of the renormalized landscape is obtained explicitly in terms of Airy functions, and allows to study in details the Boltzmann equilibrium of a particle at low temperature as well as its non-equilibrium dynamics. For the equilibrium, we give results for the statistics of the absolute minimum which dominates at zero temperature, and for the configurations with nearly degenerate minima which govern the thermal fluctuations at very low-temperature. For the dynamics, we compute the distribution over samples of the equilibration time, or equivalently the distribution of the largest barrier in the system. We also study the properties of the rare configurations presenting an anomalously large equilibration time which govern the long-time dynamics. We compute the disorder averaged diffusion front, which interpolates between the Kesten distribution of the Sinai model at short rescaled time and the reaching of equilibrium at long rescaled time. Finally, the method allows to describe the full coarsening (i.e. many domain walls) of the 1D RFIM in a field gradient as well as its equilibrium.

14.1 Introduction

14.1.1 Overview

Disordered systems [1, 2] are usually characterized by a complicated energy (or free energy) landscape, with many local minima representing metastable states, separated by saddles and barriers which govern the dynamics. In general, obtaining analytical information on the statistics of large scale extrema and saddles of a random energy landscape $U(x)$ is an extremely hard task. In one dimension however, the situation is simpler since one has to deal with an alternating sequence of minima and maxima, and there is hope for analytical progress. Recently, the large scale extrema of the pure Brownian landscape and of the biased Brownian landscape have been studied with a powerful real space renormalization technique [3, 4]. There the interest was in the non-equilibrium Arrhenius dynamics of a particle in such a landscape, the so-called Sinai model [5, 6, 7, 8]. At large time this dynamics is dominated by jumps between deep minima. The renormalization procedure thus consists in erasing iteratively the small barriers in the landscape, and retaining only the large scale, large energy features which control the large time dynamics. This procedure yields the asymptotically exact large time dynamics in the case of the Sinai model, and allows to obtain a host of exact results [3, 4]. This real space renormalization technique has also been used in other one dimensional models, such as quantum spin chains [11, 12], reaction diffusion with disorder [10] and the random field Ising model [9], with the same fixed points associated to the pure or to the biased Brownian landscape. For the coarsening of pure 1D Φ^4 model at zero temperature from a random initial condition [13], another fixed point was found which corresponds to the successive elimination of smallest domains, the only variable there being the length. A question is then whether other energy landscapes can be studied using similar techniques.

14.1.2 Definition and properties of the toy model

A one-dimensional energy landscape of interest is the so-called “toy model” defined by the Hamiltonian

$$U_{\text{toy}}(x) = \frac{\mu}{2}x^2 + V(x) \quad (14.1)$$

where the random potential $V(x)$ is a Brownian motion with correlations

$$\overline{(V(x) - V(y))^2} = 2|x - y| \quad (14.2)$$

Here we have defined the model directly in the continuum limit, but the universality class contains all models with a small scale cutoff and the above behavior (14.2) at large scale. This model has been introduced by Villain *et al.* as a zero-dimensional toy-model for an interface in the random field Ising model [14]. Let us briefly review previous studies of this model and explain some motivations to reexamine this model.

Equilibrium: Imry-Ma argument and ‘statistical tilt symmetry’

For a single particle, the Boltzmann equilibrium problem at temperature T is defined by the partition function $Z = \int dx e^{-U_{\text{toy}}(x)/T}$. Although it seems very simple at first sight, it is an interesting example of disordered system. Because of the quadratic well, the typical position of the particle is finite, but it fluctuates in a non trivial way from sample to sample. An Imry-Ma argument gives the following scaling for the typical scale of the absolute minimum

$$x \sim \left(\overline{\langle x^2 \rangle_{T=0}} \right)^{1/2} = C \mu^{-2/3} \quad (14.3)$$

where we denote by the brackets $\langle . \rangle$ the thermal Boltzmann measure with potential (14.1) and by an overbar the average over the random potential (14.2). The amplitude C will be computed here. Usual methods such as perturbation expansion (even summing all terms) [15] or iteration method [16] completely fail to recover (14.3). A Larkin type perturbation [17] with a small scale cutoff also predicts $x \sim (1/\mu)$ instead of (14.3). Within replica variational *approximations* of the present model (or within the solvable mean field limit of large embedding space dimension $N \rightarrow \infty$, see below) this is cured at the price of spontaneous replica symmetry breaking (RSB) [22, 31]. RSB is of course not expected to occur in the present exact model (14.1 - 14.2) (see Ref. [34] for discussion of the cases where RSB may occur in a one dimensional model).

The toy model also possesses the ‘statistical tilt symmetry’ as other random field models [18] or the directed polymer model [19, 20], which imply exact remarkable identities [18] between the disorder averages of the thermal cumulants of the position at any temperature, as a consequence from the statistical translation invariance of the random potential. These exact identities can be summarized by [18]

$$\overline{\ln \langle e^{-\lambda x} \rangle} = T \frac{\lambda^2}{2\mu} \quad (14.4)$$

which is simply quadratic in λ , so that the second cumulant reads

$$\overline{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = \frac{T}{\mu} \quad (14.5)$$

and the disorder-average of all thermal cumulants of order greater than two vanish! As emphasized in [18], in the low temperature regime, the result (14.5) implies that the thermal fluctuations of the toy model are related to the presence of metastable states in rare disordered samples.

Non-equilibrium dynamics: between Sinai and approach of equilibrium

An Arrhenius dynamics can be defined for the toy model, and provided μ is small so that barriers can be large, one can ask about universal long time properties. This was studied for the special case $\mu = 0$ where one recovers the Sinai model [3, 4]. The dynamics for small but finite μ is interesting for several physical systems of the random field type, and has not been studied up to now, to our knowledge. Physically, one expects the diffusion to interpolate between a Sinai-type diffusion at short rescaled time and the approach of equilibrium at long rescaled time.

14.1.3 Applications of the toy model

Directed polymers in random media

The toy model has also attracted a lot of attention in connection with the problem of D -dimensional manifolds in $(N + D)$ random media, where it plays the role of a prototype model since it represents the simplest case $D = 0$ and $N = 1$ [21, 22]. It has been moreover argued in [23, 24] that the toy model actually describes the statistics of the end-point of a random polymer of length L in $(1 + 1)$ with delta correlated noise in the limit L large with the correspondence $\mu = 1/L$. It was found numerically in [25] that the correlation of the effective random potential for the directed polymer model behaves as (14.2) only at short distances but saturates at large distances. This analysis has been confirmed by a scaling argument in [19] and was finally rigorously proven in [26] where the full statistics of the effective potential was exactly computed to be an “Airy process”, defined there. Thus the approximation of end-point of the directed polymer in $(1 + 1)$ by the toy model is valid only locally.

Burgers turbulence

The toy model is related to the statistical properties of a velocity field $v(x, t)$ evolving according to the Burgers equation [27, 28]

$$\partial_t v(x, t) + v(x, t) \partial_x v(x, t) = \nu \partial_x^2 v(x, t) \quad (14.6)$$

This equation can be solved via the Hopf-Cole transformation as

$$v(x, t) = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} dy \left(\frac{x-y}{t} \right) e^{-\frac{1}{2\nu} \left(\frac{(x-y)^2}{2t} + \phi(y) \right)}}{\int_{-\infty}^{+\infty} dy e^{-\frac{1}{2\nu} \left(\frac{(x-y)^2}{2t} + \phi(y) \right)}} \quad (14.7)$$

where $\phi(y) = \int_0^y dy' v(y', 0)$ is a Brownian motion in the case where the initial velocity field $v(y', t = 0)$ is a white noise process. In the inviscid limit $\nu \rightarrow 0$, the integrals are dominated by the saddle

$$\xi(x, t) = \min_y \left(\frac{(x - y)^2}{2t} + \phi(y) \right) \quad (14.8)$$

which gives

$$v(x, t) = \frac{x - \xi(x, t)}{t} \quad (14.9)$$

The velocity distribution and the statistical properties of shocks (which appear at the points x where there are two degenerate minima in (14.8)) are thus directly related to the properties of minima of the toy model (14.1) with the correspondence $\mu = 1/t$.

Deterministic KPZ equation

The toy model is also related to the relaxation of an interface evolving according to the deterministic KPZ equation [29, 30]

$$\partial_t h(x, t) = \nu \partial_x^2 h + \frac{\lambda}{2} (\partial_x h(x, t))^2 \quad (14.10)$$

from a random initial condition $h(y, t = 0)$ which is a white noise in y . Indeed, the mapping [29, 30]

$$v(x, t) = -\lambda \partial_x h(x, t) \quad (14.11)$$

transforms the deterministic KPZ equation (14.10) into the burgers equation (14.6), leading to

$$h(x, t) = \frac{2\nu}{\lambda} \ln \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dy}{\sqrt{4\pi\nu t}} e^{-\frac{1}{2\nu} \left(\frac{(x-y)^2}{2t} + \lambda h(y, 0) \right)} \quad (14.12)$$

Again in the limit $\nu \rightarrow 0$ where the saddle method yields (14.9), the profile $h(x, t)$ is made of parabolic segments joined together by cusps corresponding to the shocks of the Burgers equation (see for instance Fig.1 in [29]).

Coarsening and equilibrium in some random field Ising model

For definiteness, we will consider in the following an Ising spin chain, but one can study not only spin systems, but also for instance liquid helium meniscus on a rough substrate [33], which does also see random field disorder, and can in principle be probed in confined, quasi one dimensional geometry.

Let us consider as in [9] the 1D random field Ising system of Hamiltonian

$$H = -J \sum_{k=1}^{N-1} S_k S_{k+1} - \sum_{k=1}^N h_k S_k \quad (14.13)$$

with spins $S_k = \pm 1$, and study its equilibrium and its low temperature Glauber dynamics. In the domain wall representation, two types of domains walls A , $(+|-)$, and B , $(-|+)$, in numbers N_A and N_B , alternate at positions a_α , b_α , respectively, and the Hamiltonian can be rewritten as

$$H = H_{ref} + 2J(N_A + N_B) - \sum_{\alpha=1}^{N_A} U(a_\alpha) + \sum_{\alpha=1}^{N_B} U(b_\alpha) \quad (14.14)$$

with $|N_A - N_B| < 1$. The potential felt by domains walls of type B is

$$U(k) = 2 \sum_{j=1}^k h_j \quad (14.15)$$

while domain walls A feel potential $-U(k)$. The dynamics proceeds by diffusion and annihilation of domains of opposite types.

In [9], the zero field $\overline{h_k} = 0$ and the uniform applied field $\overline{h_k} = H$ situations have been studied. The toy model corresponds to the other interesting case

$$\overline{h_k} = kh \quad (14.16)$$

$$\overline{h_k^2} - \overline{h_k}^2 = g \quad (14.17)$$

representing a *field gradient* with zero net applied field (such gradients are easy to produce experimentally). Indeed, it is easy to see that defining the scaled length $x = 2gk$, each domain wall B sees the toy model energy landscape $U(k) = U_{toy}(x)$ with $U_{toy}(x)$ defined in (14.1) in terms of a unit Brownian and

$$\mu = \frac{h}{2g^2} \quad (14.18)$$

For a positive field gradient ($h > 0$), the domain walls of type B $(-|+)$ will be attracted towards the minima of $U_{toy}(x)$, and will thus be confined in the neighborhood of the point $x = 0$ where the applied field vanishes, whereas the domain walls of type A $(+|-)$ will be attracted by the local maxima of $U_{toy}(x)$ or will be expelled towards the boundaries.

The equilibrium of the toy model considered above and its dynamics involving only one particle corresponds to a *single* domain wall B . If the field gradient is $h > 0$ and if the system is initially prepared with the “natural” boundary conditions, namely spin far on the left are $(-)$, far on the right $(+)$ and with a *single* domain wall of type B in between, it remains such, until equilibration time $T \ln t_{eq0} = 2J$ (or $T \ln t_{eq0} = J$ if domains can be created at boundaries). During that window of time the domain wall diffuses in the toy model landscape and reaches thermal equilibrium at time t_{eq} , a time scale which can be much smaller than t_{eq0} if J is sufficiently large. Another interesting situation corresponds to *unstable* single domain wall dynamics and is obtained if the field gradient is applied against these boundary conditions, e.g. a single A domain initially. The domain is then expelled towards either side after a time t_{exp} which again can be well before t_{eq0} if J is sufficiently large.

Finally, the full, many domain coarsening can be studied and is expected to exhibit a large degree of universality in the small h , large Imry Ma length $4J^2/g$, small temperature $T \ll J$, large time limit as in [9]. It is interesting to study because of the competition between the disorder which tends to slow the coarsening and the field gradient which tend to accelerate the process.

14.1.4 Goal and Results

To summarize, the toy model (14.1) is thus interesting from several points of view. For the statics, it is directly related to more complex problems (directed polymer, burgers turbulence and KPZ equation) in some particular limits, as described above; on the other hand, it represents in itself a ‘toy’ disordered system that presents many properties of more complex models, such as the presence of metastable states and the identities of the statistical tilt symmetry.

Up to now, the landscape $U(x)$ of the toy model has been characterized by two kinds of approach. There has been on one side some studies on the absolute minimum of the toy model, either in probability theory [37] and in the context of the Burgers equation [28], and on the other side a study [32] on the statistics of all extrema of the model (14.1), but that does not distinguish between the important ones (the deep ones) and the large number of unimportant small scale extrema, nor does it yield any information on joint distributions. None of these studies addresses the question of the joint distributions in energy and position of the set of all deep extrema, neither the one relevant for the statics (several minima) and even less the one relevant for the dynamics (maxima, minima and barriers).

The goal of this paper is to show that the renormalization method can be generalized to solve a broader class of one dimensional landscape than the previously solved Brownian landscape [12, 4] and that it is of deeper fundamental interest as an alternative to more conventional probability theory techniques. The class explicitly solved here includes the toy model (14.1) landscape. We formulate the RSRG for a general one-dimensional landscape as an exact method to obtain the joint probability distribution, in total number, position and value of energy on the subset of the important deep extrema. More precisely, the renormalized landscape at scale Γ is defined by the subset of extrema of the initial landscape which have survived after the erasing of all barriers smaller than Γ . This is equivalent to require that in a segment between a maximum $U(M)$ and the next minimum $U(m)$ of the renormalized landscape, any two points (x, y) with $M < x < y < m$ must satisfy the constraint that the energy difference $U(y) - U(x)$ is smaller than Γ (and the symmetrical condition for a segment between a minimum and the next maximum). The joint probability distribution of this subset of important extrema contains a tremendous amount of information, including in particular the distribution of absolute extrema, of secondary extrema, of largest barriers etc... Of course the general case is intractable analytically, but our aim is to identify solvable models and universality classes, given by some continuum limits.

To be more specific, we will consider the continuum models where the potential $U(x)$ is a

stochastic process defined by the Langevin equation

$$\frac{dU(x)}{dx} = F[U(x), x] + \eta(x) \quad (14.19)$$

$\eta(x)$ being a delta correlated white noise. The toy model (14.1) corresponds to the case where the force doesn't depend on $U(x)$ and is linear in x

$$F[U(x), x] = F[x] = \mu x \quad (14.20)$$

Another cases of interest are the stationary landscapes, where the force in the Langevin equation (14.19) is independent of the space x

$$F[U, x] = F[U] = -\frac{dW[U]}{dU} \quad (14.21)$$

The case $F[U] = 0$ is the pure Brownian landscape, and the case $F[U] = F > 0$ is the biased Brownian landscape. These are the only two cases where the RSRG has been applied up to now [12, 4], but we will show here that it generalizes to include any $F[U]$. Note that solving the landscape problem here also amounts to solve the problem of the joint distribution of extremal points in the trajectory of a particle in a one dimensional force field F where x is interpreted as "time" and U as the position of the particle. For all cases (14.19), the Markovian character of the Langevin equation implies that the landscape measure can be written as product of blocks measures which satisfy closed real space renormalization equations. For the specific cases of the toy model (14.20) and of stationary landscapes (14.21), we obtain here explicit expressions for the blocks measures. This is achieved by two complementary methods very different in spirit. On one hand, for the above continuum models we are able to directly compute the blocks using some constrained path integrals. On the other hand, we can also start from the RSRG equations for the blocks and assume some Ansatz which solves these equations and obtain, interestingly via the Liouville equation, analytical forms for the blocks. As is customary in searching for RG fixed points, this can be done without specifying the initial landscape, and as a result the solutions look a priori more general. We show that these do contain the universality classes corresponding to (14.19), with a result which coincide exactly with one obtained by the direct path integral method. Our study thus makes more precise the interesting relations between the powerful RSRG method and more conventional probabilistic approach using stochastic calculus.

For the case of the toy model, the full solution for the joint probability measure of the renormalized landscape is obtained in this way explicitly in terms of Airy functions. We then use this exact measure of the renormalized landscape to study in details the equilibrium and the non-equilibrium dynamics of the toy model (14.1) and give some results for the RFIM in a field gradient.

For the equilibrium, we study the statistical properties of the absolute minimum which dominates at zero temperature. We obtain simple exact expressions for the moments of the position of a single particle at equilibrium and compare with the results of approximate methods, namely the gaussian variational replica study [22, 31] and of the vector breaking of replica symmetry [38]. We also compute the properties of configurations with nearly degenerate minima which govern the thermal fluctuations at very low-temperature, and we prove that the rare configurations presenting two nearly degenerate minima do not only give a finite contribution to (14.5), but actually are entirely responsible of the full result (14.5).

For the dynamics of a single particle in the toy energy landscape (e.g. a single RFIM domain wall), we compute the distribution over samples of the equilibration time t_{eq} or equivalently the distribution of the largest barrier $\Gamma_{eq} = T \ln t_{eq}$ in the system. Our results are expressed in terms of the dimensionless scaling parameter

$$\gamma_{eq} = \left(\frac{\mu}{2}\right)^{1/3} T \ln t_{eq} \quad (14.22)$$

and we give in particular the two asymptotic behaviors of the distribution for γ_{eq} small and large. We characterize the rare configurations presenting an anomalously large equilibration time which govern the long-time dynamics. We also compute local properties of the renormalized landscape, such as the probability density of a minimum at scale $\Gamma = T \ln t$, and the disorder averaged diffusion front for a single particle, which interpolates between the Kesten distribution of the Sinai model at short rescaled time and the reaching of equilibrium at long rescaled time.

These quantities can be translated into results for observables of the RFIM in a field gradient, assuming convergence to the full state where each maximum of the renormalized landscape contains an A domain and each minimum a B domain. This convergence was proved in [9] and also holds here in range of parameters of interest (small μ , large time t) and with a random initial condition. As time $\Gamma = T \ln t$ increases, decimations occur corresponding to pairs of $A - B$ domains annihilating. Thus initially, many domain coarsening take place. Depending on the scaling parameter:

$$\gamma_{eq0} = 2J \left(\frac{\mu}{2} \right)^{1/3} \quad (14.23)$$

the equilibrium state, reached at time $T \ln t_{eq0} = 2J$ will contain either a single domain wall B (for $\gamma_{eq0} \rightarrow +\infty$) or several additional pairs $A - B$ (infinitely many as $\gamma_{eq0} \rightarrow 0$). The behaviors of the sample to sample probabilities that a single domain wall B remains is obtained. A formal solution for the total magnetization is easily written, and an explicit calculation is performed for large γ_{eq0} where a single domain wall remains. Indeed in that limit the total magnetization is simply $M = 2x_B$ where x_B is the absolute minimum of the toy landscape.

The paper is organized as follows. The Section 14.2 is devoted to the general definitions and properties of the renormalization procedure for an arbitrary one-dimensional landscape. In Section 14.3, we compute the probability measure of the renormalized landscape for a large class of models. We then study in details the toy model: we construct the probability measure for the renormalized landscape in Section 14.4, we study its equilibrium properties in Section 14.5, and the non-equilibrium dynamics in Section 14.6. Some results for the RFIM in a field gradient are also discussed in Section 14.6. The Section 14.8 contains our results for the case of stationary landscapes. Finally, to facilitate reading of the paper, we give the more detailed definitions and derivations in the several appendices.

14.2 Renormalization procedure for an arbitrary 1D landscape

This section contains the precise definitions of the measure for the initial landscape and for the renormalized landscape. The probability measure of the renormalized landscape satisfies by construction a set of RG equations for the joint distribution of extrema.

14.2.1 Initial landscape

The general model studied in this paper is the following. We consider one dimensional random landscapes $U(x)$ which for definiteness in this section are continuous in the energy U , discrete in space x and defined on a finite interval $x = 1, 2, \dots, N$. A realization of the random landscape is thus simply given by a set of random variables U_x , $x = 1, 2, \dots, N$ and the original problem is defined by some probability measure noted

$$\mathcal{P}[U]DU \equiv \mathcal{P}(U_1, \dots, U_N) dU_1 \dots dU_N \quad (14.24)$$

The normalization with the fixed boundary conditions $U(x_1 = x_L) = U_L$ and $U(x_N = x_R) = U_R$ reads

$$Z(U_L, x_L; U_R, x_R) = \int \mathcal{P}(U_L, U_2, \dots, U_{N-1}, U_R) dU_2 \dots dU_{N-1} \quad (14.25)$$

We are interested in the statistics of the extrema of this landscape. For definiteness, we choose here the convention that there are infinite potential outside the interval, i.e. $U(x = 1^-) = U(x = N^+) = +\infty$, and that $N = 2K - 1$ is odd. We then define the probability $N_{\text{init}}^{(2n)}(U_L; u_1, x_1; \dots u_{2n-1}, x_{2n-1}; x_R, U_R)$ that the initial landscape has n local minima situated at positions $x_1, x_3, \dots, x_{2n-1}$ with the potentials u_1, \dots, u_{2n-1} and $(n-1)$ local maxima situated at positions $x_2, x_4, \dots, x_{2n-2}$ with potentials u_2, \dots, u_{2n-2} . They are of course alternated $x_1 < x_2 < x_3 < x_4 < \dots < x_{2n-1}$ and the values $x_1 = x_L$ and $x_{2n-1} = x_R = 2K - 1$ are allowed. An explicit and more precise definition of these objects is given in Appendix 14.10, with a derivation of their normalization property

$$Z(U_L, x_L; U_R, x_R) = \sum_{n=1}^K \int du_1 du_2 \dots du_{2n-1} \theta(U_L - u_1) \theta(U_R - u_{2n-1}) \prod_{i=1, n-1} \theta(u_{2i} - u_{2i-1}) \theta(u_{2i} - u_{2i+1}) \sum_{x_L \leq x_1 < x_2 < x_3 < x_{2n-1} \leq x_R} N_{\text{init}}^{(2n)}(U_L, x_L; u_1, x_1; \dots u_{2n-1}, x_{2n-1}; U_R, x_R) \quad (14.26)$$

The objects $N_{\text{init}}^{(2n)}$ are usually extremely complicated and contain a lot of irrelevant information. To single out the important, deep extrema we now define the renormalized landscape where all small barriers have been eliminated.

14.2.2 Construction of the renormalized landscape

The renormalized landscape at scale Γ is defined by the list of positions and energies of a subset S_Γ of extrema of the initial landscape. For $\Gamma = 0$, S_0 is the set of all extrema of the initial landscape. For $\Gamma > 0$ it is the subset of extrema that survive when all barriers smaller than Γ in the system have been erased. This is shown in Fig 1. This subset S_Γ is again made of alternating minima and maxima. It is convenient to call descending bonds the segments between a maximum and the next minimum both in S_Γ (and respectively ascending bonds the segments between a minimum and the next maximum). The constraint obeyed by the subset is that any two points (i, j) on a bond $[x, y]$ with $x < i < j < y$ must satisfy that their energy difference $U_j - U_i$ is smaller than Γ if the bond is descending, and symmetrically, the energy difference $U_i - U_j$ must be smaller than Γ if the bond is ascending.

The main object of interest is the probability measure of the renormalized landscape. We consider the probability $N_\Gamma(x_L, u_L; u_1, x_1; \dots u_{2n-1}, x_{2n-1}; x_R, u_R)$ that the renormalized landscape has n local minima situated at positions $x_1, x_3, \dots, x_{2n-1}$ with the potentials u_1, \dots, u_{2n-1} and $(n-1)$ local maxima situated at positions $x_2, x_4, \dots, x_{2n-2}$ with potentials u_2, \dots, u_{2n-2} . Again, more precise and explicit definitions are given in Appendix 14.10, with a derivation of the normalization

$$Z(U_L, x_L; U_R, x_R) = \sum_{n=1}^K \int du_1 \dots du_{2n-1} \theta(U_L - u_1) \theta(U_R - u_{2n-1}) \prod_{i=1, n-1} \theta(u_{2i} - u_{2i-1} - \Gamma) \theta(u_{2i} - u_{2i+1}) \sum_{x_L \leq x_1 < x_2 < x_3 < x_{2n-1} \leq x_R} N_\Gamma^{(2n)}(U_L, x_L; u_1, x_1; \dots u_{2n-1}, x_{2n-1}; U_R, x_R) \quad (14.25, 14.26)$$

The normalization of the measure for the renormalized landscape thus coincides with the normalization of the measure for the initial landscape (14.25, 14.26).

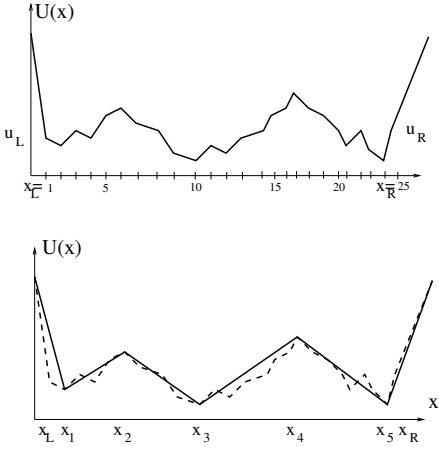


Figure 5: *top* One realization of the initial random landscape $U(x)$ drawn from the probability distribution $\mathcal{P}[U]$ with $N = 25$. It contributes to $N_{\text{init}}^{(2n)}(x_L, u_L; u_1, x_1; \dots u_{2n-1}, x_{2n-1}; x_R, u_R)$ with $n = 6$ and $(x_1, \dots, x_{11}) = (2, 3, 4, 6, 10, 11, 12, 17, 21, 22, 24)$ since only $2n - 1 = 11$ points of the initial landscape are actually extrema. *bottom* The corresponding realization of the renormalized landscape where all barriers smaller than some given Γ have been removed. It contributes to $N_{\Gamma}^{(2n')}(x_L, u_L; u_1, x_1; \dots u_{2n'-1}, x_{2n'-1}; x_R, u_R)$ with $n' = 3$. As in the top figure, the straight lines are drawn only for convenience, the landscape being defined solely by the set of (x_i, u_i) , $i = 1, \dots, 2n' - 1 = 5$ of remaining extrema, together with the right and left boundary points.

The $N_{\Gamma}^{(2n)}$ satisfy the RG equation (see Appendix 14.10)

$$\begin{aligned}
 & \partial_{\Gamma} N_{\Gamma}^{(2n)}(x_L, u_L; u_1, x_1; \dots u_{2n-1}, x_{2n-1}; x_R, u_R) \\
 = & \int_{x_L}^{x_1} dy_1 \int_{y_1}^{x_1} dy_2 \int_{u_1}^{+\infty} du' N_{\Gamma}^{(2n+2)}(x_L, u_L; u', y_1; u' + \Gamma, y_2; u_1, x_1; \dots u_{2n-1}, x_{2n-1}; x_R, u_R) \\
 & + \sum_{i=1}^{n-1} \int_{x_{2i}}^{x_{2i+1}} dy_1 \int_{y_1}^{x_{2i+1}} dy_2 \int_{u_{2i+1}}^{u_{2i}-\Gamma} du' N_{\Gamma}^{(2n+2)}(x_L, u_L; \dots; u_{2i}, x_{2i}; u', y_1; u' + \Gamma, y_2; u_{2i+1}, x_{2i+1}; \dots; x_R, u_R) \\
 & + \sum_{i=1}^{n-1} \int_{x_{2i-1}}^{x_{2i}} dy_1 \int_{y_1}^{x_{2i}} dy_2 \int_{u_{2i-1}}^{u_{2i}-\Gamma} du' N_{\Gamma}^{(2n+2)}(x_L, u_L; \dots; u_{2i-1}, x_{2i-1}; u' + \Gamma, y_1; u', y_2; u_{2i}, x_{2i}; \dots; x_R, u_R) \\
 & + \int_{x_{2n-1}}^{x_R} dy_1 \int_{y_1}^{x_R} dy_2 \int_{u_{2n-1}}^{+\infty} du' N_{\Gamma}^{(2n+2)}(x_L, u_L; u_1, x_1; \dots u_{2n-1}, x_{2n-1}; u' + \Gamma, y_1; u', y_2; x_R, u_R) \quad (1)
 \end{aligned}$$

where, for convenience and future applications to continuum limits, we have used the integral symbol instead of the sum, i.e. $\int_y^x dz$ instead of $\sum_{z=y+1}^{x-1}$. These RSRG equation describe the decimation upon increasing Γ and are thus a generalization to an arbitrary landscape of the standard RSRG equations considered in the case of a Brownian landscape (see the formulae (197) and the figure 8 in Ref [4]). It simply expresses that as Γ is increased, pairs of extrema separated by an energy barrier Γ are eliminated. Each term in (14.28) corresponds to possible positions of this pair, as represented in Fig 6, the first and last one corresponding to edge bonds.

The aim of this paper is to find solvable cases where analytical solutions of (14.28) are possible. The general case with arbitrary correlations in the original landscape can only be studied by numerical implementations of the decimation procedure. This has been done, for instance, in the case of a logarithmically correlated landscape in [35]. However, for the initial landscapes that are defined by an initial local measure, we expect that the measure for the renormalized landscape can be decomposed as a product of blocks associated to bonds as we now describe.

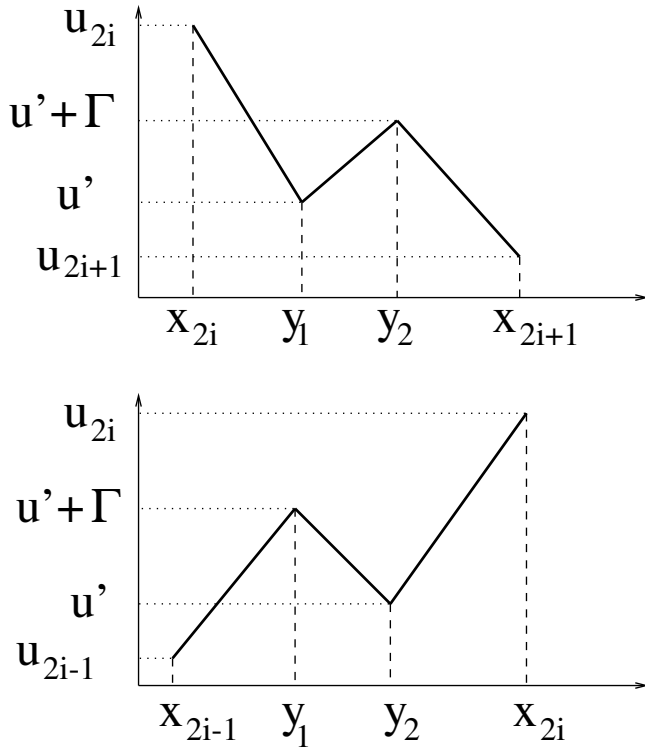


Figure 6: Terms in the RSRG equation (14.28) corresponding to the elimination of two local extrema separated by a potential difference Γ , for a descending bond (top) and ascending (bottom) respectively

14.2.3 Markovian landscapes and Block-product measures

From now on, we will consider “Markovian landscapes”, corresponding to the cases where the probability measure of the initial landscape (14.24) is a product of block measures of the form:

$$\mathcal{P}[U] = \Phi_0(U_1)\Phi_N(U_N) \prod_{i=1}^{N-1} \exp(-S_i[U_{i+1}, U_i]) \quad (14.29)$$

It follows immediately that the probabilities of the renormalized landscape can be written as a product of block probabilities which depend only on the endpoints of the bonds block, all the information inside the bonds have been in a sense integrated out (14.293):

$$N_{\Gamma}^{(2n)}(x_L, u_L; u_1, x_1; \dots u_{2n-1}, x_{2n-1}; x_R, u_R) = E_{\Gamma}^{+}(x_L, u_L; u_1, x_1) B_{\Gamma}^{-}(u_1, x_1; u_2, x_2) B_{\Gamma}^{+}(u_2, x_2; u_3, x_3) \dots B_{\Gamma}^{+}(u_{2n-2}, x_{2n-2}; u_{2n-1}, x_{2n-1}) E_{\Gamma}^{-}(u_{2n-1}, x_{2n-1}; x_R, u_R) \quad (14.30)$$

Note that the blocks $B_{\Gamma}^{\pm}(u_2, x_2; u_3, x_3)$ themselves do not in general satisfy any normalization. The only constraint is the global normalization:

$$Z(u_L, x_L; u_R, x_R) = \sum_{n=1}^K \text{Tr}(E^{+}(B^{-} B^{+})^{n-1} E^{-}) \quad (14.31)$$

where we have used an obvious matrix notation with respect to (x, u) . Each term in this sum, $N^{(2n)} = \text{Tr}(E^{+}(B^{-} B^{+})^{n-1} E^{-})$, represents the probability that the renormalized landscape has exactly $(2n - 1)$ extrema.

The insertion of the decoupled form (14.30) into the RSRG equation (14.28) yields the following RG equations for the block measures

$$\begin{aligned} & \partial_\Gamma E_\Gamma^+ x_L, u_L; u, x) \\ = & \int_{x_L}^x dy_1 \int_{y_1}^x dy_2 \int_u^{+\infty} du' E_\Gamma^+ x_L, u_L; u', y_1) B_\Gamma^- u', y_1; u' + \Gamma, y_2) B_\Gamma^+ u' + \Gamma, y_2; u, x) \end{aligned} \quad (14.32)$$

$$\begin{aligned} & \partial_\Gamma B_\Gamma^- u, x; u'', x'') \\ = & \int_x^{x''} dy_1 \int_{y_1}^{x''} dy_2 \int_u^{u''-\Gamma} du' B_\Gamma^- u, x; u' + \Gamma, y_1) B_\Gamma^+ u' + \Gamma, y_1; u', y_2) B_\Gamma^- u', y_2; u'', x'') \end{aligned} \quad (14.33)$$

$$\begin{aligned} & \partial_\Gamma B_\Gamma^+ u, x; u'', x'') \\ = & \int_x^{x''} dy_1 \int_{y_1}^{x''} dy_2 \int_{u''}^{u-\Gamma} du' B_\Gamma^+ u, x; u', y_1) B_\Gamma^- u', y_1; u' + \Gamma, y_2) B_\Gamma^+ u' + \Gamma, y_2; u'', x'') \end{aligned} \quad (14.34)$$

$$\begin{aligned} & \partial_\Gamma E_\Gamma^- u, x; x_R, u_R) \\ = & \int_{x_L}^x dy_1 \int_{y_1}^x dy_2 \int_u^{+\infty} du' B_\Gamma^- u, x; u' + \Gamma, y_1) B_\Gamma^+ u' + \Gamma, y_1; u', y_2) E_\Gamma^- u', y_2; x_R, u_R) \end{aligned} \quad (14.35)$$

Again note that the factorized form and these RG equations hold either for discrete space (with the abovementioned correspondence between the integral symbol and the sum) as well as in the continuum limit where the space cutoff goes to zero.

14.3 Explicit Solutions for a class of models

14.3.1 Soluble models

To be more specific we now consider the continuum models of Markovian landscapes where the potential $U(x)$ is a stochastic process defined by the Langevin equation (14.19). This process corresponds to functional integration with the Fokker-Planck measure

$$\mathcal{P}[U] \sim \exp - \int dx \frac{1}{4} \left(\frac{dU(x)}{dx} - F[U(x), x] \right)^2 + \frac{1}{2} \partial_U F[U(x), x] \quad (14.36)$$

In the following, we will give an explicit solution for the landscape renormalization for all the cases where *the Fokker-Planck measure can be rewritten as a Schrodinger measure*

$$\mathcal{P}[U] \sim \exp - \int dx \frac{1}{4} \left(\frac{dU(x)}{dx} \right)^2 + V[U(x)] \quad (14.37)$$

up to boundaries terms. The two important cases are the toy model defined in (14.1) and the stationary landscapes (14.21).

Toy model

The toy model (14.1) corresponds to the case where the force in the Langevin equation (14.19) is given by (14.20). The Fokker-Planck measure for the toy model can be rewritten as a Schrodinger measure up to boundary terms as follows

$$\exp \left(- \int_{x_1}^{x_2} dx \frac{1}{4} \left(\frac{dU}{dx} - \mu x \right)^2 \right) = e^{h(u_1, x_1) - h(u_2, x_2)} \exp \left(- \int_{x_1}^{x_2} dx \frac{1}{4} \left(\frac{dU}{dx} \right)^2 + \frac{1}{2} \mu U \right) \quad (14.38)$$

where the boundary terms reads

$$h(u, x) = -\frac{\mu}{2} x u + \frac{\mu^2}{12} x^3 \quad (14.39)$$

The associated Schrodinger potential is linear in U

$$V[U] = \frac{1}{2} \mu U \quad (14.40)$$

Stationary landscapes

The stationary landscapes correspond to the cases where the force in the Langevin equation (14.19) is independent of space (14.21). The transformation from Fokker-Planck measure to Schrodinger measure up to boundary terms is as follows:

$$\begin{aligned} & \exp\left(-\int_{x_1}^{x_2} dx\right) \frac{1}{4} \left(\frac{dU}{dx} - F[U]\right)^2 + \frac{1}{2} F'[U] \Big) \\ &= e^{\frac{1}{2}(W[U(x_1)] - W[U(x_2)])} \exp\left(-\int_{x_1}^{x_2} dx\right) \frac{1}{4} \left(\frac{dU}{dx}\right)^2 + \frac{1}{4} F[U]^2 + \frac{1}{2} F'[U] \Big) \end{aligned} \quad (14.41)$$

The associated Schrodinger potential reads

$$V[U] = \frac{1}{4} F[U]^2 + \frac{1}{2} F'[U] = \frac{1}{4} W'[U]^2 - \frac{1}{2} W''[U] \quad (14.42)$$

14.3.2 Properties of the blocks for a Schrodinger measure

For a Schrodinger measure (14.37), the important simplification comes from the translation invariance of the blocks

$$B_{\Gamma}^{\pm} u, x; u'', x'' = B_{\Gamma}^{\pm} u; u''; x'' - x \quad (14.43)$$

$$E_{\Gamma}^{+} u_L, x_L; u, x = E_{\Gamma}^{+} (u_L, u, x - x_L) \quad (14.44)$$

$$E_{\Gamma}^{-} u, x; u_R, x_R = E_{\Gamma}^{-} (u, u_R, x_R - x) \quad (14.45)$$

which will allow us to obtain explicit expressions for the Laplace transforms

$$B_{\Gamma}^{\pm}(u; u''; p) = \int_0^{+\infty} dx B_{\Gamma}^{\pm}(u; u''; x) \quad (14.46)$$

$$E_{\Gamma}^{\pm}(u; u''; p) = \int_0^{+\infty} dx E_{\Gamma}^{\pm}(u; u''; x)$$

The symmetry $x \rightarrow -x$ moreover implies:

$$B_{\Gamma}^{+} u, x; u'', x'' = B_{\Gamma}^{-} u, -x; u'', -x'' \quad (14.47)$$

so that in Laplace we have the simple relations

$$B_{\Gamma}^{+} u; u''; p = B_{\Gamma}^{-} u''; u; p \quad (14.48)$$

$$E_{\Gamma}^{+} u; u''; p = E_{\Gamma}^{-} u''; u; p \quad (14.49)$$

To determine these functions, we now present two methods which are rather different in spirit and complementary.

14.3.3 Explicit solution via a path-integral approach

For the Schrodinger measure, the block B_{Γ}^{-} can be represented by a path-integral

$$B_{\Gamma}^{-} u_0, x_0; u, x = \int_{U_{x_0}=u_0}^{U_x=u} DU \exp\left(-\int_{x_0}^x dy\right) \frac{1}{4} \left(\frac{dU}{dy}\right)^2 + V[U] \Theta_{\Gamma}^{-}(x_0, x; U) \quad (14.50)$$

which is defined for $u \geq u_0 + \Gamma$ and where the symbol $\Theta_{\Gamma}^{-}(x_0, x; U)$ constraints the paths to remain in the interval $]u_0, u[$ for $x_0 < y < x$ and to not perform any returns of more than Γ .

As shown in Appendix (14.12.1), this constrained path-integral can be expressed in Laplace transform with respect to $(x - x_0)$ as

$$\begin{aligned} B_{\Gamma}^{-}(u_0, u, p) &\equiv \int_{x_0}^{+\infty} dx e^{-px} B_{\Gamma}^{-}(u_0, x_0; u, x) = \frac{1}{K(u_0, u_0 + \Gamma, p)} \exp) - \int_{u_0 + \Gamma}^u du' \partial_2 \ln K(u' - \Gamma, u_0, p) \\ &= \frac{1}{K(u - \Gamma, u, p)} \exp) \int_{u_0}^{u - \Gamma} dv \partial_1 \ln K(v, v + \Gamma, p) \end{aligned} \quad (14.52)$$

(the two expressions are equivalent via an integration by part) in terms of the function

$$K(u, v, p) = \frac{1}{w(p)} (\phi_1(u, p) \phi_2(v, p) - \phi_2(u, p) \phi_1(v, p)) \quad (14.53)$$

where $\phi_1(u, p)$ and $\phi_2(u, p)$ are two linearly independent solutions of the equation

$$\partial_u^2 F - V(u)F = pF \quad (14.54)$$

of wronskian)independent of u)

$$w(p) = \phi_1(u, p) \phi_2'(u, p) - \phi_2(u, p) \phi_1'(u, p) \quad (14.55)$$

Similarly for the edges, the final result reads (see Appendix 14.12.1)

$$E_{\Gamma}^{-}(u, u_R, p) = \exp) \int_u^{u_R} \partial_1 \ln K(u', u' + \Gamma, p) du' \quad (14.56)$$

14.3.4 Explicit solution from the RSRG equations

The RG equations for the blocks B (14.35) are simpler in Laplace variables:

$$\partial_{\Gamma} B_{\Gamma}^{-}(u; u''; p) = \int_u^{u'' - \Gamma} du' B_{\Gamma}^{-}(u; u' + \Gamma; p) B_{\Gamma}^{+}(u' + \Gamma; u'; p) B_{\Gamma}^{-}(u'; u''; p) \quad (14.57)$$

$$\partial_{\Gamma} B_{\Gamma}^{+}(u; u''; p) = \int_{u''}^{u - \Gamma} du' B_{\Gamma}^{+}(u; u'; p) B_{\Gamma}^{-}(u'; u' + \Gamma; p) B_{\Gamma}^{+}(u' + \Gamma; u''; p) \quad (14.58)$$

Using the symmetry (14.49), we obtain that $B_{\Gamma}^{-}(u''; u; p)$ satisfies the closed RG equation

$$\partial_{\Gamma} B_{\Gamma}^{-}(u; u''; p) = \int_u^{u'' - \Gamma} du' B_{\Gamma}^{-}(u; u' + \Gamma; p) B_{\Gamma}^{-}(u'; u' + \Gamma; p) B_{\Gamma}^{-}(u'; u''; p) \quad (14.59)$$

and the edges satisfy

$$\partial_{\Gamma} E_{\Gamma}^{-}(u, u_R, p) = \int_u^{+\infty} du' B_{\Gamma}^{-}(u; u' + \Gamma; p) B_{\Gamma}^{-}(u'; u' + \Gamma; p) E_{\Gamma}^{-}(u', u_R, p) \quad (14.60)$$

As shown in Appendix (14.12.2), a class of solutions of the RSRG equation (14.59) can be found with the factorized Ansatz

$$B_{\Gamma}^{-}(u; u''; p) = A_{\Gamma}^L(u, p) A_{\Gamma}^R(u'', p) \quad (14.61)$$

provided that the function Φ defined by

$$\partial_1 \partial_2 \Phi(u, u + \Gamma) = B_{\Gamma}^{-}(u; u + \Gamma; p)^2 \quad (14.62)$$

satisfies the following Liouville equation

$$\partial_1 \partial_2 \Phi(u_1, u_2) = \exp(-2\Phi(u_1, u_2)) \quad (14.63)$$

The general solution, discussed in more details in Appendix (14.12.2), can be written

$$\Phi(u_1, u_2) = \ln \left[\frac{1}{\sqrt{w_L w_R}} (\psi_L^{(1)}(u_1) \psi_R^{(2)}(u_2) - \psi_L^{(2)}(u_1) \psi_R^{(1)}(u_2)) \right] \quad (14.64)$$

where $\psi_L^{(1,2)}(u)$ and $\psi_R^{(1,2)}(u)$ are respectively two pairs of two linearly independent solutions of the two Schrodinger equations:

$$\psi_L''(u) = V_L(u, p) \psi_L(u) \quad (14.65)$$

$$\psi_R''(u) = V_R(u, p) \psi_R(u) \quad (14.66)$$

where $V_L(u, p)$ and $V_R(u, p)$ are arbitrary potentials, and where the constants $w_{L,R}$ are the two wronskian, i.e $w_{L,R} = \psi_{L,R}^{(1)}(u) \psi_{L,R}^{(2)'}(u) - \psi_{L,R}^{(2)}(u) \psi_{L,R}^{(1)'}(u)$.

The results of the path-integral approach (14.50) are recovered with the following choice:

$$V_L(u, p) = V_R(u, p) = V(u) + p \quad (14.67)$$

with the identifications $\psi_L^{(1)} = \psi_R^{(1)}$, $\psi_L^{(2)} = \psi_R^{(2)}$ and

$$\Phi(u_1, u_2) = \ln K(u_1, u_2) \quad (14.68)$$

Thus by solving the RSRG equations with the following properties: (i) factorization in blocks (ii) statistical translational invariance and parity of the blocks (iii) an additional factorization property in Laplace variable (14.61), we have found general solutions involving two arbitrary potentials $V_L(u, p)$ and $V_R(u, p)$. This method does not use the knowledge of the initial landscape they correspond to. This is a familiar feature of RG equations, fixed points can be found under symmetry assumptions but finding the basin of attraction is harder. We have showed that the special choice (14.67) corresponds to the case of initial Schrodinger measure (14.50) that we have independently solved via the path-integral method. It would be of course of great interest to understand whether other choices for the potentials $V_L(u, p)$ and $V_R(u, p)$ yields sensible solutions for the landscape problem. However this analysis goes beyond the scope of this paper and it is left as an open question for future investigation. Note also that all formulae here and in Appendix (14.12.2) hold for discrete space, under the same assumptions (defining Laplace transforms as $B^\pm(u, u'', p) = \sum_{x=1}^{+\infty} B^\pm(u, u'', x)$), and one could also check whether discrete landscape could also be solved by these methods.

Note finally that although fixed point (i.e. continuum) models can alternatively be solved by the constrained path integral method, the RSRG is in principle more powerful. Here for instance we only need assumptions (i) to (iii) to hold only asymptotically at large Γ . In principle the full convergence to the fixed point could be also studied, as in any RG method, and universal results established for a broader set of discrete models within the basin of attraction of the fixed points found here.

In the following we restrict to the case of Schrodinger measures corresponding to the choice (14.67) and use the explicit solutions derived above to study the case of the toy model (14.1) in details and the case of stationary landscapes (14.21) more briefly.

14.4 Statistics of extrema in the toy model

In this section, we apply the general construction of the probability measure of renormalized landscape to the particular case of the toy model (14.1). We start by giving the expressions for the blocks before constructing the full measure.

14.4.1 Blocks of the toy model in terms of Airy functions

We have seen in (14.38) how the functional integrals for the process $dU/dx = \mu x + \eta(x)$ could be recast *up to boundary terms* into functional integrals of the Schrodinger-type. The Fokker-Planck blocks thus read (14.38)

$$B_{\Gamma}^{\pm} u_0, x_0, u_1, x_1) = e^{h(u_0, x_0) - h(u_1, x_1)} \tilde{B}_{\Gamma}^{\pm} u_0, u_1, x_1 - x_0) \quad (14.69)$$

$$E_{\Gamma}^{\pm} u_0, u_1, x_1 - x_0) = e^{h(u_0, x_0) - h(u_1, x_1)} \tilde{E}_{\Gamma}^{\pm} u_0, x_0, u_1, x_1) \quad (14.70)$$

in terms of the Schrodinger blocks \tilde{B} \tilde{E} given in Laplace (14.52, 14.56) by

$$\tilde{B}_{\Gamma}^{-} u_0, u, p) = \tilde{B}_{\Gamma}^{+} u, u_0, p) = \frac{1}{K(u - \Gamma, u, p)} \exp \left(\int_{u_0}^{u - \Gamma} dv \partial_1 \ln K(v, v + \Gamma, p) \right) \quad (14.71)$$

$$\tilde{E}_{\Gamma}^{+} (u_b, u, p) = \tilde{E}_{\Gamma}^{-} (u, u_b, p) = \exp \left(\int_u^{u_b} \partial_1 \ln K(u', u' + \Gamma, p) du' \right) \quad (14.72)$$

The function K defined in (14.53) now corresponds to the problem with the Schrodinger potential $V[U] = \frac{1}{2} \mu U$ (14.40). Two independent solutions of the Schrodinger equation are the Airy functions (14.359)

$$\phi_1(u, p) = Ai(au + bp) \quad (14.73)$$

$$\phi_2(u, p) = Bi(au + bp) \quad (14.74)$$

where

$$a = \left(\frac{\mu}{2} \right)^{1/3} \quad (14.75)$$

$$b = \frac{1}{a^2} \quad (14.76)$$

a is the characteristic inverse energy, whereas b represents the characteristic length scale of the toy model. The wronskian of the two solutions (14.74) reads

$$w(p) = \frac{a}{\pi} \quad (14.77)$$

and thus the function K reads (14.53)

$$K(u, v, p) = \frac{\pi}{a} Ai(au + bp) Bi(av + bp) - Bi(au + bp) Ai(av + bp) \quad (14.78)$$

Although there are no obvious simple expressions for the integrals involved in the blocks (14.72), in calculations it will be often useful to extract the leading behavior for $u < v$ by rewriting

$$K(u, v, p) = \frac{\pi}{a} Ai(au + bp) Bi(av + bp) \left(1 - \frac{Bi(au + bp) Ai(av + bp)}{Ai(au + bp) Bi(av + bp)} \right) \quad (14.79)$$

and

$$\partial_1 \ln K(u, v, p) = \partial_u \ln Ai(au + bp) + \partial_u \ln \left(1 - \frac{Bi(au + bp) Ai(av + bp)}{Ai(au + bp) Bi(av + bp)} \right) \quad (14.80)$$

$$(14.81)$$

14.4.2 Normalization of the full Measure for the renormalized landscape

As explained in Section (14.2), we consider left and right reflecting boundaries, i.e. we impose $u(x_L) = u_L$ and $u(x_R) = u_R$ with $u(x_L^-) = +\infty$ and $u(x_R^+) = +\infty$. Then the normalization of the measure is (14.36):

$$Z(u_L, x_L; u_R, x_R) = \int_{u(x_L)=u_L}^{u(x_R)=u_R} DU e^{-\frac{1}{4} \int_{x_L}^{x_R} dx \left(\frac{dU}{dx} - \mu x \right)^2} = \frac{1}{\sqrt{4\pi(x_R - x_L)}} e^{-\frac{(u_R - u_L - \frac{\mu}{2}x_R^2 + \frac{\mu}{2}x_L^2)^2}{4(x_R - x_L)}} \quad (14.82)$$

The decomposition into blocks at scale Γ reads (14.30)

$$Z(u_L, x_L, u_R, x_R) = \sum_{n=1}^{+\infty} \int \prod_{i=1}^{2n-1} du_i dx_i E_{\Gamma}^+(u_L, x_L; u_1, x_1) B_{\Gamma}^-(u_1, x_1; u_2, x_2) \dots B_{\Gamma}^+(u_{2n-2}, x_{2n-2}; u_{2n-1}, x_{2n-1}) E_{\Gamma}^-(u_{2n-1}, x_{2n-1}; u_R, x_R) \quad (14.83)$$

$$= e^{h(u_L, x_L) - h(u_R, x_R)} \sum_{n=1}^{+\infty} \int \prod_{i=1}^{2n-1} du_i dx_i \tilde{E}_{\Gamma}^+(u_L, u_1, x_1 - x_L) \tilde{B}_{\Gamma}^-(u_1, u_2, x_2 - x_1) \dots \tilde{B}_{\Gamma}^+(u_{2n-2}, u_{2n-1}, x_{2n-1} - x_{2n-2}) \tilde{E}_{\Gamma}^-(u_{2n-1}, u_R, x_R - x_{2n-1}) \quad (14.84)$$

i.e. the boundary terms involving the function h in the transformation from Fokker-Planck to Schrodinger (14.38) cancel between two successive blocks, and thus only survive at the boundaries of the full system (x_L, x_R) .

14.4.3 Alternative expression of the full measure using barriers

The invariance by a global shift in the energy u of the Fokker-Planck blocks

$$B_{\Gamma}^-(u_0, x_0; u_1, x_1) = B_{\Gamma}^-(0, x_0; u_1 - u_0, x_1) \quad (14.85)$$

$$B_{\Gamma}^+(u_0, x_0; u_1, x_1) = B_{\Gamma}^+(u_0 - u_1, x_0; 0, x_1) \quad (14.86)$$

translates into the following properties for the Schrodinger blocks (14.70) using the expression of the function h (14.39)

$$\begin{aligned} \tilde{B}_{\Gamma}^-(u_0, u_1, x_1 - x_0) &= e^{h(0, x_0) - h(u_0, x_0) + h(u_1, x_1) - h(u_1 - u_0, x_1)} \tilde{B}_{\Gamma}^-(0, u_1 - u_0, x_1 - x_0) \\ &= e^{\frac{\mu}{2}x_0u_0 - \frac{\mu}{2}x_1u_0} \tilde{B}_{\Gamma}^-(0, u_1 - u_0, x_1 - x_0) \end{aligned} \quad (14.87)$$

$$\begin{aligned} \tilde{B}_{\Gamma}^+(u_0, u_1, x_1 - x_0) &= e^{h(u_0 - u_1, x_0) - h(u_0, x_0) + h(u_1, x_1) - h(0, x_1)} \tilde{B}_{\Gamma}^+(u_0 - u_1, 0, x_1 - x_0) \\ &= e^{\frac{\mu}{2}x_0u_1 - \frac{\mu}{2}x_1u_1} \tilde{B}_{\Gamma}^+(u_0 - u_1, 0, x_1 - x_0) \end{aligned} \quad (14.88)$$

and similarly for the edge blocks E . An alternative expression of (14.84) containing only differences of energies is thus given by

$$\begin{aligned} Z(u_L, x_L, u_R, x_R) &= \sum_{n=1}^{+\infty} \int \prod_{i=1}^{2n-1} du_i dx_i [e^{\frac{\mu^2}{12}x_L^3 - \frac{\mu}{2}x_L(u_L - u_1)} \tilde{E}_{\Gamma}^+(u_L - u_1, 0, x_1 - x_L)] \\ &\quad \tilde{B}_{\Gamma}^-(0, u_2 - u_1, x_2 - x_1) e^{\frac{\mu}{2}x_2(u_3 - u_1)} \tilde{B}_{\Gamma}^+(u_2 - u_3, 0, x_3 - x_2) \\ &\quad \tilde{B}_{\Gamma}^-(0, u_4 - u_3, x_4 - x_3) e^{\frac{\mu}{2}x_4(u_5 - u_3)} \tilde{B}_{\Gamma}^+(u_4 - u_5, 0, x_5 - x_4) \dots \\ &\quad \tilde{B}_{\Gamma}^-(0, u_{2n-2} - u_{2n-3}, x_{2n-2} - x_{2n-3}) e^{\frac{\mu}{2}x_{2n-2}(u_{2n-1} - u_{2n-3})} \tilde{B}_{\Gamma}^+(u_{2n-2} - u_{2n-1}, 0, x_{2n-1} - x_{2n-2}) \\ &\quad [e^{+\frac{\mu}{2}x_R(u_R - u_{2n-1}) - \frac{\mu^2}{12}x_R^3} \tilde{E}_{\Gamma}^-(0, u_R - u_{2n-1}, x_R - x_{2n-1})] \end{aligned} \quad (14.89)$$

where

$$\tilde{B}_\Gamma^-(0, F, p) = \tilde{B}_\Gamma^+(F, 0, p) = \frac{1}{K(F - \Gamma, F, p)} \exp \int_0^{F-\Gamma} dv \partial_1 \ln K(v, v + \Gamma, p) \quad (14.90)$$

$$\tilde{E}_\Gamma^-(0, F, p) = \tilde{E}_\Gamma^+(F, 0, p) = \exp + \int_0^F dv \partial_1 \ln K(v, v + \Gamma, p) \quad (14.91)$$

14.4.4 Full measure using barriers for free boundary conditions

The normalization (14.82) concerns fixed boundary conditions (u_L, u_R) and depends only on the difference $(u_R - u_L)$ since there is an invariance with respect to a global shift of all the energies u . For free boundary conditions, we need to sum over the end-potential u_R with fixed u_L , which of course yields a normalization to 1

$$Z_{free}(x_L; x_R) = \int_{-\infty}^{+\infty} du_R Z(u_L, x_L; u_R, x_R) = 1 \quad (14.92)$$

The decomposition into blocks at scale Γ now reads using the formulation in terms of barriers (14.89) that we now denote by $F_L = u_L - u_1$, $F_1 = u_2 - u_1$, ...

$$\begin{aligned} Z_{free}(x_L; x_R) = 1 = & \sum_{n=1}^{+\infty} \int_0^{+\infty} dF_L \int_0^{+\infty} dF_R \int_\Gamma^{+\infty} \prod_{i=1}^{2n-2} dF_i \int_{x_L < x_1 < \dots < x_{2n-1} < x_R} \prod_{j=1}^{2n-1} dx_j \\ & [e^{\frac{\mu^2}{12} x_L^3 - \frac{\mu}{2} x_L F_L} \tilde{E}_\Gamma^+ F_L, 0, x_1 - x_L)] \\ & \tilde{B}_\Gamma^- 0, F_1, x_2 - x_1) e^{\frac{\mu}{2} x_2 (F_1 - F_2)} \tilde{B}_\Gamma^+ F_2, 0, x_3 - x_2) \\ & \tilde{B}_\Gamma^- 0, F_3, x_4 - x_3) e^{\frac{\mu}{2} x_4 (F_3 - F_4)} \tilde{B}_\Gamma^+ F_4, 0, x_5 - x_4) \dots \\ & \tilde{B}_\Gamma^- 0, F_{2n-3}, x_{2n-2} - x_{2n-3}) e^{\frac{\mu}{2} x_{2n-2} (F_{2n-3} - F_{2n-2})} \tilde{B}_\Gamma^+ F_{2n-2}, 0, x_{2n-1} - x_{2n-2}) \\ & [e^{\frac{\mu}{2} x_R F_R - \frac{\mu^2}{12} x_R^3} \tilde{E}_\Gamma^- 0, F_R, x_R - x_{2n-1}]] \end{aligned} \quad (14.93)$$

14.4.5 Full measure using barriers on the infinite line

Of particular interest is of course the limit of the infinite system $x_L \rightarrow -\infty$ and $x_R \rightarrow \infty$. We define the following function that describes the right boundary in the limit $x_R \rightarrow \infty$

$$g_\Gamma(x) \equiv \lim_{x_R \rightarrow \infty} \int_0^{+\infty} dF_R [e^{\frac{\mu}{2} x_R F_R - \frac{\mu^2}{12} x_R^3} \tilde{E}_\Gamma^- 0, F_R, x_R - x)] \quad (14.94)$$

Using (14.72)

$$g_\Gamma(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda}{2\pi} e^{-i\lambda x} \lim_{x_R \rightarrow \infty} \left[e^{-\frac{\mu^2}{12} x_R^3 + i\lambda x_R} \int_0^{+\infty} dF e^{\frac{\mu}{2} x_R F} e^{-\int_0^F du \partial_1 \ln K(u, u + \Gamma, i\lambda) du} \right] \quad (14.95)$$

In the limit $x_R \rightarrow \infty$, the integral over F is dominated by a saddle with F large. Using (14.81) it is convenient to rewrite

$$\begin{aligned} \partial_1 \ln K(F, F + \Gamma, i\lambda) &= \partial_F \ln Ai(aF + bi\lambda) - \psi_\Gamma(F, \lambda) \\ \psi_\Gamma(F, \lambda) &= \frac{a Ai(a(F + \Gamma) + bi\lambda)}{\pi Ai(aF + bi\lambda) [Ai(aF + bi\lambda) Bi(a(F + \Gamma) + bi\lambda) - Bi(aF + bi\lambda) Ai(a(F + \Gamma) + bi\lambda)]} \end{aligned} \quad (14.96)$$

A saddle-point analysis with the asymptotic behavior (14.363) immediately gives

$$\int_0^{+\infty} d\zeta e^{\zeta y} Ai(\zeta + b) \underset{y \rightarrow \infty}{\simeq} e^{\frac{1}{3} y^3 - by} \quad (14.98)$$

As a consequence, we get

$$g_\Gamma(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda}{2\pi} e^{-i\lambda x} \frac{1}{aAi(ib\lambda)} e^{-\int_0^{+\infty} du \psi_\Gamma(u, \lambda)} \quad (14.99)$$

Similarly, the other boundary $x_L \rightarrow -\infty$ yields

$$\lim_{x_L \rightarrow -\infty} \int_0^{+\infty} dF_L [e^{\frac{\mu^2}{12} x_L^3 - \frac{\mu}{2} x_L F_L} \tilde{E}_\Gamma^+) F_L, 0, x - x_L] = g_\Gamma(-x) \quad (14.100)$$

As a consequence, the full measure using barriers on the infinite line reads (14.93)

$$Z_{free}(-\infty; +\infty) = 1 = \sum_{n=1}^{+\infty} \int_\Gamma^{+\infty} \prod_{i=1}^{2n-2} dF_i \int_{x_1 < \dots < x_{2n-1}} \prod_{j=1}^{2n-1} dx_j g_\Gamma(-x_1) \tilde{B}_\Gamma^-(0, F_1, x_2 - x_1) e^{\frac{\mu}{2} x_2 (F_1 - F_2)} \tilde{B}_\Gamma^+(F_2, 0, x_3 - x_2) \dots \quad (14.101)$$

$$\tilde{B}_\Gamma^-(0, F_{2n-3}, x_{2n-2} - x_{2n-3}) e^{\frac{\mu}{2} x_{2n-2} (F_{2n-3} - F_{2n-2})} \tilde{B}_\Gamma^+(F_{2n-2}, 0, x_{2n-1} - x_{2n-2}) g_\Gamma(x_{2n-1}) \quad (14.102)$$

14.5 Boltzmann equilibrium at low temperatures of the toy model

In this section, we use the explicit measure of the renormalized landscapes of the toy model derived in the previous section to compute various observables that characterize the equilibrium of the toy model (14.1) on the full line $] -\infty, +\infty[$ at low temperature. For $T = 0$, we need to compute the distribution over samples of the position of absolute minimum energy on the full line. For small T , we need to compute the probabilities of configurations with nearly degenerate minima which govern the thermal fluctuations.

14.5.1 Distribution of the position at zero temperature

To obtain the distribution of the position of absolute minimum energy, we need the final state of the renormalized landscape, corresponding to the $\Gamma \rightarrow \infty$ limit, where all internal barriers have been eliminated. The decomposition (14.102) then reduces to the term $n = 1$ that contains only the boundary blocks

$$Z_{free}(-\infty; +\infty) = 1 = \int_{-\infty}^{+\infty} dx g_\infty(-x) g_\infty(x) \quad (14.103)$$

where (14.99)

$$g_\infty(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda}{2\pi} \frac{e^{-i\lambda x}}{aAi(bi\lambda)} \quad (14.104)$$

since the function ψ_Γ (14.97) vanishes for $\Gamma \rightarrow \infty$. The distribution of the position x of the minimum on $] -\infty, +\infty[$ reads

$$P_{]-\infty, +\infty[}(x) = g_\infty(x) g_\infty(-x) \quad (14.105)$$

in agreement with [37, 28]. The normalization is easily checked with the relation $b = 1/a^2$ and the properties (14.361) (14.364)

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx P(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda}{2\pi} \frac{1}{a^2 Ai(ib\lambda)^2} = \frac{1}{2i} \left[\frac{Bi(z)}{Ai(z)} \right]_{z=-i\infty}^{z=+i\infty} = 1 \quad (14.106)$$

Let us now describe the asymptotic behaviors of this distribution. The Airy function $Ai(z)$ has an infinity of poles which all are on the negative real axis: the largest one is $e_1 = -2.33810741..$ where $Ai'(-|e_1|) = 0.70121082$, the second one is $e_2 = -4.08794944..$ where $Ai'(-|e_2|) = -0.80311137$ and so on. For $x < 0$, we may deform the contour in the complex plane to express the function g as a series over the zeroes $(-|e_s|)$ of the Airy function

$$g_\infty(x < 0) = a \sum_{s=1}^{+\infty} \frac{1}{Ai'(-|e_s|)} e^{-a^2|e_s||x|} \quad (14.107)$$

Thus $g(x)$ decays exponentially for $x \rightarrow -\infty$. For $x > 0$, we may shift the contour integration $\lambda \rightarrow \lambda - ic$

$$g_\infty(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda}{2\pi} \frac{e^{-i\lambda x - cx}}{a Ai(bi\lambda + bc)} \quad (14.108)$$

Assuming c large, we replace the function Ai by its asymptotic behavior (14.363)

$$g_\infty(x) = \frac{1}{a\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\lambda (b(c + i\lambda))^{1/4} e^{-x(c+i\lambda) + \frac{2}{3}(b(c+i\lambda))^{3/2}} \quad (14.109)$$

A saddle-point analysis leads to the choice $c = \frac{x^2}{b^3}$ and to the asymptotic behavior

$$g_\infty(x) \underset{x \rightarrow +\infty}{\simeq} 2a^3 x e^{-\frac{1}{3}(a^2 x)^3} \quad (14.110)$$

Putting (14.107) and (14.110) together, the asymptotic behavior of the distribution (14.105) is given by

$$P_{]-\infty, +\infty[}(x) \underset{|x| \rightarrow +\infty}{\simeq} 2a^4 |x| \frac{1}{Ai'(-|a_1|)} e^{-\frac{1}{3}(a^2|x|)^3 - a^2|a_1||x|} \quad (14.111)$$

14.5.2 Moments of the position at zero temperature

Here we obtain the explicit analytical expressions for the disorder averaged thermal moments $\overline{\langle x^p \rangle}$ of the position in the limit of zero temperature, where they are determined by the absolute minimum. They can be derived from the Fourier transform

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{isx} P(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda}{2\pi} \frac{1}{a^2 Ai(ib\lambda) Ai(ib(\lambda + s))} \quad (14.112)$$

as (14.76)

$$\overline{\langle x^p \rangle} = b^p \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{du}{2\pi} \frac{1}{Ai(iu)} \partial_{(iu)}^p \left(\frac{1}{Ai(iu)} \right) = \mu^{-2p/3} C_p \quad (14.113)$$

where C_p are numerical constants given by

$$C_p = 2^{2p/3} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{du}{2\pi} \frac{1}{Ai(iu)} \partial_{(iu)}^p \left(\frac{1}{Ai(iu)} \right) \quad (14.114)$$

For odd p , an integration by parts shows that C_p vanishes, i.e. the odd moments vanish as it should from the symmetry $(x, -x)$. For even p , we may also write

$$C_{2p} = 2^{4p/3} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{du}{2\pi} \frac{1}{Ai(iu)} \partial_{(iu)}^{2p} \left(\frac{1}{Ai(iu)} \right) = 2^{4p/3} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{du}{2\pi} \left(\partial_u^p \left(\frac{1}{Ai(iu)} \right) \right)^2 \quad (14.115)$$

We give the lowest moments:

$$C_2 = -2^{4/3} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{du}{2\pi} \frac{Ai'(iu)^2}{Ai(iu)^4} = \frac{2^{4/3}}{3} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{du}{2\pi} \frac{-iu}{Ai(iu)^2} = 1.05423856519.. \quad (14.116)$$

$$C_4 = 2^{8/3} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{du}{2\pi} \frac{(iu - 2 \frac{Ai'(iu)^2}{Ai(iu)^2})^2}{Ai(iu)^2} = 3.15451.. \quad (14.117)$$

These exact results are in reasonable agreement with numerical simulations of Ref. [38] which found $C_2 = 1.05381 \pm .01$ and $3.15441 \pm .04$. It should also be compared with the result of approximate replica methods which give respectively $C_2 = 3/(2\sqrt{\pi})^{2/3} = 1.29038$ (RSB gaussian variational method), $C_2 = 1.00181$ (vector breaking) [38]. Note also the exact result for the ratio $R = C_4/C_2^2 = 2.83827..$ in good agreement with the numerical simulation result $R = 2.84048$, while the replica approximations give respectively $R = 3$ (GVM) and $R = 2.995$ (VB).

14.5.3 Joint distribution of position and energy at zero temperature

To obtain information on the minimal energy on the full line, we need to fix the absolute value of the energy at a given point for all samples. The usual natural choice is of course

$$U(x = 0) = 0 \quad (14.118)$$

Then in the renormalization procedure, we need to keep information on this value, that doesn't a priori appear in the list of extrema. As a consequence, to obtain the joint distribution $P_{]-\infty, +\infty[}(x_0, u_0)$ of the minimal energy $U(x_0) = -u_0$ (with $u_0 \in [0, +\infty[$ and of its position x_0 , we need to consider the renormalized landscapes on the two independent half-lines $] -\infty, 0]$ and $[0, +\infty[$ which have the same statistical properties. More precisely, we have for the case $x_0 > 0$

$$P_{]-\infty, +\infty[}(x_0 > 0, u_0) = P_{[0, \infty[}(x_0, u_0) \int_0^{u_0} du_1 \int_0^{+\infty} dx_1 P_{[0, \infty[}(x_1, u_1) \quad (14.119)$$

where $P_{[0, \infty[}(x_0, u_0)$ is the joint probability that (x_0, u_0) characterizes the absolute minimum on the half-line, and where the integrals represents the probability that the minimum on the other half line is less deep than u_0 . The decomposition (14.93) for the case $x_L = 0$ and $x_R \rightarrow \infty$ becomes in the limit $\Gamma \rightarrow \infty$ using (14.94)

$$Z_{free}(0; +\infty) = 1 = \int_0^{+\infty} dF_L \int_0^{+\infty} dx \tilde{E}_{+\infty}^+ F_L, 0, x) g_\infty(x) \quad (14.120)$$

where g_∞ has been defined in (14.104) and where the edge block \tilde{E}^+ has for Laplace transform in the $\Gamma \rightarrow \infty$

$$\tilde{E}_\infty^+ F, 0, p) = \frac{Ai) aF + bp)}{Ai) bp)} \quad (14.121)$$

As a consequence, the joint distribution for the half line reads

$$P_{[0, \infty[}(x, u) = \tilde{E}_{+\infty}^+ u, 0, x) g_\infty(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda_1}{2\pi} \frac{e^{i\lambda_1 x} Ai(au + bi\lambda_1)}{Ai(bi\lambda_1)} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda_2}{2\pi} \frac{e^{-i\lambda_2 x}}{a Ai(bi\lambda_2)} \quad (14.122)$$

in agreement with [37]. In particular, for $u = 0$ we have

$$P_{[0, \infty[}(x, 0) = \delta(x) g_\infty(0) \quad (14.123)$$

as it should in terms of the function g_∞ (14.104).

For the distribution of the energy u_0 alone, the relation (14.119) becomes after taking into account the two sides $x > 0$ and $x < 0$

$$P_{]-\infty, +\infty[}(u_0) = 2P_{[0, \infty[}(u_0) \int_0^{u_0} du P_{[0, \infty[}(u) = \frac{d}{du_0} \left[\int_0^{u_0} du P_{[0, \infty[}(u) \right]^2 \quad (14.124)$$

where

$$P_{[0, \infty[}(u) = \int_0^{+\infty} dx P_{[0, \infty[}(x, u) = \lim_{p \rightarrow 0} \left(\int_{-i\infty}^{+i\infty} \frac{dz_2}{2i\pi} \frac{1}{aAi(bz_2)} \int_{-i\infty}^{+i\infty} \frac{dz_1}{2i\pi} \frac{Ai(au + bz_1)}{Ai(bz_1)} \frac{1}{p + z_2 - z_1} \right) \quad (14.125)$$

is the distribution of the energy alone on the half-line $[0, +\infty[$. For $u > 0$, we may close the contour in z_1 on the right at infinity to obtain via Cauchy theorem

$$P_{[0, \infty[}(u) = \int_{-i\infty}^{+i\infty} \frac{dz_2}{2i\pi} \frac{Ai(au + bz_2)}{aAi^2(bz_2)} = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda}{2\pi} \frac{Ai(au + bi\lambda)}{aAi^2(bi\lambda)} \quad (14.126)$$

and this expression is also valid for $u = 0$ (14.123).

The expansion near $u = 0$ reads

$$P_{[0, \infty[}(u) \underset{u \rightarrow 0}{\simeq} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda}{2\pi} \frac{Ai(bi\lambda) + auAi'(bi\lambda) + \frac{a^2u^2}{2}Ai''(bi\lambda)}{aAi^2(bi\lambda)} = g_\infty(0) - \frac{u^2}{2}g'_\infty(0) + O(u^3) \quad (14.127)$$

which leads to the following expansion for the full line

$$P_{]-\infty, +\infty[}(u_0) \underset{u_0 \rightarrow 0}{\simeq} 2u_0g_\infty^2(0) + O(u_0^3) \quad (14.128)$$

To obtain the asymptotic behavior for large u , we may shift the contour integration $\lambda \rightarrow \lambda - ic$, and assuming c large, we get via the saddle-point method with the choice $c = \frac{au}{3b}$ (14.363)

$$\begin{aligned} P_{[0, \infty[}(u) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda}{2\pi} \frac{Ai(au + bi\lambda + bc)}{aAi^2(bi\lambda + bc)} \underset{c \rightarrow \infty}{\simeq} \frac{1}{a\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\lambda \frac{(bi\lambda + bc)^{1/2}}{(au + bi\lambda + bc)^{1/4}} e^{\frac{4}{3}(bi\lambda + bc)^{3/2} - \frac{2}{3}(au + bi\lambda + bc)^{3/2}} \\ &\underset{u \rightarrow \infty}{\simeq} \frac{2}{3}a(au)^{1/2}e^{-4\frac{au}{3}})^{3/2} \end{aligned} \quad (14.129)$$

14.5.4 Samples presenting nearly degenerate minima and thermal fluctuations at low temperature

As explained in the introduction, there are remarkable identities [18] for the disorder averages of the thermal cumulants of the position (14.4). It was moreover shown in [18] that the result (14.5) for the second cumulant at low temperature contains a finite contribution from the rare configurations presenting two nearly degenerate minima. In this section, we compute the statistical properties of such configurations and show that they actually give the full exact result (14.5).

Configurations with two nearly degenerate minima

It is shown in Appendix (14.13) that the probability to have two nearly degenerate minima separated by an energy difference $\Delta E = \epsilon \rightarrow 0$ and situated at x_1 and x_2 reads

$$\mathcal{D}(\epsilon, x_1, x_2) = \epsilon g_\infty(-x_1) d(x_2 - x_1) g_\infty(x_2) + O(\epsilon^2) \quad (14.131)$$

where the function g_∞ has been defined in (14.104) and where

$$d(y) = a \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda}{2\pi} e^{i\lambda y} \frac{Ai'(ib\lambda)}{Ai(ib\lambda)} \quad (14.132)$$

The total probability density to have two degenerate minima separated by a distance $y > 0$ thus reads

$$D(y) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left(\frac{\mathcal{D}(\epsilon, x_1, x_1 + y)}{\epsilon} \right) = d(y) \int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 g(-x_1) g(x_1 + y) = bd(y) \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda}{2\pi} \frac{e^{-i\lambda y}}{Ai^2(ib\lambda)} \quad (14.133)$$

In Laplace with respect to y we have

$$\hat{D}(p) \equiv \int_0^{+\infty} dy e^{-py} D(y) = a \int_{-i\infty}^{+i\infty} \frac{dz_2}{2\pi i} \frac{1}{Ai^2(z_2)} \int_{-i\infty}^{+i\infty} \frac{dz_1}{2\pi i} \frac{Ai'(z_1)}{Ai(z_1)} \frac{1}{bp + z_2 - z_1} \quad (14.134)$$

In particular, the second moment is given by

$$\int_0^{+\infty} dy y^2 D(y) = \lim_{p \rightarrow 0} \left(\frac{d^2 \hat{D}(p)}{dp^2} \right) \quad (14.135)$$

$$= \lim_{p \rightarrow 0} \left(a \int_{-i\infty}^{+i\infty} \frac{dz_2}{2\pi i} \frac{1}{Ai^2(z_2)} \int_{-i\infty}^{+i\infty} \frac{dz_1}{2\pi i} \frac{Ai'(z_1)}{Ai(z_1)} \frac{2b^2}{(bp + z_2 - z_1)^3} \right) \quad (14.136)$$

$$= ab^2 \int_{-i\infty}^{+i\infty} \frac{dz_2}{2\pi i} \frac{1}{Ai^2(z_2)} \left(\frac{Ai'}{Ai} \right)''(z_2) \quad (14.137)$$

where we have used Cauchy theorem. This last integral may be computed via integration by part, with the help of the following properties of Airy function: the function $f(z) = \frac{Ai'(z)}{Ai(z)}$ satisfies $f'(z) = z - f^2(z)$ and the function $g(z) = \frac{1}{Ai^2(z)}$ satisfies $g'(z) = -2f(z)g(z)$:

$$\int_0^{+\infty} dy y^2 D(y) = \frac{ab^2}{2} \int_{-i\infty}^{+i\infty} \frac{dz_2}{2\pi i} \frac{1}{Ai^2(z_2)} = \frac{ab^2}{2} \left[\frac{Bi(z)}{2iAi(z)} \right]_{z=-i\infty}^{z=+i\infty} = \frac{ab^2}{2} = \frac{1}{\mu} \quad (14.138)$$

with (14.76).

Contribution to the second thermal cumulant at low temperature

The contribution of these configurations with two degenerate minima to the second thermal cumulant of the position (14.5) can be estimated at order T in temperature as follows. The two minima have for respective Boltzmann weights $p = \frac{1}{1+e^{-\beta\epsilon}}$ and $(1-p) = \frac{e^{-\beta\epsilon}}{1+e^{-\beta\epsilon}}$. The variable $(x - \langle x \rangle)$ is $(1-p)(x_1 - x_2)$ with probability p and $p(x_2 - x_1)$ with probability $1-p$, so we get after averaging over ϵ with a flat measure as in the study of the rare events in [4, 9]

$$\overline{\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle} = \overline{p(1-p)(x_1 - x_2)^2} \quad (14.139)$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 \int_{x_1}^{+\infty} dx_2 \int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon \mathcal{D}'(\epsilon = 0, x_1, x_2) \frac{e^{-\epsilon/T}}{(1 + e^{-\epsilon/T})^2} (x_2 - x_1)^2 \quad (14.140)$$

$$= T \int_0^{+\infty} dy D(y) y^2 \quad (14.141)$$

Using (14.138), we exactly find the exact result (14.5). This shows that the thermal fluctuations at low temperature are entirely due the presence of metastable states in rare disordered samples. In particular, the susceptibility

$$\chi \equiv \frac{1}{T} \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 \quad (14.142)$$

has for average a finite value at zero-temperature

$$\bar{\chi} = \frac{1}{\mu} \quad (14.143)$$

but only the samples with two nearly degenerate minima contribute to this zero-temperature value. The typical samples with only one minimum have a susceptibility that vanishes at zero temperature. This type of behavior was also found numerically in [25] and analyzed in [20] for the random directed polymer model.

Contribution to the thermal moments at low temperature

The small- T behavior of the even moments of $(x - \langle x \rangle)$ can be similarly computed

$$\overline{\langle (x - \langle x \rangle)^{2n} \rangle} = \frac{T}{n} \int_0^{+\infty} y^{2n} D(y) + O(T^2) \quad (14.144)$$

The moments of $D(y)$ read, with the same method as in (14.137)

$$\int_0^{+\infty} dy y^k D(y) = a(-1)^k b^k \int_{-i\infty}^{+i\infty} \frac{dz}{2\pi i} \frac{1}{Ai^2(z)} \left(\frac{Ai'}{Ai} \right)^{(k)}(z) = \frac{\sigma^{(k-2)/3}}{\mu^{(2k-1)/3}} m_k \quad (14.145)$$

where m_k are numbers given by

$$m_k = (-1)^k 2^{(2k-1)/3} \int_{-i\infty}^{+i\infty} \frac{dz}{2\pi i} \frac{1}{Ai^2(z)} \left(\frac{Ai'}{Ai} \right)^{(k)}(z) \quad (14.146)$$

Discussion

The comparison between (14.144) and (14.4) shows that there are a lot of cancelations in the disorder averages of the cumulants. This phenomenon was already emphasized in [19] for the random directed polymer, and will be studied in more details in [39] for the toy model as well as in other one-dimensional random systems which do not present the statistical tilt symmetry leading to the identities (14.4).

Another question that needs further explanations and that will be studied in [39] is why the result (14.5) which can be understood at order T by considering only the configurations with two degenerate minima remains true for arbitrary temperature. Indeed, in the light of the above discussion, it would be natural to expect corrections at order T^2 coming from configurations with three degenerate minima and described by the distribution function analogous to (14.131)

$$\mathcal{T}(\epsilon_1, \epsilon_2, x_1, x_2, x_3) = \epsilon_1 \epsilon_2 g_\infty(-x_1) d(x_2 - x_1) d(x_3 - x_2) g_\infty(x_3) \quad (14.147)$$

and so on for configurations with n nearly degenerate minima. One also expect corrections from the thermal width around minima. The study of the roles played by these various effects in different systems is postponed to a future work [39].

14.6 Non-equilibrium dynamics of the toy model

In this section, we study the non-equilibrium dynamics of the toy model by using the full measure of the renormalized landscape of the toy model for an arbitrary scale Γ . We also briefly summarize some results for the RFIM in a field gradient, already discussed in the Introduction.

As in the Sinai model [4], the long-time dynamics is asymptotically entirely determined by the renormalized landscape at scale

$$\Gamma = T \ln t \quad (14.148)$$

in the sense that a particle starting at x_0 at time $t = 0$ will be at time t around the minimum of the renormalized valley at scale Γ that contains the initial position x_0 . As in the Sinai model [4], this method allows to compute asymptotically exact results for scaling variables in the limit $t \rightarrow \infty$ corresponding to large barriers, and to large distances. Here in the toy model, there is a typical scale of energy given by $(1/a)$ and a typical length $b = 1/a^2$ (14.76). As a consequence, we need to define the following scaling variables for the barrier

$$\gamma \equiv a\Gamma = \left(\frac{\mu}{2}\right)^{1/3} T \ln t \quad (14.149)$$

and for the length

$$\tilde{x} = \frac{x}{b} = \left(\frac{\mu}{2}\right)^{2/3} x \quad (14.150)$$

The RSRG method will thus give asymptotic exact results for the dynamics in the double limit $t \rightarrow \infty$ (to have large barriers Γ) and $\mu \rightarrow 0$ (to have large typical scales for energy and length in the toy landscape) with the scaling variables γ and \tilde{x} fixed. For large γ , as studied in previous section, the system will reach equilibrium. For small γ , i.e. when the barrier $\Gamma = T \ln t$ is much smaller than the characteristic energy scale $(1/a)$ of the toy model, the dynamics should look like the Sinai model, where the typical length associated to the dynamics is Γ^2 [4] so that the scaling variable for distance of diffusion during the time t reads in this regime

$$(\Delta X)_{\text{Sinai}} = \frac{\Delta x}{\Gamma^2} = \frac{\Delta \tilde{x}}{\gamma^2} \quad (14.151)$$

We will first consider a global quantity of the whole system: each sample is characterized by an equilibration time t_{eq} corresponding to the largest barrier Γ_{eq} in the system via

$$\Gamma_{eq} = T \ln t_{eq} \quad (14.152)$$

We will compute the distribution over samples of this equilibration time and then characterize the samples which have an anomalously large equilibration time and which thus dominate the long time dynamics. We will then study local quantities, such as the probability density of minima of the renormalized landscape, and the diffusion front, i.e. the generalization of the Kesten distribution of the Sinai model [6, 4] to the case of the toy model.

As discussed in the Introduction, the equilibrium state for the RFIM in a field gradient for large J is obtained by stopping the RSRG at scale $\Gamma = \Gamma_{eq0} = T \ln t_{eq0} = 2J$ at which equilibrium is attained and putting a B domain wall in each minimum and a A domain in each maximum of the renormalized landscape at scale $\Gamma = 2J$. The equilibrium state thus consists in a B domain plus n additional pairs of domains $A - B$, the probability of n with respect to sample being thus $N_{\Gamma=2J}^{(2+2n)}$. The distribution of the total number of domains at equilibrium is thus a scaling function of $\gamma_{eq0} = a2J$. Below we obtain the behavior at large γ_{eq0} of these probabilities for $n = 0, 1$ as well as an estimate of the total number of domains at small γ_{eq0} . Similarly, inserting instead $\Gamma = T \ln t$, one also finds these probabilities for the out of equilibrium system at time t starting from a random (i.e. high temperature) configuration at time zero. The total magnetization reads

$$M = 2 \sum_{\alpha=1}^{N_A} a_{\alpha} - 2 \sum_{\alpha=1}^{N_B} b_{\alpha} \quad (14.153)$$

its probability measure at time t can thus be formally expressed using the full measure for the renormalized landscape at $\Gamma = T \ln t$, and the equilibrium expression obtained using $\Gamma = 2J$. In

the limit of large γ_{eq0} , its probability distribution coincides exactly with the one of the absolute minimum of the toy model given by formula (14.105) setting $M = 2x$.

For non random initial configurations prepared with a single domain B , the equilibration time of this domain is t_{eq} computed below (provided $T \ln t_{eq0} > T \ln t_{eq}$, otherwise additional pairs are created at time t_{eq0} and take positions in the additional deep extrema). If the single domain is A , then it is expelled from the system when the extrema corresponding to the highest barrier is decimated, again the expulsion time is the same $T \ln t_{exp} = T \ln t_{eq}$. Note, interestingly, that if two almost degenerate minima (within energy difference T) exist, the domain wall A will be expelled with finite probabilities towards the two boundaries, and the system will be in a macroscopic mixture of two reversed states (either all spins (+) or all (-)) between times t_{exp} and t_{eq0} (if we assume that $hL \ll J$).

14.6.1 Distribution over samples of the equilibration time

We first study the distribution over samples of the equilibration time t_{eq} at which equilibrium is reached. The probability $\mathcal{P}(t_{eq} < t)$ that the system has already reached equilibrium at time t is directly given by the probability that there remains only one valley at renormalization scale $\Gamma = T \ln t$ in the decomposition (14.102) with (14.99)

$$\mathcal{P}(t_{eq} < t) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx g_{\Gamma}(-x) g_{\Gamma}(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda}{2\pi} \frac{1}{a^2 Ai^2(ib\lambda)} e^{-2 \int_0^{+\infty} dF \psi_{\Gamma}(F, \lambda)} \quad (14.154)$$

where ψ_{Γ} has been defined in (14.97).

It is convenient to rewrite it as a scaling function of γ defined in (14.149)

$$\mathcal{P}(t_{eq} < t) = \Phi(\gamma) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda}{2\pi} \frac{1}{Ai^2(i\lambda)} e^{-2 \int_0^{+\infty} df \tilde{\psi}_{\gamma}(f, \lambda)} \quad (14.155)$$

with

$$\tilde{\psi}_{\gamma}(f, \lambda) = \frac{Ai(f + \gamma + i\lambda)}{\pi Ai(f + i\lambda) [Ai(f + i\lambda) Bi(f + \gamma + i\lambda) - Bi(f + i\lambda) Ai(f + \gamma + i\lambda)]} \quad (14.156)$$

Equivalently, this result describes the probability distribution $P_{max}(\Gamma)$ over samples of the largest barrier $\Gamma = T \ln t_{eq}$ existing in the system

$$P_{max}(\Gamma) = \frac{d}{d\Gamma} \mathcal{P}(t_{eq} < t) = \frac{d}{d\Gamma} \Phi(\gamma) a\Gamma \quad (14.157)$$

Probability of large equilibration times

For large γ , the dominant behavior of the function $\tilde{\psi}_{\gamma}$ (14.156) is found by using (14.363)

$$\frac{Ai(\gamma + f + i\lambda)}{Bi(\gamma + f + i\lambda)} \underset{\gamma \rightarrow \infty}{\simeq} \frac{1}{2} e^{-\frac{4}{3}(\gamma + f + i\lambda)^{3/2}} \quad (14.158)$$

which leads to

$$\tilde{\psi}_{\gamma}(f, \lambda) \underset{\gamma \rightarrow \infty}{\simeq} \frac{ae^{-\frac{4}{3}(\gamma + f + i\lambda)^{3/2}}}{2\pi Ai^2(f + i\lambda) \left[1 - e^{-\frac{4}{3}(\gamma + f + i\lambda)^{3/2}} \frac{Bi(f + i\lambda)}{2Ai(f + i\lambda)} \right]} \quad (14.159)$$

$$\underset{\gamma \rightarrow \infty}{\simeq} \frac{1}{2\pi Ai^2(f + i\lambda)} e^{-\frac{4}{3}\gamma^{3/2} - 2\gamma^{1/2}f + i\lambda + O\left(\frac{1}{\gamma^{1/2}}\right)} \quad (14.160)$$

The change of variable $f = \frac{w}{\sqrt{\gamma}}$ gives

$$\int_0^{+\infty} df \tilde{\psi}_\gamma(f, \lambda) \underset{\gamma \rightarrow \infty}{\simeq} \int_0^{+\infty} \frac{dw}{\sqrt{\gamma}} \frac{1}{2\pi Ai^2(i\lambda + \frac{w}{\sqrt{\gamma}})} e^{-\frac{4}{3}\gamma^{3/2} - 2i\lambda\gamma^{1/2} - 2w} \left[1 + O\left(\frac{1}{\gamma^{1/2}}\right) \right] \quad (14.161)$$

$$\underset{\gamma \rightarrow \infty}{\simeq} \frac{1}{4\pi\sqrt{\gamma}Ai^2(i\lambda)} e^{-\frac{4}{3}\gamma^{3/2} - 2i\lambda\gamma^{1/2}} \left[1 + O\left(\frac{1}{\gamma^{1/2}}\right) \right] \quad (14.162)$$

The leading behavior of (14.155) is thus given by

$$\Phi(\gamma) \underset{\gamma \rightarrow \infty}{\simeq} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda}{2\pi} \frac{1}{Ai^2(i\lambda)} \left[1 - \frac{1}{2\pi\sqrt{\gamma}Ai^2(i\lambda)} e^{-\frac{4}{3}\gamma^{3/2} - 2i\lambda\gamma^{1/2}} \left[1 + O\left(\frac{1}{\gamma^{1/2}}\right) \right] \right] \quad (14.163)$$

$$\underset{\gamma \rightarrow \infty}{\simeq} 1 - \frac{e^{-\frac{4}{3}\gamma^{3/2}}}{2\pi\sqrt{\gamma}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda}{2\pi} \frac{e^{-2i\lambda\gamma^{1/2}}}{Ai^4(i\lambda)} \left[1 + O\left(\frac{1}{\gamma^{1/2}}\right) \right] \quad (14.164)$$

Shifting the contour integration $\lambda \rightarrow \lambda - ic$ and assuming c large, we get using (14.363)

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda}{2\pi} \frac{e^{-i\lambda 2\sqrt{\gamma}}}{Ai^4(i\lambda)} = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda}{2\pi} \frac{e^{-2\sqrt{\gamma}(c+i\lambda)}}{Ai^4(i\lambda + c)} \underset{c \rightarrow \infty}{\simeq} 8\pi \int_{-\infty}^{+\infty} d\lambda (c + i\lambda) e^{-2\sqrt{\gamma}(c+i\lambda) + \frac{8}{3}(c+i\lambda)^{3/2}} \quad (14.165)$$

A saddle-point analysis leads to the choice $c = \frac{\gamma}{4}$ and to the asymptotic behavior

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda}{2\pi} \frac{e^{-i\lambda 2\sqrt{\gamma}}}{Ai^4(i\lambda)} \underset{\gamma \rightarrow +\infty}{\simeq} \pi\sqrt{2\pi}\gamma^{5/4} e^{-\frac{1}{6}\gamma^{3/2}} \quad (14.166)$$

The probability to have only one valley at time t finally behaves for large γ as (14.164)

$$\mathcal{P}(t_{eq} < t) = \Phi(\gamma) \underset{\gamma \rightarrow \infty}{\simeq} 1 - \sqrt{\frac{\pi}{2}} \gamma^{3/4} e^{-\frac{3}{2}\gamma^{3/2}} \quad (14.167)$$

Equivalently, this result describes the asymptotic tail of probability distribution $P_{max}(\Gamma)$ over samples of the largest barrier $\Gamma = T \ln t_{eq}$ existing in the system (14.157)

$$P_{max}(\Gamma) = \frac{d}{d\Gamma} \Phi(a\Gamma) \underset{\Gamma \rightarrow \infty}{\simeq} \frac{9}{4} a \sqrt{\frac{\pi}{2}} (a\Gamma)^{5/4} e^{-\frac{3}{2}(a\Gamma)^{3/2}} \quad (14.168)$$

Small equilibration times

For small γ , the leading behavior of (14.155) can be found with the change of variable $f = \frac{s^2}{\gamma^2}$ using (14.363)

$$\int_0^{+\infty} df \tilde{\psi}_\gamma(f, \lambda) = \int_0^{+\infty} \frac{2s ds}{\gamma^2} \frac{Ai(\frac{s^2}{\gamma^2} + i\lambda + \gamma)}{\pi Ai(\frac{s^2}{\gamma^2} + i\lambda) [Ai(\frac{s^2}{\gamma^2} + i\lambda) Bi(\frac{s^2}{\gamma^2} + i\lambda + \gamma) - Bi(\frac{s^2}{\gamma^2} + i\lambda) Ai(\frac{s^2}{\gamma^2} + i\lambda + \gamma)]} \quad (14.169)$$

$$\underset{\gamma \rightarrow 0}{\simeq} \frac{2}{\gamma^3} \int_0^{+\infty} ds s^2 \frac{e^{-s}}{\sinh s} = \frac{\zeta(3)}{\gamma^3} \quad (14.170)$$

where $\zeta(n)$ is the Riemann zeta function. This leads to the following essential singularity for the short equilibration times

$$\mathcal{P}(t_{eq} < t) = \Phi(\gamma) \underset{\gamma \rightarrow 0}{\simeq} e^{-2\frac{\zeta(3)}{\gamma^3}} \quad (14.171)$$

or equivalently for probability distribution $P_{max}(\Gamma)$ of the largest barrier Γ existing in the system (14.157)

$$P_{max}(\Gamma) = \frac{d}{d\Gamma} \Phi(a\Gamma) \underset{\Gamma \rightarrow 0}{\simeq} \frac{6\zeta(3)}{a\Gamma^4} e^{-2\frac{\zeta(3)}{(a\Gamma)^3}} \quad (14.172)$$

14.6.2 Rare configurations with anomalously large equilibration times

We are now interested into the statistical properties of the configurations that present an anomalously large equilibration time, as described by the tail (14.167) since these configurations are important for the long time dynamics. In the regime $\gamma \gg 1$ under consideration, the leading correction to the one valley event (14.167) that we have computed in the previous section corresponds to the two valleys configurations, because the configurations with three or more valleys are even more unlikely. These configurations correspond to the last non-equilibrium dynamics in the system before it finally equilibrates by going over the largest barrier Γ_{eq} . We can already deduce from the previous section the total probability of the two valleys configurations (14.167)

$$N_{\Gamma \rightarrow \infty}^{(4)} \simeq \sqrt{\frac{\pi}{2}} (a\Gamma)^{3/4} e^{-\frac{3}{2}(a\Gamma)^{3/2}} \quad (14.173)$$

To characterize the statistical properties of these two valley events, we have the probability measure (14.102)

$$N_{\Gamma}^{(4)}(x_1, F_1, x_2, F_2, x_3) = g_{\Gamma}(-x_1) \tilde{B}_{\Gamma}^{-}(0, F_1, x_2 - x_1) e^{\frac{\mu}{2} x_2 (F_1 - F_2)} \tilde{B}_{\Gamma}^{+}(F_2, 0, x_3 - x_2) g_{\Gamma}(x_3) \quad (14.174)$$

where $x_1 < x_2 < x_3$, x_1 and x_3 are the two local minima separated by the barriers $F_1 \geq \Gamma$ and $F_2 \geq \Gamma$ from the local maximum x_2 . For large Γ , the leading behavior of the blocks \tilde{B} (14.91) can be found using (14.79)

$$K(u, v, p) \underset{v \gg u}{\simeq} \frac{\pi}{a} Ai(au + bp) Bi(av + bp) \quad (14.175)$$

which yields

$$\tilde{B}_{\Gamma}^{-}(0, F, p) = \tilde{B}_{\Gamma}^{+}(F, 0, p) \underset{\Gamma \rightarrow \infty}{\simeq} \frac{a}{\pi Ai(bp) Bi(aF + bp)} \quad (14.176)$$

At the same level on approximation, g_{Γ} is given by g_{∞} (14.104), so that we finally get at leading order

$$N_{\Gamma}^{(4)}(x_1, F_1, x_2, F_2, x_3) \underset{\Gamma \rightarrow \infty}{\simeq} \frac{e^{\frac{\mu}{2} x_2 (F_1 - F_2)}}{\pi^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda_1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda_2}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda_3}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda_4}{2\pi} \quad (14.177)$$

$$\frac{e^{i(\lambda_1 + \lambda_2)x_1 + i(\lambda_3 - \lambda_2)x_2 - i(\lambda_2 + \lambda_3)x_3}}{Ai(bi\lambda_1)Ai(b\lambda_2)Bi(aF_1 + b\lambda_2)Ai(b\lambda_3)Bi(aF_2 + b\lambda_3)Ai(bi\lambda_4)} \quad (14.178)$$

It is shown in Appendix (14.14) that after integration over the barriers and the position x_2 of the local maximum, the measure for the two minima (x_1, x_3) has the simple structure

$$M_{\Gamma}^{(4)}(x_1, x_3) \equiv \int_{x_1}^{x_3} dx_2 \int_{\Gamma}^{+\infty} dF_1 \int_{\Gamma}^{+\infty} dF_2 N_{\Gamma}^{(4)}(x_1, F_1, x_2, F_2, x_3) \quad (14.179)$$

$$\underset{\Gamma \rightarrow \infty}{\simeq} \frac{a^2}{2\pi(a\Gamma)^{1/2}} e^{-\frac{4}{3}(a\Gamma)^{3/2}} g_{\infty}(-x_1) g_{\infty}^{(2)}(x_1 - x_3 + 2b(a\Gamma)^{1/2}) g_{\infty}(x_3) \quad (14.180)$$

with

$$g_{\infty}^{(2)}(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda}{2\pi} \frac{e^{-i\lambda x}}{a^2 Ai^2(bi\lambda)} = (g_{\infty} * g_{\infty})(x) \quad (14.181)$$

The total normalization $N^{(4)}$ (14.173) is recovered by integration over (x_1, x_3) with the use of (14.166).

Since all the functions $g_\infty(y)$ are centered around $y = 0$, the two-minima measure $M_\Gamma^{(4)}(x_1, x_3)$ is concentrated around $(x_1, x_3) = (-x_\Gamma, x_\Gamma)$ with

$$x_\Gamma = \frac{\sqrt{a\Gamma}}{2a^2} \quad (14.182)$$

More precisely, a saddle-point analysis leads to the approximation by a product of two Gaussian distributions of broadness

$$\sigma_\Gamma = \frac{\sqrt{3}}{2a^2(a\Gamma)^{1/4}} \quad (14.183)$$

as

$$M_\Gamma^{(4)}(x_1, x_3) \underset{\Gamma \rightarrow \infty}{\simeq} N_\Gamma^{(4)} \frac{e^{-\frac{1}{2\sigma_\Gamma^2}(x_1+x_\Gamma)^2}}{2\sqrt{2\pi\sigma_\Gamma^2}} \frac{e^{-\frac{1}{2\sigma_\Gamma^2}(x_3-x_\Gamma)^2}}{2\sqrt{2\pi\sigma_\Gamma^2}} \quad (14.184)$$

concentrating all the normalization $N_\Gamma^{(4)}$ found above (14.173).

The two valleys configurations with an anomalously large barrier $a\Gamma \gg 1$ thus present minima which are anomalously far from the origin when compared to the typical scale of minima (14.76)

$$x_{\min}^{(4)} = \frac{b\sqrt{a\Gamma}}{2} \gg b \quad (14.185)$$

which is necessary with the Brownian scaling to have a barrier of order Γ between them.

14.6.3 Probability density of minima in the renormalized landscape

The probability $V_\Gamma(x)$ that the point x is the bottom of a renormalized valley at scale Γ can be decomposed into

$$V_\Gamma(x) = V_\Gamma^L(x)V_\Gamma^R(x) \quad (14.186)$$

where $V_\Gamma^R(x)$ represents the constraints on the landscape on the half line $[x, +\infty[$: the potential starting from $U(x)$ has to reach $U(x) + \Gamma$ at an arbitrary position y without any return to $U(x)$, which reads in terms of the Fokker-Planck block (14.70, 14.39) with the use of (14.86, 14.91, 14.78)

$$\begin{aligned} V_\Gamma^R(x) &= \int_x^{+\infty} dy B_\Gamma^-(0, x; \Gamma, y) = \int_x^{+\infty} dy e^{h(0, x) - h(\Gamma, y)} \tilde{B}_\Gamma^-(0, \Gamma; y - x) \\ &= e^{\frac{\mu^2}{12}x^3} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda}{2\pi} \frac{ae^{-i\lambda x}}{\pi(Ai)i\lambda Bi(a\Gamma + i\lambda) - Bi)i\lambda Ai(a\Gamma + i\lambda)} \int_x^{+\infty} dy e^{i\lambda y + \frac{\mu}{12}(y-x)^3} \end{aligned} \quad (14.187)$$

so that finally in terms of the scaling variables γ (14.149) and \tilde{x} (14.150)

$$V_\Gamma^R(x) = \frac{a}{\pi} e^{\frac{1}{3}\tilde{x}^3} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda}{2\pi} \frac{e^{-i\lambda\tilde{x}}}{(Ai)i\lambda Bi(\gamma + i\lambda) - Bi)i\lambda Ai(\gamma + i\lambda)} \int_{\tilde{x}}^{+\infty} d\tilde{y} e^{i\lambda\tilde{y} + \gamma\tilde{y}} \quad (14.189)$$

Similarly, for the left half line $] -\infty, x]$, we have by symmetry

$$V_\Gamma^L(x) = V_\Gamma^R(-x) \quad (14.190)$$

In the limit $\gamma \rightarrow \infty$, we have using (14.175,14.363) and by evaluating the integral over y by the saddle-point method

$$V_{\Gamma}^R(x) \underset{\gamma \rightarrow \infty}{\simeq} \frac{a}{\pi} e^{\frac{1}{3}\tilde{x}^3} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda}{2\pi} \frac{e^{-i\lambda\tilde{x}}}{Ai(i\lambda)Bi(\gamma + i\lambda)} \int_{\tilde{x}}^{+\infty} d\tilde{y} e^{i\lambda\tilde{y} + \gamma\tilde{y} - \frac{1}{3}\tilde{y}^3} \quad (14.191)$$

$$\underset{\gamma \rightarrow \infty}{\simeq} a e^{\frac{1}{3}\tilde{x}^3} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda}{2\pi} \frac{e^{-i\lambda\tilde{x}}}{Ai(i\lambda)} = e^{\frac{1}{3}\tilde{x}^3} g_{\infty}(x) \quad (14.192)$$

leading to

$$V_{\infty}(x) = g_{\infty}(-x)g_{\infty}(x) \quad (14.193)$$

as it should to recover the probability distribution of the absolute minimum of the full landscape (14.105).

In the other limit $\gamma \rightarrow 0$, we have using (14.360)

$$V_{\Gamma}^R(x) \underset{\gamma \rightarrow 0}{\simeq} a e^{\frac{1}{3}\tilde{x}^3} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda}{2\pi} \frac{e^{-i\lambda\tilde{x}}}{\gamma + \frac{\gamma^3}{3}i\lambda + \dots} \int_{\tilde{x}}^{+\infty} d\tilde{y} e^{i\lambda\tilde{y} - \frac{1}{3}\tilde{y}^3} (1 + \gamma\tilde{y} + \dots) \quad (14.194)$$

$$\underset{\gamma \rightarrow 0}{\simeq} \frac{a}{\gamma} (1 + \gamma\tilde{x}) + O(\gamma) \quad (14.195)$$

and thus, for the points x that are in the region where \tilde{x} remains finite, the probability (14.186) is given by

$$V_{\Gamma}(x) \underset{\gamma \rightarrow 0}{\simeq} \frac{a^2}{\gamma^2} = \frac{1}{\Gamma^2} \quad (14.196)$$

i.e. it represents in this regime as it should the uniform density $1/\Gamma^2$ of minima of the Sinai model [4].

Another quantity of interest is probability that x is the nearest minimum x_{min}^R from the boundary $x_R = +\infty$ in the renormalized landscape at scale Γ

$$W_{\Gamma}^R(x) = V_{\Gamma}^L(x)V_{\Gamma}^R(x, +\infty, +\infty) \quad (14.197)$$

where the constraint on the left half line is the same as before (14.186,14.190) and where the constraint on the right half-line reads (14.99)

$$V_{\Gamma}^R(x, \infty, \infty) = \lim_{x_R \rightarrow \infty} \int_{\Gamma}^{+\infty} dF_R E_{\Gamma}^{-}(0, x; F_R, x_R) = e^{\frac{\mu^2}{12}x^3} g_{\Gamma}(x) \quad (14.198)$$

or in terms of the rescaled variables using (14.99,14.156)

$$V_{\Gamma}^R(x, \infty, \infty) = a e^{\frac{1}{3}\tilde{x}^3} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda}{2\pi} e^{-i\lambda\tilde{x}} \frac{1}{Ai(i\lambda)} e^{-\int_0^{+\infty} df \tilde{\psi}_{\gamma}(f, \lambda)} \quad (14.199)$$

Of course, in the regime $\gamma \rightarrow \infty$, the distribution (14.197) of x_{min}^R is the same as the distribution of the absolute minimum (14.193). In the other limit $\gamma \rightarrow 0$, we expect that x_{min}^R is much bigger than the scale b (14.76) of the absolute minimum. In this regime, its position will not be governed by the constraint on right landscape $V_{\Gamma}^R(x, \infty, \infty)$, which is easy to satisfy in this region, but by the constraint on the left landscape, which behaves in this regime as (14.195)

$$V_{\Gamma}^L(x) = V_{\Gamma}^R(-x) \underset{\gamma \rightarrow 0}{\simeq} \frac{a}{\gamma} (1 - \gamma\tilde{x}) + O(\gamma) \quad (14.200)$$

We thus expect that \tilde{x}_{min}^R scales as $1/\gamma$, i.e.

$$x_{min}^R \underset{\gamma \rightarrow 0}{\propto} \frac{b}{\gamma} \quad (14.201)$$

As a consequence, the total number n of minima is the renormalized landscape at scale Γ can be roughly estimated in this regime by dividing the effective region (14.201) by the typical distance Γ^2 (14.196) between two minima

$$n^{typ}(\gamma) \underset{\gamma \rightarrow 0}{\propto} \frac{1}{\gamma^3} \quad (14.202)$$

This estimation is coherent with the behavior found in (14.171). Of course, an exact calculation of the distribution of the number n of minima of the renormalized landscape could in principle be done from (14.102)

$$Z_{free} = 1 = \sum_{n=1}^{+\infty} N_{\Gamma}^{(2n+2)} \quad (14.203)$$

where N_{Γ}^{2n+2} represents the total normalization of the renormalized landscapes containing exactly n local minima. We have considered previously $N_{\Gamma}^{(2)}$ (14.154) corresponding to a single minimum, and $N_{\Gamma}^{(4)}$ (14.173) corresponding to two minima, but unfortunately, the multiple integrals over the barriers F and positions x needed in (14.102) become rapidly intractable for arbitrary n and arbitrary γ .

14.7 Diffusion front

As explained at the beginning of the Section 14.6, the long-time dynamics is determined by the properties of the renormalized landscape $\Gamma = T \ln t$, and the results obtained will be valid in the double limit $t \rightarrow \infty$ and $\mu \rightarrow 0$ in terms of the scaling variables γ (14.149) and \tilde{x} (14.150). As in the Sinai model [4], the average over the disorder of the diffusion front $\overline{P(x, t|x_0, 0)}$ is given by the probability that x is the minimum of a renormalized valley at scale Γ that contains the initial position x_0 .

Let us first consider the case $x < x_0$. The constraint for the left half-line $] -\infty, x]$ is simply given by $V_L(x) = V_R(-x)$ (14.186, 14.190). The constraint for the landscape on the right half line is now that x should be the starting point of a renormalized bond of arbitrary barrier $F \geq \Gamma$ and of length l satisfying $x + l > x_0$. We thus have

$$\theta(x_0 - x) \overline{P(x, t|x_0, 0)} = V_{\Gamma}^L(x) \left(V_{\Gamma}^R(x, +\infty, +\infty) + \int_{\Gamma}^{+\infty} dF \int_{x_0-x}^{+\infty} dl V_R(x, F, l) \right) \quad (14.204)$$

where V_{Γ}^R represents the constraints on the landscape on the half line $[x, +\infty[$: the point x should either be the first minimum on the right of the renormalized landscape (14.198) or it should be the starting point of a finite ascending renormalized bond of barrier F and length l , followed by an arbitrary descending bond, i.e. in terms of the Fokker-Planck block (14.70, 14.86)

$$V_{\Gamma}^R(x, F, l) = B_{\Gamma}^{-}(0, x; F, x+l) \int_{x+l}^{+\infty} dy B_{\Gamma}^{+}(F, x+l; F-\Gamma, y) \quad (14.205)$$

$$= B_{\Gamma}^{-}(0, x; F, x+l) \int_{x+l}^{+\infty} dy B_{\Gamma}^{+}(\Gamma, x+l; 0, y) \quad (14.206)$$

Using the explicit expressions (14.39,14.91,14.78), we have

$$V_{\Gamma}^R(x, F, l) = \frac{a^2}{\pi^2} e^{\frac{\mu^2}{12} x^3 + \frac{\mu}{2} (F - \Gamma)(x+l)} \quad (14.207)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda_1}{2\pi} e^{i\lambda_1 l + \int_0^{F-\Gamma} dv a} \frac{Ai'(av+bi\lambda_1)Bi(a(v+\Gamma)+bi\lambda_1)-Bi'(av+bi\lambda_1)Ai(a(v+\Gamma)+bi\lambda_1)}{Ai(av+bi\lambda_1)Bi(a(v+\Gamma)+bi\lambda_1)-Bi(av+bi\lambda_1)Ai(a(v+\Gamma)+bi\lambda_1)} \quad (14.208)$$

$$\int_{x+l}^{+\infty} dy e^{-\frac{\mu^2}{12} y^3} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda_2}{2\pi} \frac{e^{i\lambda_2(y-x-l)}}{Ai(bp)Bi(a\Gamma+bi\lambda_2)-Bi(bp)Ai(a\Gamma+bi\lambda_2)} \quad (14.209)$$

so that in terms of the scaling variables γ (14.149) and \tilde{x} (14.150), the integral needed in (14.204) reads

$$\int_{\Gamma}^{+\infty} dF \int_{x_0-x}^{+\infty} dl V_R(x, F, l) = \int_{\gamma}^{+\infty} \frac{df}{a} \int_{\tilde{x}_0-\tilde{x}}^{+\infty} b d\tilde{l} V_{\Gamma}^R(x = b\tilde{x}, F = \frac{f}{a}, l = b\tilde{l}) \quad (14.210)$$

$$= \frac{a}{\pi^2} e^{\frac{1}{3}\tilde{x}^3} \int_{\gamma}^{+\infty} df \int_{\tilde{x}_0-\tilde{x}}^{+\infty} d\tilde{l} e^{(f-\gamma)(\tilde{x}+\tilde{l})} \quad (14.211)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda_1}{2\pi} e^{i\lambda_1 \tilde{l} + \int_0^{f-\gamma} dw} \frac{Ai'(w+i\lambda_1)Bi(w+\gamma+i\lambda_1)-Bi'(w+i\lambda_1)Ai(w+\gamma+i\lambda_1)}{Ai(w+i\lambda_1)Bi(w+\gamma+i\lambda_1)-Bi(w+i\lambda_1)Ai(w+\gamma+i\lambda_1)} \quad (14.212)$$

$$\int_{\tilde{x}+\tilde{l}}^{+\infty} d\tilde{y} e^{-\frac{1}{3}\tilde{y}^3} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda_2}{2\pi} \frac{e^{i\lambda_2(\tilde{y}-\tilde{x}-\tilde{l})}}{Ai(i\lambda_2)Bi(\gamma+i\lambda_2)-Bi(i\lambda_2)Ai(\gamma+i\lambda_2)} \quad (14.213)$$

In the limit $\gamma \rightarrow \infty$, the term (14.198) dominates and the diffusion front converges as it should towards the distribution of the absolute minimum for x and doesn't depend anymore on the initial position x_0

$$\overline{P(x, t|x_0, 0)}_{\gamma \rightarrow \infty} \simeq g_{\infty}(-x)g_{\infty}(-x) \quad (14.214)$$

In the other limit $\gamma \rightarrow 0$, the term (14.198) is negligible, and the typical length associated to the dynamics is Γ^2 (14.196). The diffusion front is expected to become in this regime a function of the scaling variable (14.151)

$$(\Delta X)_{Sinai} = \frac{x_0 - x}{\Gamma^2} = \frac{\tilde{x}_0 - \tilde{x}}{\gamma^2} \quad (14.215)$$

The contribution of finite barriers (14.213) indeed becomes with the appropriate changes of variables $\tilde{l} = \gamma^2 l$, $\lambda_1 = \frac{\lambda}{\gamma^2}$, $f = \gamma(1 + \eta)$

$$\int_{\Gamma}^{+\infty} dF \int_{x_0-x}^{+\infty} dl V_R(x, F, l) \underset{\gamma \rightarrow 0}{\simeq} \frac{a}{\pi} e^{\frac{1}{3}\tilde{x}^3} \int_0^{+\infty} d\eta \int_{\frac{\tilde{x}_0-\tilde{x}}{\gamma^2}}^{+\infty} d\tilde{l} e^{\gamma(\tilde{x}+\gamma^2 l)} \quad (14.216)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda}{2\pi} e^{i\lambda l + \int_0^{\eta} \gamma dv} \frac{Ai'(\gamma v + i\frac{\lambda}{\gamma^2})Bi(\gamma v + \gamma + i\frac{\lambda}{\gamma^2}) - Bi'(\gamma v + i\frac{\lambda}{\gamma^2})Ai(\gamma v + \gamma + i\frac{\lambda}{\gamma^2})}{Ai(\gamma v + i\frac{\lambda}{\gamma^2})Bi(\gamma v + \gamma + i\frac{\lambda}{\gamma^2}) - Bi(\gamma v + i\frac{\lambda}{\gamma^2})Ai(\gamma v + \gamma + i\frac{\lambda}{\gamma^2})} \quad (14.217)$$

$$\underset{\gamma \rightarrow 0}{\simeq} \frac{a}{\gamma} \int_0^{+\infty} d\eta \int_{\frac{\tilde{x}_0-\tilde{x}}{\gamma^2}}^{+\infty} d\tilde{l} P^*(\eta, l) \quad (14.218)$$

where we have recognized the joint distribution of rescaled barrier η and rescaled length l of the Brownian landscape [4]

$$P^*(\eta, l) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda}{2\pi} \frac{i\lambda^{1/2}}{\sinh(i\lambda)^{1/2}} e^{i\lambda l - (\eta i\lambda)^{1/2} \coth(i\lambda)^{1/2}} \quad (14.219)$$

The diffusion front has thus for Laplace transform in this regime

$$\int_x^{+\infty} dx_0 e^{-p(x_0-x)} \overline{P(x, t|x_0, 0)} \underset{\gamma \rightarrow 0}{\simeq} \int_0^{+\infty} dy e^{-p\Gamma^2 y} \int_0^{+\infty} dl \int_0^{+\infty} d\eta P^*(\eta, l) \frac{1 - e^{-p\Gamma^2 l}}{p\Gamma^2} = \frac{1}{\Gamma^2 p} (1 - \cosh \Gamma \sqrt{4p})$$

which is exactly the Laplace transform of the Kesten distribution for the Sinai model [4].

The diffusion front for $x_0 < x$ can be obtained from the symmetry $x \rightarrow -x$

$$\begin{aligned} \theta(x - x_0) \overline{P(x, t|x_0, 0)} &= \left(V_\Gamma^L(x, +\infty, +\infty) + \int_\Gamma^{+\infty} dF \int_{x-x_0}^{+\infty} dl V_L(x, F, l) \right) V_\Gamma^R(x) \\ &= \left(V_\Gamma^R(-x, +\infty, +\infty) + \int_\Gamma^{+\infty} dF \int_{x-x_0}^{+\infty} dl V_R(-x, F, l) \right) V_\Gamma^L(-x) \end{aligned} \quad (14.221)$$

14.8 Results for stationary landscapes

In this section, we discuss the case of the stationary landscapes defined by (14.21) which belong to the class of solvable models with our method as discussed in Section (14.3.1).

14.8.1 Explicit expressions for the blocks

We have seen in (14.41) how the functional integrals for the process $dU/dx = -dW[U]/dU + \eta(x)$ could be recast into a functional integral of the Schrodinger-type *up to boundary terms*. The Fokker-Planck blocks read (14.41)

$$B_\Gamma^\pm u_0, x_0, u_1, x_1 = e^{-\frac{1}{2}(W[u_1]-W[u_0])} \tilde{B}_\Gamma^\pm u_0, x_0, u_1, x_1 \quad (14.223)$$

$$E_\Gamma^\pm u_0, x_0, u_1, x_1 = e^{-\frac{1}{2}(W[u_1]-W[u_0])} \tilde{E}_\Gamma^\pm u_0, x_0, u_1, x_1 \quad (14.224)$$

in terms of the Schrodinger blocks \tilde{B} and \tilde{E} given in Laplace transform by

$$\tilde{B}_\Gamma^-(u_0, u, p) = \tilde{B}_\Gamma^+(u, u_0, p) = \frac{1}{K(u - \Gamma, u, p)} \exp \int_{u_0}^{u-\Gamma} dv \partial_1 \ln K(v, v + \Gamma, p) \quad (14.225)$$

$$\tilde{E}_\Gamma^-(u, u_b, p) = \tilde{E}_\Gamma^+(u_b, u, p) = \exp \int_u^{u_b} dv \partial_1 \ln K(v, v + \Gamma, p) \quad (14.226)$$

The function K (14.53) now corresponds to the problem with the Schrodinger potential $V[U] = -\frac{1}{2}W''[U] + \frac{1}{4}W'[U]^2$.

For the special case $p = 0$, two independent solutions of the Schrodinger equation are then known for an arbitrary potential $W[U]$

$$\phi_1(u) = e^{-\frac{1}{2}W(u)} \quad (14.227)$$

$$\phi_2(u) = e^{-\frac{1}{2}W(u)} \int_0^u e^{W(u')} du' \quad (14.228)$$

of wronskian $w = 1$ and thus the function K (14.53) simply reads:

$$K(u, v, p = 0) = e^{-\frac{1}{2}(W(u)+W(v))} \int_u^v e^{W(u')} du' \quad (14.229)$$

The Schrodinger blocks of the measure read (14.226)

$$\tilde{B}_\Gamma^-(u_0, u, p = 0) = \tilde{B}_\Gamma^+(u, u_0, p = 0) = \frac{e^{\frac{W(u_0)}{2} + \frac{W(u)}{2}}}{\int_{u-\Gamma}^u e^{W(u')} du'} e^{-\int_{u_0}^{u-\Gamma} \frac{dv}{\int_v^{v+\Gamma} e^{W(u')-W(v)} du'}} \quad (14.230)$$

$$\tilde{E}_\Gamma^+(u_b, u, p = 0) = \tilde{E}_\Gamma^-(u, u_b, p = 0) = e^{\frac{W(u)}{2} - \frac{W(u_b)}{2} - \int_u^{u_b} \frac{dv}{\int_v^{v+\Gamma} e^{W(u')-W(v)} du'}} \quad (14.231)$$

so that finally the blocks for the full measure (14.224) read in terms of the arbitrary potential $W(u)$

$$B_{\Gamma}^{-})u_0, u, p = 0) = \frac{e^{W(u_0)}}{\int_{u-\Gamma}^u e^{W(u')} du'} e^{-\int_{u_0}^{u-\Gamma} \frac{dv}{\int_v^{v+\Gamma} e^{W(u')-W(v)} du'}} \quad (14.232)$$

$$B_{\Gamma}^{+})u, u_0, p = 0) = \frac{e^{W(u)}}{\int_{u-\Gamma}^u e^{W(u')} du'} e^{-\int_{u_0}^{u-\Gamma} \frac{dv}{\int_v^{v+\Gamma} e^{W(u')-W(v)} du'}} \quad (14.233)$$

$$\tilde{E}_{\Gamma}^{-})u, u_b, p = 0) = e^{W(u)-W(u_b)-\int_u^{u_b} \frac{dv}{\int_v^{v+\Gamma} e^{W(u')-W(v)} du'}} \quad (14.234)$$

$$\tilde{E}_{\Gamma}^{+})u_b, u, p = 0) = e^{-\int_u^{u_b} \frac{dv}{\int_v^{v+\Gamma} e^{W(u')-W(v)} du'}} \quad (14.235)$$

These expressions for the Laplace variable $p = 0$ describe the properties of the extrema in the energy u of the landscape after integration over the positions variables x .

14.8.2 Normalization of the full measure

The normalization for left and right reflecting boundaries, corresponding to $u(x_L) = u_L$ and $u(x_R) = u_R$ with $u(x_L^-) = +\infty$ and $u(x_R^+) = +\infty$, is given by (14.36)

$$Z(u_L, x_L; u_R, x_R) = \int_{u(x_L)=u_L}^{u(x_R)=u_R} DU \exp\left(-\int_{x_L}^{x_R} dx \left(\frac{dU}{dx} - F[U]\right)^2 + \frac{1}{2}F'[U]\right) \quad (14.236)$$

and the decomposition into blocks at scale Γ reads (14.30)

$$Z(u_L, x_L, u_R, x_R) = \sum_{n=1}^{+\infty} \int \prod_{i=1}^{2n-1} du_i dx_i \quad E_{\Gamma}^{+})u_L, x_L; u_1, x_1) B_{\Gamma}^{-})u_1, x_1; u_2, x_2) \dots \quad (14.237)$$

$$\dots B_{\Gamma}^{+})u_{2n-2}, x_{2n-2}; u_{2n-1}, x_{2n-1}) E_{\Gamma}^{-})u_{2n-1}, x_{2n-1}; u_R, x_R) \quad (14.238)$$

$$= e^{-\frac{1}{2}(W[U(x_R)]-W[U(x_L)])} \sum_{n=1}^{+\infty} \int \prod_{i=1}^{2n-1} du_i dx_i \quad \tilde{E}_{\Gamma}^{+})u_L, u_1, x_1 - x_L) \tilde{B}_{\Gamma}^{-})u_1, u_2, x_2 - x_1) \dots \quad (14.239)$$

$$\tilde{B}_{\Gamma}^{+})u_{2n-2}, u_{2n-1}, x_{2n-1} - x_{2n-2}) \tilde{E}_{\Gamma}^{-})u_{2n-1}, u_R, x_R - x_{2n-1}) \quad (14.240)$$

14.8.3 Example: Brownian landscape with drift

We rewrite the general expressions for the particular case $W(u) = fu$ corresponding to the Schrodinger potential

$$V(u) = f^2/4 = \delta^2 \quad (14.241)$$

where we have introduced the notation $\delta = f/2$ to compare more straightforwardly with the papers [12]. The functions $\phi_1(u, p)$ and $\phi_2(u, p)$ introduced in (14.53) and their wronskian $w(p)$ read

$$\phi_1(u) = e^{-u\sqrt{p+\delta^2}} \quad (14.242)$$

$$\phi_2(u) = e^{u\sqrt{p+\delta^2}} \quad (14.243)$$

$$w(p) = 2\sqrt{p+\delta^2} \quad (14.244)$$

Thus the function K introduced in (14.53) reads

$$K(u, v, p) = \frac{1}{\sqrt{p+\delta^2}} \sinh((v-u)\sqrt{p+\delta^2}) \quad (14.245)$$

This leads to the expressions

$$B_{\Gamma}^{-}(u_1, u_2, p) = e^{-\delta(u_2 - u_1)} \frac{\sqrt{p + \delta^2}}{\sinh(\Gamma \sqrt{p + \delta^2})} \exp) - (u_2 - u_1 - \Gamma) \sqrt{p + \delta^2} \coth(\Gamma \sqrt{p + \delta^2}) \quad (14.246)$$

$$= e^{-\Gamma \delta} \frac{\sqrt{p + \delta^2}}{\sinh(\Gamma \sqrt{p + \delta^2})} \exp) - (u_2 - u_1 - \Gamma)(\delta + \sqrt{p + \delta^2} \coth(\Gamma \sqrt{p + \delta^2})) \quad (14.247)$$

$$B_{\Gamma}^{+}(u_1, u_2, p) = e^{-\delta(u_2 - u_1)} \frac{\sqrt{p + \delta^2}}{\sinh(\Gamma \sqrt{p + \delta^2})} \exp) - (u_1 - u_2 - \Gamma) \sqrt{p + \delta^2} \coth(\Gamma \sqrt{p + \delta^2}) \quad (14.248)$$

$$= e^{\Gamma \delta} \frac{\sqrt{p + \delta^2}}{\sinh(\Gamma \sqrt{p + \delta^2})} \exp) - (u_1 - u_2 - \Gamma)(-\delta + \sqrt{p + \delta^2} \coth(\Gamma \sqrt{p + \delta^2})) \quad (14.249)$$

$$E_{\Gamma}^{+}(u_L, u) = \exp) - (u_L - u)(-\delta + \sqrt{p + \delta^2} \coth(\Gamma \sqrt{p + \delta^2})) \quad (14.250)$$

$$E_{\Gamma}^{-}(u, u_R) = \exp) - (u_R - u)(\delta + \sqrt{p + \delta^2} \coth(\Gamma \sqrt{p + \delta^2})) \quad (14.251)$$

in agreement with [12]. We thus recover simply and from a more general perspective the RSRG fixed-point for the pure Brownian landscape [12, 4].

14.8.4 Some further examples

One can study cases where the potential $W(u)$ (14.21) is a simple power law $W(u) = ru^{\gamma}$. This corresponds to the Schrodinger potential (14.42)

$$V(U) = -\frac{r\gamma(\gamma - 1)}{2} u^{\gamma-2} + \frac{r^2\gamma^2}{4} u^{2(\gamma-1)} \quad (14.252)$$

which a priori contains two power-laws. Apart from the case $\gamma = 1$ corresponding to the biased Brownian motion discussed above (14.241), there are two other simple cases $\gamma = 2$ and $\gamma = 0$, which we now briefly comment on.

Landscape produced by a Brownian particle in a parabolic well

The parabolic potential $W(u) = ru^2$ corresponds to the quadratic Schrodinger potential

$$V(u) = -r + r^2 u^2 \quad (14.253)$$

The functions $\phi_1(u, p)$ and $\phi_2(u, p)$ introduced in (14.53) and their wronskian $w(p)$ read

$$\phi_1(u, p) = e^{-\frac{r}{2}u^2} \sqrt{ru} U\left(\frac{1}{2} + \frac{p}{4r}, \frac{3}{2}, ru^2\right) \quad (14.254)$$

$$\phi_2(u, p) = e^{-\frac{r}{2}u^2} u M\left(\frac{1}{2} + \frac{p}{4r}, \frac{3}{2}, ru^2\right) \quad (14.255)$$

$$w(p) = \frac{\sqrt{\pi}}{\Gamma\left(\frac{1}{2} + \frac{p}{4r}\right)} \quad (14.256)$$

where $U(a, b, z)$ and $M(a, b, z)$ are the confluent hypergeometric functions. In particular for $p = 0$, we have $U(\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, z) = 1/\sqrt{z}$ and (14.228) yields

$$\phi_1(u, p = 0) = e^{-\frac{r}{2}u^2} = e^{-\frac{1}{2}W(u)} \quad (14.257)$$

$$\phi_2(u, p = 0) = e^{-\frac{r}{2}u^2} \int_0^u du' e^{ru'^2} \quad (14.258)$$

$$w(p = 0) = 1 \quad (14.259)$$

$$K(u, v, p = 0) = e^{-\frac{r}{2}(u^2 + v^2)} \int_u^v du' e^{ru'^2} \quad (14.260)$$

The above expressions allow to obtain the full joint distribution of wide excursions (extrema) of the trajectory $U(x)$ of a Brownian particle in a quadratic well, but we will not explore these results further here since this goes beyond the scope of this paper.

Landscape produced by a Brownian particle in a logarithmic well

We now consider the logarithmic potential $W(u) = -r \ln u$ for $u \in]0, +\infty[$ corresponding to the Schrodinger potential

$$V(u) = \left(-\frac{r}{2} + \frac{r^2}{4}\right) \frac{1}{u^2} \quad (14.261)$$

The functions $\phi_1(u, p)$ and $\phi_2(u, p)$ introduced in (14.53) and their wronskian $w(p)$ read

$$\phi_1(u, p) = \sqrt{u} K_{\frac{1-r}{2}}(\sqrt{p}u) \quad (14.262)$$

$$\phi_2(u, p) = \sqrt{u} I_{\frac{1-r}{2}}(\sqrt{p}u) \quad (14.263)$$

$$w(p) = 1 \quad (14.264)$$

where $K_\nu(z)$ and $I_\nu(z)$ are the Bessel functions. For the special case $p = 0$, (14.228) yields for the function K

$$K(u, v, p = 0) = e^{-\frac{1}{2}(W(u)+W(v))} \int_u^v e^{W(u')} du' = \frac{1}{1-r} \left[u^{r/2} v^{1-r/2} - u^{1-r/2} v^{r/2} \right] \quad (14.265)$$

14.8.5 An example with a long-ranged constraint: Positive Brownian landscape

As an example of long-ranged constraint, we consider the process $U(x) = |V(x)|$ where $V(x)$ is a pure Brownian, i.e. $U(x)$ is constrained to remain positive by a reflecting wall at $U = 0$. For fixed boundary conditions (u_L, x_L) and (u_R, x_R) , the total normalization reads

$$Z(u_L, x_L; u_R, x_R) = \frac{1}{\sqrt{4\pi(x_R - x_L)}} \left(e^{-\frac{(u_R - u_L)^2}{4(x_R - x_L)}} + e^{-\frac{(u_R + u_L)^2}{4(x_R - x_L)}} \right) \quad (14.266)$$

In Laplace transform with respect to the length $(x_R - x_L)$, this leads to

$$Z(u_L, u_R; p) = \int_{x_L}^{+\infty} dx_R e^{-p(x_R - x_L)} Z(u_L, x_L; u_R, x_R) = \frac{1}{2\sqrt{p}} \left(e^{-\sqrt{p}|u_R - u_L|} + e^{-\sqrt{p}u_R - u_L} \right) \quad (14.267)$$

We again consider the convention $U(x_R^-) = U(x_L^+) = +\infty$ to define the renormalization procedure. The decomposition of the renormalized landscape at scale Γ can then be written as

$$\begin{aligned} Z(u_L, u_R; p) &= \sum_{n=1}^{+\infty} \int_{u_i > 0} E_\Gamma^+(u_L, u_1; p) B_\Gamma^-(u_1, u_2; p) \dots E_\Gamma^-(u_{2n-1}, u_R; p) \\ &+ E_\Gamma^+(u_L, 0; p) G_\Gamma(0, 0; p) E_\Gamma^-(0, u_R; p) \\ &+ E_\Gamma^+(u_L, 0; p) G_\Gamma(0, 0; p) \left(\sum_{n=1}^{+\infty} \int_{u_i > 0} B_\Gamma^-(0, u_1; p) B_\Gamma^+(u_1, u_2; p) \dots B_\Gamma^+(u_{2n-1}, 0; p) \right) G_\Gamma(0, 0; p) E_\Gamma^-(0, u_R; p) \end{aligned} \quad (14.268)$$

where the blocks (B, E) represents the ‘bulk’ blocks and are thus identical to the blocks for the pure Brownian motion (14.251) for $\delta = 0$

$$B_\Gamma^-(u_1, u_2; p) = B_\Gamma^+(u_2, u_1; p) = \theta((u_2 - u_1) - \Gamma) \frac{\sqrt{p}}{\sinh(\Gamma\sqrt{p})} e^{-((u_2 - u_1) - \Gamma)\sqrt{p} \coth(\Gamma\sqrt{p})} \quad (14.271)$$

$$E_\Gamma^-(u, u_b; p) = E_\Gamma^+(u_b, u; p) = \theta(u_b - u) e^{-(u_b - u)\sqrt{p} \coth(\Gamma\sqrt{p})} \quad (14.272)$$

and where the notation $G_\Gamma(u_1, u_2, p)$ represents the measure of the Brownian paths that remain in $[0, \Gamma]$ between u_1 and u_2 . Since $U(x) = |V(x)|$, this is equivalent to asking that the unconstrained Brownian $V(x')$ remains in the interval $]-\Gamma, \Gamma[$, and goes from u_1 to $(+u_2)$ or to $(-u_2)$. With the notations of (14.299, 14.312), its Laplace transform reads

$$G_\Gamma(u_1, u_2, p) = F_{[u_a=-\Gamma, u_b=\Gamma]}(u_1, u_2, p) + F_{[u_a=-\Gamma, u_b=\Gamma]}(u_1, -u_2, p) \quad (14.273)$$

$$= \frac{K(-\Gamma, \min(u_1, u_2))K(\max(u_1, u_2), \Gamma)}{K(-\Gamma, \Gamma)} + \frac{K(-\Gamma, -u_2)K(u_1, \Gamma)}{K(-\Gamma, \Gamma)} \quad (14.274)$$

with the function K given by $K(u, v, p) = \frac{1}{\sqrt{p}} \sinh((v-u)\sqrt{p})$ (14.245). Here we only need the case $u_1 = 0 = u_2$

$$G_\Gamma(0, 0, p) = \frac{\tanh(\Gamma\sqrt{p})}{\sqrt{p}} \quad (14.275)$$

This expression may also be found by solving the RSRG equation

$$\partial_\Gamma G_\Gamma(0, 0; p) = G_\Gamma(0, 0; p)B_\Gamma(0, \Gamma, p)B_\Gamma(\Gamma, 0, p)G_\Gamma(0, 0; p) = G_\Gamma^2(0, 0; p) \frac{p}{\sinh^2 \Gamma \sqrt{p}} \quad (14.276)$$

In the limit of $\Gamma \rightarrow \infty$, the decomposition (14.270) becomes

$$\begin{aligned} Z(u_L, u_R; p) &= \int_0^{\min(u_L, u_R)} du E_\infty^+(u_L, u; p) E_\infty^-(u, u_R; p) + E_\infty^+(u_L, 0; p) G_\infty(0, 0; p) E_\infty^-(0, u_R; p) \\ &= \int_0^{\min(u_L, u_R)} du e^{-(u_L-u)\sqrt{p}} e^{-(u_R-u)\sqrt{p}} + e^{-u_L\sqrt{p}} \frac{1}{\sqrt{p}} e^{-u_R\sqrt{p}} \end{aligned} \quad (14.278)$$

which coincides with (14.267) as it should.

14.9 Appendixes

14.10 Explicit construction of the measure for renormalized landscape

This Appendix is dedicated to the precise definitions and properties of the joint probabilities of extrema introduced in Section 14.2.

14.10.1 Initial landscape

The joint probabilities defined in Section 14.2.1 are precisely defined as follows in terms of the initial landscape measure (14.24)

$$N_{\text{init}}^{(2n)}(x_L, u_L; u_1, x_1; \dots u_{2n-1}, x_{2n-1}; x_R, u_R) = \int DU \mathcal{P}[U] \prod_{j=1}^{2n-1} \delta(U_{x_j} - u_j) \quad (14.279)$$

$$\prod_{i=1}^{x_1-1} \theta(U_i - U_{i+1}) \prod_{i=x_1}^{x_2-1} \theta(U_{i+1} - U_i) \prod_{i=x_2}^{x_3-1} \theta(U_i - U_{i+1}) \dots \prod_{i=x_{2n-1}}^{N-1} \theta(U_{i+1} - U_i) \quad (14.280)$$

The normalization (14.26) can be checked by inserting the identity

$$\begin{aligned} 1 &= \prod_{i=1}^{N-1} (\theta(U_{i+1} - U_i) + \theta(U_i - U_{i+1})) \\ &= \sum_{n=1}^K \sum_{1 \leq x_1 < x_2 < x_3 < \dots < x_{2n-2} < x_{2n-1} \leq N} \prod_{i=1}^{x_1-1} \theta(U_i - U_{i+1}) \prod_{i=x_1}^{x_2-1} \theta(U_{i+1} - U_i) \prod_{i=x_2}^{x_3-1} \theta(U_i - U_{i+1}) \dots \prod_{i=x_{2n-1}}^{N-1} \theta(U_{i+1} - U_i) \end{aligned} \quad (14.281)$$

(with $K = (N+1)/2$, N is odd) into the initial measure (14.25).

14.10.2 Renormalized landscape

To define explicitly the measure of renormalized landscapes defined in Section 14.2.2, it is convenient to introduce the following notation for an ascending bond with $x_1 < x_2$

$$\Theta_{\Gamma}^{-}(x_1, x_2; U) = \prod_{i=x_1}^{x_2-1} \prod_{j=i+1}^{x_2} \theta(\Gamma - U_i + U_j) \theta(U_j - U_{x_1}) \theta(U_{x_2} - U_i) \quad (14.282)$$

when $U_{x_2} - U_{x_1} \geq \Gamma$ and 0 otherwise. It expresses that U_{x_1} is the minimum potential over the segment $[x_1, x_2]$, U_{x_2} is the maximum and all descending barriers in the segment with $i < j$ satisfy $U_i - U_j < \Gamma$. Similarly, for a descending bond one defines

$$\Theta_{\Gamma}^{+}(x_1, x_2; U) = \prod_{i=x_1}^{x_2-1} \prod_{j=i+1}^{x_2} \theta(\Gamma - U_j + U_i) \theta(U_{x_1} - U_j) \theta(U_i - U_{x_2}) \quad (14.283)$$

when $U_{x_1} - U_{x_2} \geq \Gamma$ and 0 otherwise. For $\Gamma = 0$ we recover the extrema of the initial landscape

$$\Theta_{\Gamma=0}^{-}(x_1, x_2; U) = \prod_{i=x_1}^{x_2-1} \theta(U_{i+1} - U_i) \quad (14.284)$$

$$\Theta_{\Gamma=0}^{+}(x_1, x_2; U) = \prod_{i=x_1}^{x_2-1} \theta(U_i - U_{i+1}) \quad (14.285)$$

As a technicality, to treat the edges we must also introduce

$$\tilde{\Theta}_{\Gamma}^{+}(x_1, x_2; U) = \prod_{i=x_1}^{x_2-1} \prod_{j=i+1}^{x_2} \theta(\Gamma - U_j + U_i) \theta(U_i - U_{x_2}) \quad (14.286)$$

$$\tilde{\Theta}_{\Gamma}^{-}(x_1, x_2; U) = \prod_{i=x_1}^{x_2-1} \prod_{j=i+1}^{x_2} \theta(\Gamma - U_i + U_j) \theta(U_j - U_{x_1}) \quad (14.287)$$

with no other constraints, since outside the edge sites the potential is at $+\infty$. We may now express the probabilities of renormalized landscape in terms of the initial landscape as

$$N_{\Gamma}(x_L, u_L; u_1, x_1; \dots u_{2n-1}, x_{2n-1}; x_R, u_R) = \int DU \mathcal{P}[U] \prod_{j=1}^{2n-1} \delta(U_{x_j} - u_j) \quad (14.288)$$

$$\tilde{\Theta}_{\Gamma}^{+}(1, x_1; U) \Theta_{\Gamma}^{-}(x_1, x_2; U) \Theta_{\Gamma}^{+}(x_2, x_3; U) \dots \Theta_{\Gamma}^{+}(x_{2n-2}, x_{2n-1}; U) \tilde{\Theta}_{\Gamma}^{-}(x_{2n-1}, N; U) \quad (14.289)$$

The normalization (14.27) can be checked by using the following identity for any Γ

$$1 = \sum_{n=1}^K \sum_{1 \leq x_1 < x_2 < \dots < x_{2n-1} \leq N} \tilde{\Theta}_{\Gamma}^{+}(1, x_1; U) \Theta_{\Gamma}^{-}(x_1, x_2; U) \Theta_{\Gamma}^{+}(x_2, x_3; U) \dots \Theta_{\Gamma}^{+}(x_{2n-2}, x_{2n-1}; U) \tilde{\Theta}_{\Gamma}^{-}(x_{2n-1}, N; U) \quad (14.290)$$

When Γ is varied, the following important property of renormalization

$$\partial_{\Gamma} \Theta_{\Gamma}^{-}(x_1, x_2; U) = \sum_{y_1=x_1+1}^{x_2-1} \sum_{y_2=y_1+1}^{x_2-1} \Theta_{\Gamma}^{-}(x_1, y_1; U) \Theta_{\Gamma}^{+}(y_1, y_2; U) \delta(U_{y_1} - U_{y_2} - \Gamma) \Theta_{\Gamma}^{-}(y_2, x_2; U) \quad (14.291)$$

leads to the renormalization of the full measure (14.28).

14.10.3 Block product measures

For the case of block product measure (14.30), the explicit expressions for the bond measures and for the right edge read

$$B_{\Gamma}^{\pm}(u_2, x_2; u_3, x_3) = \int \prod_{k=x_2}^{x_3} dU_k \delta(U_{x_2} - u_2) \delta(U_{x_3} - u_3) \Theta_{\Gamma}^{\pm}(x_2, x_3; U) \exp - \sum_{i=x_2}^{x_3-1} S_i[U_{i+1}, U_i] \quad (14.292)$$

$$E_{\Gamma}^{+}(x_R; u_1, x_1) = \int \prod_{k=1}^{x_1} dU_k \delta(U_{x_1} - u_1) \tilde{\Theta}_{\Gamma}^{+}(1, x_1; U) \exp - \sum_{i=1}^{x_1-1} S_i[U_{i+1}, U_i] \Phi_0(U_1) \quad (14.293)$$

with a symmetric expression for the left edge.

14.11 Renormalization procedure for periodic landscape

In the Section 14.2, we have described the renormalization procedure for an interval (x_L, x_R) with fixed boundary conditions. In this Appendix, we briefly describe the changes that are necessary for the case of a periodic landscape U_1, \dots, U_N with $U_{N+1} = U_1$. The number of extrema is necessarily even in the initial landscape as well as in the renormalized landscape. The renormalized landscape at scale Γ can thus contain $2n$ extrema at positions $1 \leq x_1 < x_2 < \dots < x_{2n} \leq N$ and x_1 can be either a minimum or a maximum. As Γ increases there are also samples such that all barriers in the systems are smaller than Γ , corresponding to $n = 0$.

The normalization identity analogous to (14.290) which allows to treat the periodic case reads

$$1 = G_0(\Gamma, U) + \sum_{n=1}^K \sum_{1 \leq x_1 < x_2 < \dots < x_{2n} \leq N} \Theta_{\Gamma}^{+}(x_1, x_2; U) \Theta_{\Gamma}^{-}(x_2, x_3; U) \dots \Theta_{\Gamma}^{+}(x_{2n-1}, x_{2n}; U) \Theta_{\Gamma}^{-}(x_{2n}, x_1; U) \quad (14.294)$$

$$\Theta_{\Gamma}^{-}(x_1, x_2; U) \Theta_{\Gamma}^{+}(x_2, x_3; U) \dots \Theta_{\Gamma}^{-}(x_{2n-1}, x_{2n}; U) \Theta_{\Gamma}^{+}(x_{2n}, x_1; U) \quad (14.295)$$

where

$$G_0(\Gamma, U) = \prod_{i=0}^N \prod_{j=0}^N \theta(\Gamma - U_j + U_i) \theta(\Gamma - U_i + U_j) \quad (14.296)$$

is non zero if all barriers in the systems are smaller than Γ .

Integrating over the measure $\int DU \mathcal{P}(U)$, normalized by Z , each term yields:

$$Z = N_{\Gamma}^{(0)} + \sum_{n=1}^K \int_{u_1, \dots, u_{2n}} \sum_{1 \leq x_1 < x_2 < \dots < x_{2n} \leq N} N_{\Gamma}^{(2n, -)}(u_1, x_1; \dots, u_{2n}, x_{2n}) + N_{\Gamma}^{(2n, +)}(u_1, x_1; \dots, u_{2n}, x_{2n}) \quad (14.297)$$

where the symbols \pm denote whether the bond $[x_{2n}, x_1]$ is \pm . RSRG recursion relations analogous to (14.28) may then be written, the only new RSRG equation being the growing of $N_{\Gamma}^{(0)}$ upon the decimation of the samples with only two extrema left.

Block product measure, involving only B_{Γ}^{\pm} can be also written in an obvious way as in (14.30), and the above normalization identity can be written:

$$Z = N_{\Gamma}^{(0)} + \sum_{n=1}^K \text{Tr}(B_{\Gamma}^{+} B_{\Gamma}^{-})^n + \sum_{n=1}^K \text{Tr}(B_{\Gamma}^{-} B_{\Gamma}^{+})^n \quad (14.298)$$

each term, all integrations excluded, giving the desired $N_{\Gamma}^{(2n, \pm)}$.

Note that although the starting landscape here can be the same as the one considered in Section 14.2 by imposing $U_1 = U_N$ in (14.25), the definition of the renormalized landscape here is different from the one in Section 14.2 for fixed boundary conditions. Here one allows consideration of a bond $[x_{2n}, x_1]$, which can be decimated, whereas in the case with infinite left and right boundaries, the decimation of the leftmost and rightmost bonds is not possible. In the periodic case, all the bonds can be decimated, resulting eventually in the $G_0(\Gamma)$ factor.

14.12 Derivation of the explicit solutions for a Schrodinger measure

This Appendix contains the technical details of Section (14.3).

14.12.1 Solution by a path-integral method

Basic Path-integral

We first consider the following path integral

$$F_{[u_a, u_b]}(u_0, x_0, u, x) = \int_{U_{x_0=u_0}}^{U_x=u} DU \exp - \int dx \left(\frac{1}{4} \left(\frac{dU}{dx} \right)^2 + V[U] \right) \quad (14.299)$$

where the sum is over paths which remain in the interval $]u_a, u_b[$ for $x_0 < x < x_1$. Seen as a function of (u, x) , it satisfies the Schrodinger equation

$$\partial_x F = \partial_u^2 F - V(u)F \quad (14.300)$$

with the initial condition at $x = x_0$

$$F(u, x_0) = \delta(u - u_0) \quad (14.301)$$

and the absorbing boundary conditions at $u = u_a$ and $u = u_b$

$$F(u_a, x) = 0 \quad (14.302)$$

$$F(u_b, x) = 0 \quad (14.303)$$

The Laplace transform with respect to $(x - x_0)$

$$F(u, p) = \int_{x_0}^{+\infty} dx e^{-p(x-x_0)} F(u, x) \quad (14.304)$$

satisfies the system

$$\partial_u^2 F - V(u)F = pF - \delta(u - u_0) \quad (14.305)$$

$$F(u_a, p) = 0 \quad (14.306)$$

$$F(u_b, p) = 0 \quad (14.307)$$

In terms of (14.53), we construct two solutions of the equation (14.54) which vanish respectively at u_a and u_b as:

$$\Phi_-(u, p; u_a) = K(u_a, u, p) \quad (14.308)$$

$$\Phi_+(u, p; u_b) = K(u, u_b, p) \quad (14.309)$$

Their wronskian (also independent of u) read:

$$W(p; u_a, u_b) = \Phi'_-(u_0, p; u_a) \Phi_+(u_0, p; u_b) - \Phi_-(u_0, p; u_a) \Phi'_+(u_0, p; u_b) = K(u_a, u_b, p) \quad (14.310)$$

The solution of the above equations (14.307) now read:

$$\begin{aligned}\hat{F}_{[u_a, u_b]}(u, p|u_0) &= \frac{1}{W(p; u_a, u_b)} \Phi_-(u, p; u_a) \Phi_+(u_0, p; u_b) = \frac{K(u_a, u, p) K(u_0, u_b, p)}{K(u_a, u_b, p)} & \text{if } u_a \leq u \leq u_b \quad (14.311) \\ \hat{F}_{[u_a, u_b]}(u, p|u_0) &= \frac{1}{W(p; u_a, u_b)} \Phi_+(u, p; u_b) \Phi_-(u_0, p; u_a) = \frac{K(u_a, u_0, p) K(u, u_b, p)}{K(u_a, u_b, p)} & \text{if } u_0 \leq u \leq u_b \quad (14.312)\end{aligned}$$

The probability that the path has remained in the interval $]u_a, u_b[$ at time x

$$S_{[u_a, u_b]}(x|u_0, x_0) = \int_{u_a}^{u_b} du F_{[u_a, u_b]}(u, x|u_0, x_0) \quad (14.313)$$

satisfies

$$-\partial_x S_{[u_a, u_b]}(x|u_0, x_0) = r_{[u_a, u_b]}^a(x|u_0, x_0) + r_{[u_a, u_b]}^b(x|u_0, x_0) \quad (14.314)$$

where $r^{(u_a)}$ and $r^{(u_b)}$ represent the probability to be absorbed between "time" x and $x + dx$ at the boundary $u = u_a$ and $u = u_b$ respectively. They read:

$$r_{[u_a, u_b]}^a(x|u_0, x_0) = [\partial_u F_{[u_a, u_b]}(u, x|u_0, x_0)]|_{u=u_a} \quad (14.315)$$

$$r_{[u_a, u_b]}^b(x|u_0, x_0) = -[\partial_u F_{[u_a, u_b]}(u, x|u_0, x_0)]|_{u=u_b} \quad (14.316)$$

In Laplace transform with respect to $(x - x_0)$, they have the simple form

$$\hat{r}_{[u_a, u_b]}^a(p; u_0) = \frac{\Phi_+(u_0, p; u_b)}{\Phi_+(u_a, p; u_b)} \quad (14.317)$$

$$\hat{r}_{[u_a, u_b]}^b(p; u_0) = \frac{\Phi_-(u_0, p; u_a)}{\Phi_-(u_b, p; u_a)} \quad (14.318)$$

We are now in position to evaluate the constrained path-integral $B_{\Gamma}^-(u_1, x_1; u_2, x_2)$ (14.50).

Expression of $B_{\Gamma}^-(u_1, x_1; u_2, x_2)$ for the case $u_2 = u_1 + \Gamma$

We first consider the function $B_{\Gamma}^-(u_1, x_1; u_2, x_2)$ for an ascending bond with $u_2 = u_1 + \Gamma$. Setting $u_1 = u_a$, the distribution of x_2 is the distribution of the exit time at the boundary $u_b = u_a + \Gamma$ starting from $u_0 = u_a + \epsilon$ without being absorbed by the boundary at u_a . We thus have to consider the exit probability $r_{[u_a, u_b]}^b(x|u_0, x_0)$ computed in (14.318), for the particular case $u_0 = u_a + \epsilon$, $u_b = u_a + \Gamma$

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left(\frac{1}{\epsilon} r_{[u_a, u_a + \Gamma]}^b(x|u_a + \epsilon, x_0) \right) = B_{[u_a, u_a + \Gamma]}^-(x - x_0) \quad (14.319)$$

where the function $B_{[u_a, u_a + \Gamma]}^-(x - x_0)$ is defined by its Laplace transform

$$\hat{B}_{[u_a, u_a + \Gamma]}^-(p) = \partial_{u_0} \hat{r}_{[u_a, u_b]}^b(p; u_0)|_{u_0=u_a, u_b=u_0+\Gamma} \quad (14.320)$$

$$= \frac{1}{K(u_a, u_a + \Gamma, p)} \quad (14.321)$$

Expression of $B_{\Gamma}^-(u_1, x_1; u_2, x_2)$ for the case $u_2 > u_1 + \Gamma$

We now consider the function $B_{\Gamma}^-(u_1, x_1; u_2, x_2)$ for an ascending bond with $u_2 > u_1 + \Gamma$. To take into account the constraint of no returns of more than Γ , we write the recursion equation

$$B_{\Gamma}^-(u_0, x_0; u + \Delta u, x) = \int_{x_0}^x dx' B_{\Gamma}^-(u_0, x_0; u, x') r_{[u_a=u-\Gamma, u_b=u+\Delta u]}^b(x|u, x') \quad (14.322)$$

i.e. we obtain in Laplace with respect to $(x - x_0)$ the differential equation

$$\partial_u \hat{B}_\Gamma^- u_0, ; u; p) = \hat{B}_\Gamma^- u_0, ; u; p) \partial_{u_b} r_{[u_a, u_b]}^b(p, u)|_{u_a=u-\Gamma, u_b=u} = \hat{B}_\Gamma^- u_0, ; u; p) Z^-(p, u - \Gamma, u) \quad (14.323)$$

with

$$Z^-(p, u_1, u_2) = -\frac{\partial_{u_2} K(u_1, u_2, p)}{K(u_1, u_2, p)} \quad (14.324)$$

Thus using the initial condition at $u_1 = u_0 + \Gamma$ (14.321), we get

$$B_\Gamma^- u_0, u, p) = B_\Gamma^- u_0, u_0 + \Gamma, p) \exp \int_{u_0+\Gamma}^u du' Z^-(p, u' - \Gamma, u') \quad (14.325)$$

leading to (14.52) given in the text.

Edge bonds

We now consider the function $E_\Gamma^-(u, x; u_R, x_R)$ for the ascending edge bond near the boundary condition $U(x = x_R^+) = +\infty$. Given u_R , the only constraint is that $u \leq u_R$ is the deepest minimum with no descending return of more than Γ in between. If $u = u_R$, we simply have $x = x_R$, whereas for $u < u_R$ we may again write an equation similar to (14.322) and we finally obtain in Laplace variable with respect to $(x_R - x)$ the result (14.56) given in the text.

14.12.2 Solution from the RSRG equations : Factorized Ansatz and Liouville equation

The factorized Ansatz (14.61) for B_Γ^- leads to the following RG equation

$$\partial_\Gamma \ln B_\Gamma^- u; u''; p) = \int_u^{u''-\Gamma} du' (B_\Gamma^- u'; u' + \Gamma; p))^2 \quad (14.326)$$

i.e. from the knowledge of $B_\Gamma^- u; u + \Gamma; p)$ for all (Γ, u) one can reconstruct $B_\Gamma^- u; u''; p)$ for all (Γ, u, u'') . This RG equation can be integrated if we introduce an auxiliary function $\Phi(u, v)$ defined by (14.62) since it yields

$$\int_u^{u''-\Gamma} du' \partial_1 \partial_2 \Phi(u', u' + \Gamma) = \int_{u+\Gamma}^{u''} dv \partial_1 \partial_2 \Phi(v - \Gamma, v) \quad (14.327)$$

$$= -\partial_\Gamma \int_{u+\Gamma}^{u''} du' \partial_2 \Phi(u' - \Gamma, u') - \partial_\Gamma \Phi(u, u + \Gamma) \quad (14.328)$$

and thus, integrating (14.326) over Γ one gets

$$B_\Gamma^- p; u; u'') = \exp(-\Phi(u, u + \Gamma)) \exp - \int_{u+\Gamma}^{u''} du' \partial_2 \Phi(u' - \Gamma, u') \quad (14.329)$$

$$= \exp(-\Phi(u'' - \Gamma, u'')) \exp - \int_{u''-\Gamma}^u du' \partial_1 \Phi(u', u' + \Gamma) \quad (14.330)$$

which is indeed of the form (14.61) with

$$A_\Gamma^L(u) = \exp - \int^u du' \partial_1 \Phi(u', u' + \Gamma) \quad (14.331)$$

$$A_\Gamma^R(u'') = \exp(-\Phi(u'' - \Gamma, u'')) \frac{1}{A_\Gamma^L(u'' - \Gamma)} \quad (14.332)$$

The consistency of (14.62) now requires the famous Liouville equation (14.63) for the function $\Phi(u_1, u_2)$.

As is well known its most general local solution is of the form (Liouville 1850)

$$\Phi(u_1, u_2) = \ln\left(\frac{f_L(u_1) - f_R(u_2)}{(f'_L(u_1)f'_R(u_2))^{1/2}}\right) \quad (14.333)$$

where $f_L(u)$ and $f_R(u)$ are two arbitrary analytic functions. The alternative form (14.64) can be obtained by noting that the Liouville equation (14.63) implies

$$\partial_1(e^{-\Phi}\partial_2^2 e^{\Phi}) = 0 \quad (14.334)$$

$$\partial_2(e^{-\Phi}\partial_1^2 e^{\Phi}) = 0 \quad (14.335)$$

and thus there must exist two functions $V_L(u)$ and $V_R(u)$ such that e^{Φ} satisfies the two corresponding Schrodinger equations [36]. The connexion between the two representations is made by noting that $f_L(u) = \psi_L^{(1)}(u)/\psi_L^{(2)}(u)$, $f_R(u) = \psi_R^{(1)}(u)/\psi_R^{(2)}(u)$ and

$$\psi_L^{(1)}(u) = (-w_L)^{1/2} \frac{f_L(u)}{\sqrt{f'_L(u)}} \quad (14.336)$$

$$\psi_L^{(2)}(u) = (-w_L)^{1/2} \frac{1}{\sqrt{f'_L(u)}} \quad (14.337)$$

and similarly for ψ_R and f_R . One also has $V_L(u) = -\frac{1}{2}\frac{f''_L(u)}{f'_L(u)} - \frac{3}{2}\left(\frac{f''_L(u)}{f'_L(u)}\right)^2$ and in general a second solution of the Schrodinger equation can be obtained from a first one $\psi_L^{(2)}(u)$ as $\psi_L^{(1)}(u) = \psi_L^{(2)}(u) \int^u (\psi_L^{(2)}(u))^{-2}$. Finally one finds that one can rewrite (14.330) as

$$B_{\Gamma}^{-}p; u; u'' = \frac{(f'_L(u)f'_R(u''))^{1/2}}{f_L(u) - f_R(u + \Gamma)} \exp\left(\int_{f_R(u+\Gamma)}^{f_R(u'')} \frac{df_R}{f_L(u(f_R) - \Gamma) - f_R}\right) \quad (14.338)$$

$$= \frac{(f'_L(u)f'_R(u''))^{1/2}}{f_L(u'' - \Gamma) - f_R(u'')} \exp\left(\int_{f_L(u)}^{f_L(u'' - \Gamma)} \frac{df_L}{f_L - f_R(v(B_L) + \Gamma)}\right) \quad (14.339)$$

where $u(B_R)$ is the inverse function of $f_R(u)$, i.e. $f_R(u(y)) = y$ and $v(f_L)$ the inverse function of $f_L(u)$.

Finally, assuming that $B_{\Gamma}^{-}u; u''; p = A_{\Gamma}^{(1)}(u)A_{\Gamma}^{(2)}(u'')$ together with delta function initial conditions, yields for the edge blocks

$$E_{\Gamma}^{+}(u_L, u, p) = \frac{A_{\Gamma}^L(u)}{A_{\Gamma}^L(u_L)} \quad (14.340)$$

$$E_{\Gamma}^{-}(u, u_R, p) = \frac{A_{\Gamma}^L(u)}{A_{\Gamma}^L(u_R)} \quad (14.341)$$

14.13 Configurations presenting two nearly degenerate minima

14.13.1 Distribution of the absolute minimum for the toy model on an arbitrary interval

The absolute minimum of the toy model on a arbitrary interval $[x_L, x_R]$ with fixed boundary conditions (u_L, u_R) is given by the $\Gamma \rightarrow \infty$ limit of the renormalized landscape containing only one valley left (14.89)

$$Z(u_L, x_L, u_R, x_R) = \int_{-\infty}^{\min(u_L, u_R)} du \int_{x_L}^{x_R} dx N_{\infty}^{(2)}(x_L, u_L - u, x, u_R - u, x_R) \quad (14.342)$$

where

$$N_{\infty}^{(2)}(x_L, u_L - u, x, u_R - u, x_R) = e^{\frac{\mu^2}{12}x_L^3 - \frac{\mu}{2}x_L(u_L - u)} \tilde{E}_{\infty}^{+}(u_L - u, 0, x - x_L) e^{+\frac{\mu}{2}x_R(u_R - u) - \frac{\mu^2}{12}x_R^3} \tilde{E}_{\infty}^{-}(0, u_R - u, x_R - x) \quad (14.343)$$

describes the statistical properties of the position x and the energy u of the absolute minimum of the interval given the boundary conditions (u_L, x_L) and (u_R, x_R) . To obtain the edge blocks \tilde{E} (14.91) in the limit $\Gamma \rightarrow \infty$, we need the function $K(u_1, u_2)$ in the regime $u_2 = u_1 + \Gamma \rightarrow \infty$, with u_1 fixed. Using the asymptotic expressions of Airy functions (14.363), we thus have

$$K(u_1, u_2) \underset{u_2 \rightarrow \infty}{\simeq} \frac{\pi}{a} Ai(au_1 + bp) Bi(au_2 + bp) \quad (14.344)$$

and the edge blocks at $\Gamma = \infty$ are simply given by

$$\tilde{E}_{\infty}^{+}(F, 0, p) = \tilde{E}_{\infty}^{-}(0, F, p) = \frac{Ai(aF + bp)}{Ai(bp)} \quad (14.345)$$

The function $N_{\infty}^{(2)}$ (14.343) describing the distribution of the minimum thus reads

$$N_{\infty}^{(2)}(x_L, u_L - u, x, u_R - u, x_R) = e^{\frac{\mu^2}{12}(x_L^3 - x_R^3) + \frac{\mu}{2}x_R(u_R - u) - \frac{\mu}{2}x_L(u_L - u)} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda_1}{2\pi} e^{i\lambda_1(x - x_L)} \frac{Ai(a(u_L - u) + bi\lambda_1)}{Ai(bi\lambda_1)} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda_2}{2\pi} e^{i\lambda_2(x_R - x)} \frac{Ai(a(u_R - u) + bi\lambda_2)}{Ai(bi\lambda_2)} \quad (14.346)$$

14.13.2 Probability to have two nearly degenerate minima

To study the measure of configurations with two degenerate minima, we need to consider (14.346) for the special case where the absolute minimum u coincides with the left boundary energy u_L

$$N_{\infty}^{(2)}(x_L, 0, x, u_R - u_L, x_R) = e^{\frac{\mu^2}{12}(x_L^3 - x_R^3) + \frac{\mu}{2}x_R(u_R - u_L)} \delta(x - x_L) \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda_2}{2\pi} e^{i\lambda_2(x_R - x)} \frac{Ai(a(u_R - u_L) + bi\lambda_2)}{Ai(bi\lambda_2)} \quad (14.347)$$

For the case $u_R = u_L + \epsilon$ with $\epsilon \rightarrow 0$, this yields for $x_L < x_R$

$$N_{\infty}^{(2)}(x_L, 0, x, \epsilon, x_R) = \delta(x - x_L) e^{\frac{\mu^2}{12}(x_L^3 - x_R^3)} \left(1 + \frac{\mu}{2}x_R\epsilon + O(\epsilon^2) \right) \delta(x_R - x) + a\epsilon \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda_2}{2\pi} e^{i\lambda_2(x_R - x)} \frac{Ai'(bi\lambda_2)}{Ai(bi\lambda_2)} + O(\epsilon^2) \quad (14.348)$$

$$= a\epsilon \delta(x - x_L) e^{\frac{\mu^2}{12}(x_L^3 - x_R^3)} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda_2}{2\pi} e^{i\lambda_2(x_R - x_L)} \frac{Ai'(bi\lambda_2)}{Ai(bi\lambda_2)} \quad (14.349)$$

For the case $x_R \rightarrow \infty$, after integration over the barrier $(u_R - u_L)$, the formula (14.347) becomes using (14.345, 14.99, 14.104)

$$N_{\infty}^{(2)}(x_L, 0, x, +\infty) \equiv \lim_{x_R \rightarrow +\infty} \int_{u_L}^{+\infty} du_R N_{\infty}^{(2)}(x_L, 0, x, u_R - u_L, x_R) = e^{\frac{\mu^2}{12}x_L^3} \delta(x - x_L) \quad (14.350)$$

and similarly

$$N_{\infty}^{(2)}(+\infty, x, 0, x_R) = e^{-\frac{\mu^2}{12}x_R^3} \delta(x - x_R) g_{\infty}(-x_R) \quad (14.351)$$

Putting together the three results (14.349, 14.350, 14.351), we get the formula (14.131) for the configurations with two nearly degenerate minima.

14.14 Study of two valleys configurations in the toy model

This Appendix is dedicated to the study of the two valleys configurations described by (14.178). Since the barriers F_1 and F_3 are larger than Γ satisfying $a\Gamma \gg 1$, we may use the asymptotic expression (14.363) for the B_i to get

$$N_{\Gamma}^{(4)}(x_1, F_1, x_2, F_2, x_3) \underset{\Gamma \rightarrow \infty}{\simeq} \frac{e^{\frac{\mu}{2}x_2(F_1-F_2)}}{\pi^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda_1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda_2}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda_3}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda_4}{2\pi} \quad (14.352)$$

$$\frac{e^{i(\lambda_1+\lambda_2)x_1+i(\lambda_3-\lambda_2)x_2-i(\lambda_2+\lambda_3)x_3}}{Ai(bi\lambda_1)Ai(b\lambda_2)Ai(b\lambda_3)Ai(bi\lambda_4)} (aF_1 + bi\lambda_2')^{1/4} (aF_3 + bi\lambda_3')^{1/4} e^{-\frac{2}{3}(aF_1+bi\lambda_2')^{3/2}-\frac{2}{3}(aF_3+bi\lambda_3')^{3/2}} \quad (14.353)$$

At large Γ , the scaling region for the barrier is thus

$$F = \Gamma + \frac{\eta}{a\sqrt{a\Gamma}} \quad (14.354)$$

with $\eta \geq 0$ of order 1. The barriers are thus concentrated in the vicinity of Γ . Integration over the two barriers F_1, F_2 yields at leading order after the rescaling (14.354)

$$\int_{\Gamma}^{+\infty} dF_1 \int_{\Gamma}^{+\infty} dF_2 N_{\Gamma}^{(4)}(x_1, F_1, x_2, F_2, x_3) \underset{\Gamma \rightarrow \infty}{\simeq} \quad (14.355)$$

$$\frac{a^2(a\Gamma)^{-1/2}}{\pi} e^{-\frac{4}{3}(a\Gamma)^{3/2}} \frac{1}{1 + \frac{(a^2x_2)^2}{a\Gamma}} g_{\infty}(-x_1) g_{\infty}(x_1 - x_2 + b(a\Gamma)^{1/2}) g_{\infty}(x_2 - x_3 + b(a\Gamma)^{1/2}) \quad (14.356)$$

in terms of (14.104).

We now integrate over the maximum x_2 . The constraints of integration $x_1 < x_2 < x_3$ may be forgotten since the domains $x_2 < x_1$ and $x_2 > x_3$ are highly suppressed with the functions $g_{\infty}(x_1 - x_2 + b(a\Gamma)^{1/2})$ and $g_{\infty}(x_2 - x_3 + b(a\Gamma)^{1/2})$. The measure for the two minima thus read

$$M_{\Gamma}^{(4)}(x_1, x_3) \equiv \int_{x_1}^{x_3} dx_2 \int_{\Gamma}^{+\infty} dF_1 \int_{\Gamma}^{+\infty} dF_2 N_{\Gamma}^{(4)}(x_1, F_1, x_2, F_2, x_3) \underset{\Gamma \rightarrow \infty}{\simeq} \frac{g_{\infty}(-x_1)g_{\infty}(x_3)}{a^2} e^{\frac{4}{3}(a\Gamma)^{3/2}} \quad (14.357)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda_1}{2\pi} \frac{e^{-i\lambda_1(x_1+b(a\Gamma)^{1/2})}}{Ai(bi\lambda_1)} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda_2}{2\pi} \frac{e^{-i\lambda_2(-x_3+b(a\Gamma)^{1/2})}}{Ai(bi\lambda_2)} e^{-b(a\Gamma)^{1/2}|\lambda_1-\lambda_2|} \quad (14.358)$$

which yields (14.131) for $a\Gamma \gg 1$.

14.15 Useful properties of Airy functions

The Airy functions Ai and Bi are two independent solutions of the differential equation

$$\phi''(z) = z\phi(z) \quad (14.359)$$

of Wronskian

$$AiBi' - BiAi' = \frac{1}{\pi} \quad (14.360)$$

An immediate consequence is

$$\frac{d}{dx} \left(\frac{Bi(x)}{Ai(x)} \right) = \frac{1}{\pi Ai(x)^2} \quad (14.361)$$

The asymptotic expressions of the Airy functions at large argument read

$$Ai(z) \underset{Re(z) \rightarrow +\infty}{\simeq} \frac{1}{2\sqrt{\pi}} z^{-\frac{1}{4}} e^{-\frac{2}{3}z^{3/2}} \quad (14.362)$$

$$Bi(z) \underset{Re(z) \rightarrow +\infty}{\simeq} \frac{1}{\sqrt{\pi}} z^{-1/4} e^{\frac{2}{3}z^{3/2}} \quad (14.363)$$

Another useful property is

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \frac{Bi(ix)}{Ai(ix)} = \pm i \quad (14.364)$$

References

- [1] D.S. Fisher and D.A. Huse, Phys. Rev. B **38** 373 (1988) ; Phys. Rev. B **38** 386 (1988).
- [2] M. Mezard, G. Parisi and M. Virasoro, "Spin glass theory and beyond" world Scientific, Singapore (1987).
- [3] D.S. Fisher, P. Le Doussal and C. Monthus, cond-mat/9710270, Phys. Rev. Lett. **80** 3539 (1998).
- [4] P. Le Doussal, C. Monthus and D. S. Fisher cond-mat/9811300, Phys. Rev. E. **59** 4795 (1999).
- [5] Y. G. Sinai Theor. Probab. Its Appl. **27** 247 (1982).
- [6] H. Kesten, M. Koslov, F. Spitzer, Compos. Math. **30** 145 (1975); H. Kesten, Physica **138** A 299 (1986).
- [7] B. Derrida, J. Stat. Phys. **31** 433 (1983).
- [8] J. P. Bouchaud, A. Comtet, A. Georges, P. Le Doussal Europhys. Lett. **3** 653 (1987), Ann Phys. **201** 285 (1990).
- [9] D.S. Fisher, P. Le Doussal, C. Monthus, cond-mat/0012290, Phys. Rev. E. (2001).
- [10] P. Le Doussal, C. Monthus cond-mat/ Phys. Rev. E. reaction diffusion
- [11] C. Dasgupta and S.K. Ma Phys. Rev. B **22** 1305 (1980).
- [12] D.S. Fisher, Phys. Rev. B **50** 3799 (1994). D.S. Fisher, Phys. Rev. B **51** 6411 (1995).
- [13] A.J. Bray, B. Derrida and C. Godreche Europhys. Lett. **27** 175 (1994). A.D. Rutenberg and A.J. Bray Phys. Rev. E **50** 1900 (1994). A.J. Bray and B. Derrida Phys. Rev. E **51** R1633 (1995). B. Derrida, C. Godreche and I. Yekutieli Europhys. Lett. **12** 385 (1990) and Phys. Rev. A **44** 6241 (1991).
- [14] J. Villain, B. Semeria, F. Lancon and L. Billard, J. Phys. C **16** 6153 (1983).
- [15] J. Villain, J. Phys. A: Math. Gen. **21** L1099 (1988).
- [16] J. Villain and B. Semeria, J. Phys. Lett. **44** L889 (1983).
- [17] A. I. Larkin Sov. Phys. JETP **31** 784 (1970).

- [18] U. Schulz, J. Villain, E. Brezin and H. Orland, J. Stat. Phys. **51** 1 (1988).
- [19] D.S. Fisher and D.A. Huse, Phys. Rev. B **43** 10728 (1991).
- [20] T. Hwa and D.S. Fisher, Phys. Rev. B **49** 3136 (1994).
- [21] M. Mezard and G. Parisi, J. Phys. I **1** 809 (1991).
- [22] M. Mezard and G. Parisi, J. Phys. I **2** 2231 (1992).
- [23] G. Parisi, J. Phys. (France) **51** 1595 (1990).
- [24] J.P. Bouchaud and H. Orland, J. Stat. Phys. **61** 877 (1990).
- [25] M. Mezard, J. Phys. (France) **51** 1831 (1990).
- [26] M. Prahofer and H. Spohn, mathCO/9903134.
- [27] J. M. Burgers, "The nonlinear diffusion equation", Reidel (1974).
- [28] L. Frachebourg and Ph. A. Martin, cond-mat/9905056.
- [29] M. Kardar, G. Parisi and Y.C. Zhang, Phys. Rev. Lett. **56** 889 (1986).
- [30] S. Esipov and T.J. Newman, Phys. Rev. E **48** 1046 (1993) ; S. Esipov, Phys. Rev. E **49** 2070 (1994).
- [31] A. Engel, Nucl. Phys. B **410** 617 (1993).
- [32] A. Cavagna, J. P. Garrahan, I. Giardinà cond-mat/9812373, Phys. Rev. E, **59**, 2808 (1999).
- [33] A. Prevost, E. Rolley and C. Guthmann, Phys. Rev. Lett. **83** (1999) 348 and Phys. Rev. B **65** (2002) 064517. S. Moulinet, C. Guthmann and E. Rolley, in preparation (to be submitted to EPJ B).
- [34] D. Carpentier and P. Le Doussal Physical Review E **63** 026110 (2001).
- [35] H. Castillo and P. Le Doussal Phys. Rev. Lett. **86** 4859 (2001).
- [36] J. L. Gervais and A. Neveu Nucl. Phys. B **199** 59 (1982).
- [37] P. Groeneboom, Prob. Th. Rel. Fields **81** 79 (1989).
- [38] V. Dotsenko and M. Mezard, cond-mat/9611017.
- [39] P. Le Doussal and C. Monthus, in preparation.

15 О других моделях и приложениях

15.1 Другие модели диффузии

(пока это тут, потом мб перенесу в другое место. объединяет эти темы их низкая приоритетность.)

15.1.1 Амбиполярная диффузия

не интересно пока что

мотивация

теория

15.1.2 Подвижность ионов в растворах сильных электролитов

не интересно пока что

мотивация

теория

15.2 Reaction-Diffusion

(тут крутые моделирования)

15.2.1 Физическое описание

15.2.2 Моделирование

тут крутые уже сделанные модели.

<https://www.karlsims.com/rdtool.html?s=OLGcd>

15.3 Фазовая синхронизация в кинетике

(пока это в колебаниях написано.)

15.3.1 Описание синхронизации

Синхронизация по Белану

(!! разберу скоро.)

Модель Курамото Рассмотрим ансамбль из $N \gg 1$ взаимодействующих фазовых осцилляторов, каждый из которых описывается фазовой переменной $\theta_i(t)$, принимающей значения от $-\pi$ до $+\pi$, и постоянной собственной частотой Ω_i , задающей скорость перемещения изображающей точки соответствующего осциллятора по фазовой окружности в отсутствие взаимодействия. В рамках простейшей модели синхронизации, предложенной Курамото, взаимодействие между осцилляторами носит непрерывный и нелокальный характер: в любой момент времени каждый осциллятор взаимодействует со всеми остальными. Более конкретно, динамика фазы i -го осциллятора описывается уравнением

$$\dot{\theta}_i = \Omega_i + \frac{K}{N} \sum_{j=1}^N \sin(\theta_j - \theta_i)$$

где $K \geq 0$ - это константа взаимодействия. Множитель $1/N$ введен, чтобы обеспечить конечность силы взаимодействия в пределе $N \rightarrow \infty$.

Во всех дальнейших рассуждениях мы будем предполагать, что собственные частоты осцилляторов представляют собой независимые случайные величины с одинаковой плотностью распределения $g(\Omega)$, которая имеет вид симметричного пика, центрированного в некоторой точке Ω_0 . Ниже мы увидим, что несмотря на разброс собственных частот осцилляторов, при превышении константой взаимодействия K некоторого порогового значения K_c в модели Курамото происходит синхронизация фаз.

В качестве количественной меры степени синхронности ансамбля осцилляторов удобно выбрать комплексное число

$$re^{i\psi} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N e^{i\theta_j}$$

которое мы будем называть параметром порядка. Этот двухкомпонентный параметр можно себе представить как вектор с началом в центре фазовой окружности. Угол поворота этого вектора, ψ , есть средняя фаза осцилляторов ансамбля. Длина вектора, r , является мерой эффективности фазировки осцилляторов вблизи средней фазы. Если синхронизация в системе отсутствует, то осцилляторы равномерно распределены по фазовой окружности и $r = 0$. Если ансамбль полностью синхронизован, то есть все осцилляторы движутся как одна точка на фазовой окружности, то $r = 1$. Таким образом, параметр порядка (2) описывает коллективное поведение ансамбля осцилляторов как целого.

Метод среднего поля Воспользуемся известным из статистической механики методом среднего поля, в рамках которого взаимодействие отдельной частицы с ее окружением учитывается посредством введения некоторого эффективного поля, наложенного на все частицы системы. В нашем случае очевидное тождество

$$re^{i(\psi-\theta_i)} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N e^{i(\theta_j-\theta_i)},$$

позволяет переписать уравнение динамики отдельного осциллятора как

$$\dot{\theta}_i = \Omega_i + Kr \sin(\psi - \theta_i)$$

Теперь взаимодействие каждого осциллятора со всеми остальными выражено через среднеполевые характеристики: фаза осциллятора "притягивается" к средней фазе ψ , причем сила притяжения пропорциональна степени когерентности ансамбля r .

В пределе $N \rightarrow +\infty$ флуктуациями "макроскопических" параметров r и ψ можно пренебречь. Разумно тогда предположить, что в установившемся режиме коллективная фаза ψ вращается с частотой Ω_0 , а амплитуда r постоянна. Выполним замену переменных $\theta_i \rightarrow \theta_i + \Omega_0 t$, что соответствует переходу в систему отсчета, вращающуюся с частотой Ω_0 . Выбрав соответствующим образом начало отсчета на фазовой окружности, можно положить $\psi = 0$. Тогда уравнение (4) приобретает вид

$$\dot{\theta}_i = \omega_i - Kr \sin \theta_i$$

где $\omega_i = \Omega_i - \Omega_0$.

Пояснение Рассмотрим вещественную часть комплексного параметра порядка $X \equiv \Re \{ re^{i\psi} \} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i$, где $x_i \equiv \cos \theta_i$. Согласно неравенству Чебышева

$$\Pr [|X - \mu_X| \geq \delta] \leq \frac{\sigma_X^2}{\delta^2}$$

где

$$\mu_X \equiv \langle X \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle x_i \rangle = \mu_x,$$

$$\begin{aligned}
\sigma_X^2 &\equiv \langle X^2 \rangle - \langle X \rangle^2 = \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i \right)^2 - \mu_x^2 = \frac{1}{N^2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \langle x_i x_j \rangle - \mu_x^2 = \\
&= \frac{1}{N^2} \sum_{i \neq j} \langle x_i x_j \rangle + \frac{1}{N^2} \sum_{i=1}^N \langle x_i^2 \rangle - \mu_x^2 = \frac{1}{N^2} \sum_{i \neq j} \langle x_i x_j \rangle + \frac{\sigma_x^2 + \mu_x^2}{N} - \mu_x^2 \approx \\
&\approx \frac{1}{N^2} \sum_{i \neq j} \langle x_i \rangle \langle x_j \rangle + \frac{\sigma_x^2 + \mu_x^2}{N} - \mu_x^2 = \frac{N-1}{N} \mu_x^2 + \frac{\sigma_x^2 + \mu_x^2}{N} - \mu_x^2 = \frac{\sigma_x^2}{N},
\end{aligned}$$

где мы заменили $\langle x_i x_j \rangle \approx \langle x_i \rangle \langle x_j \rangle$, предполагая, что в силу слабого взаимодействия любых двух осцилляторов в пределе $N \gg 1$, их фазы можно считать статистически независимыми. Таким образом, с ростом N случайная переменная X все реже отклоняется от своего среднего значения

$$\Pr [|X - \mu_x| \geq \delta] \leq \frac{\sigma_x^2}{N\delta^2}$$

Плотность распределения фазы Анализируя Ур. (5), Курамото понял, что в зависимости от значений расстройки частоты все осцилляторы можно разделить на две группы: дрейфующие и покоящиеся. А именно, если $|\omega_i| \leq Kr$, то в соответствии с Ур. (5) возможна ситуация, когда соответствующий осциллятор имеет постоянную во времени фазу

$$\theta_i = \arcsin \frac{\omega_i}{Kr}$$

Если же $|\omega_i| > Kr$, то у уравнения (5) нет стационарного решения, и такой осциллятор неизбежно движется по фазовой окружности. Рассмотрим произвольно выбранный осциллятор. Совместная плотность распределения его фазы θ и расстройки частоты ω может быть представлена в виде $\rho(\theta, \omega) = n(\theta | \omega)g(\Omega_0 + \omega)$, где $n(\theta | \omega)$ - это условная плотность распределения фазы при заданном значении расстройки частоты. Последнюю запишем как

$$n(\theta | \omega) = n_{\text{lock}}(\theta | \omega)I(|\omega| \leq Kr) + n_{\text{drift}}(\theta | \omega)I(|\omega| > Kr).$$

Здесь

$$n_{\text{lock}}(\theta | \omega) = \delta\left(\theta - \arcsin \frac{\omega}{Kr}\right)$$

это плотность распределения фазы осциллятора, чья собственная частота находится достаточно близко к вершине распределения $g(\Omega)$, а $n_{\text{drift}}(\theta | \omega)$ - это распределение фазы осциллятора с достаточно большой расстройкой частоты, удовлетворяющая следующему кинетическому уравнению (уравнение Лиувилля)

$$\partial_t n(\theta | \omega) = -\partial_\theta [(\omega - Kr \sin \theta) n(\theta | \omega)]$$

Статистически стационарное решение этого уравнения имеет вид $n_{\text{drift}}(\theta | \omega) = \frac{J}{\omega - Kr \sin \theta}$, где поток J определяется из условия нормировки как

$$\begin{aligned}
J &= \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{\omega - Kr \sin \theta} = \sqrt{\omega^2 - K^2 r^2} \text{sign}(\omega - Kr) / (2\pi). \text{ То есть} \\
n_{\text{drift}}(\theta | \omega) &= \frac{\sqrt{\omega^2 - K^2 r^2}}{2\pi |\omega - Kr \sin \theta|}.
\end{aligned}$$

Уравнение самосогласования Построенная нами совместная плотность распределения $\rho(\theta, \omega)$ зависит от неизвестной амплитуды параметра порядка r . Ее

значение определяется из уравнения самосогласования

$$\begin{aligned}
 r &= \langle e^{i\theta} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \int_{-\pi}^{+\pi} d\theta \rho(\theta, \omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega g(\Omega_0 + \omega) \int_{-\pi}^{+\pi} d\theta n(\theta | \omega) e^{i\theta} = \\
 &= \int_{|\omega| \leq Kr} d\omega \int_{-\pi}^{+\pi} d\theta e^{i\theta} n_{lock}(\theta | \omega) + \int_{|\omega| > Kr} d\omega \int_{-\pi}^{+\pi} d\theta e^{i\theta} n_{drift}(\theta | \omega) = \\
 &= \int_{|\omega| \leq Kr} d\omega \int_{-\pi/2}^{+\pi/2} d\theta \cos \theta \delta\left(\theta - \arcsin \frac{\omega}{Kr}\right) g(\Omega_0 + \omega) + \\
 &+ \int_{|\omega| > Kr} d\omega \int_{-\pi}^{+\pi} d\theta \cos \theta \frac{\sqrt{\omega^2 - Kr^2}}{2\pi|\omega - Kr \sin \theta|} g(\Omega_0 + \omega) = \\
 &= \int_{-\pi/2}^{+\pi/2} d\theta \cos \theta \int_{|\omega| \leq Kr} d\omega \delta\left(\frac{\omega - Kr \sin \theta}{Kr \cos \theta}\right) g(\Omega_0 + \omega) = \\
 &= Kr \int_{-\pi/2}^{+\pi/2} d\theta \cos^2 \theta g(\Omega_0 + Kr \sin \theta).
 \end{aligned}$$

Выше мы воспользовались тем, что $-\pi/2 \leq \arcsin \frac{\omega_i}{Kr} \leq +\pi/2$. Отметим также, что дрейфующие осцилляторы дают нулевой вклад в параметр порядка в силу неизменности функции распределения $\rho(\theta, \omega)$ при одновременной смене знаков ее аргументов и предполагаемой симметричности функции $g(\Omega)$ относительно точки $\Omega = \Omega_0$.

Фазовый переход Итак

$$r = Kr \int_{-\pi/2}^{+\pi/2} d\theta \cos^2 \theta g(\Omega_0 + Kr \sin \theta)$$

При любом $K > 0$ у уравнения самосогласования всегда существует тривиальное решение $r = 0$, соответствующее декогерентному состоянию ансамбля осцилляторов. Чтобы выяснить, возможны ли в системе ненулевые значения параметра порядка, предположим, поделим уравнение (23) на r в предположении $r \neq 0$

$$K \int_{-\pi/2}^{+\pi/2} d\theta \cos^2 \theta g(\Omega_0 + Kr \sin \theta) = 1.$$

Далее, предположив дополнительно что $Kr \ll 1$, выполним разложение левой части в ряд Тейлора по r до квадратичного члена

$$\begin{aligned}
 K \left(g(\Omega_0) \int_{-\pi/2}^{+\pi/2} d\theta \cos^2 \theta + \frac{g''(\Omega_0)}{2} K^2 r^2 \int_{-\pi/2}^{+\pi/2} d\theta \cos^2 \theta \sin^2 \theta \right) &= 1 \\
 \frac{\pi}{2} g(\Omega_0) K + \frac{\pi}{16} g''(\Omega_0) K^3 r^2 &= 1.
 \end{aligned}$$

Отсюда видно, что когда K становится больше критического значения

$$K_c = \frac{2}{\pi g(\Omega_0)}$$

у уравнения самосогласования (23) появляется ненулевая ветвь решений.

(??? как это связано с теорией Ландау фазовых переходов?????)

Модель Сакагучи-Курамото Пусть эволюция фазы i -го осциллятора подчиняется уравнению

$$\dot{\theta}_i = \Omega_i + \frac{K}{N} \sum_{j=1}^N \sin(\theta_j - \theta_i) + \xi_i$$

где случайный процесс $\xi_i(t)$ представляет собой белый шум, заданный своим первым моментом и парным коррелятором

$$\langle \xi_i(t) \rangle = 0, \quad \langle \xi_i(t_1) \xi_j(t_2) \rangle = 2D\delta_{ij}\delta(t_1 - t_2)$$

Такое обобщение называется моделью Сакагучи-Курамото. После введения параметра порядка согласно формуле (2) и перехода в систему отсчета, вращающуюся с угловой скоростью Ω_0 , уравнение (28) может быть переписано как

$$\dot{\theta}_i = \omega_i - Kr \sin \theta_i + \xi_i$$

где как и выше $\omega_i = \Omega_i - \Omega_0$ обозначает расстройку фазы.

Уравнение Фоккера-Планка Эволюция условной плотности распределения $n(\theta | \omega)$ фазы осциллятора при заданном значении расстройки его частоты ω описывается уравнением Фоккера-Планка

$$\partial_t n(\theta | \omega) = -\partial_\theta [(\omega - Kr \sin \theta) n(\theta | \omega)] + D \partial_\theta^2 n(\theta | \omega)$$

Статистически-стационарное решение имеет вид

$$n(\theta | \omega) = C_1 \exp\left(\frac{\omega}{D}\theta + \frac{Kr}{D} \cos \theta\right) + C_2 \exp\left(\frac{\omega}{D}\theta + \frac{Kr}{D} \cos \theta\right) \int_{-\pi}^{\theta} d\varphi \exp\left(-\frac{\omega}{D}\varphi + \frac{Kr}{D} \cos \varphi\right)$$

где коэффициенты C_1 и C_2 определяются условием нормировки $\int_0^{2\pi} n(\theta | \omega) d\theta = 1$ и условием периодичности $n(-\pi | \omega) = n(\pi | \omega)$. Для наших целей достаточно рассмотреть предел малых r . При $Kr/D \ll 1$ получаем

$$n(\theta | \omega) = \frac{1}{2\pi} + \frac{DKr}{2\pi(D^2 + \omega^2)} \left(\cos \theta + \frac{\omega}{D} \sin \theta \right) + O(r^2)$$

(?????? и откуда оно выводится?????)

У

равнение самосогласования и фазовый переход Неизвестная амплитуда параметра порядка определяется уравнением самосогласования

$$\begin{aligned} r = \langle e^{i\theta} \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \int_{-\pi}^{+\pi} d\theta \rho(\theta, \omega) e^{i\theta} = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega g(\Omega_0 + \omega) \int_{-\pi}^{+\pi} d\theta n(\theta | \omega) e^{i\theta} = \\ &= \frac{1}{2} DKr \int_{-\infty}^{+\infty} g(\omega + \Omega_0) \frac{d\omega}{D^2 + \omega^2} + O(r^2), \end{aligned}$$

где мнимая часть комплексной экспоненты дает нулевой вклад при интегрировании в силу неизменности функции распределения $\rho(\theta, \omega)$ при одновременной смене знаков ее аргументов и предполагаемой симметричности функции $g(\Omega)$ относительно точки $\Omega = \Omega_0$. Более детальный анализ показывает, что коэффициент при r^2 в правой части уравнения самосогласования положителен. Сокращая на r , получаем тогда следующее выражение для критической константы взаимодействия

$$K_c(D) = \frac{2}{D} \left[\int_{-\infty}^{+\infty} g(\omega + \Omega_0) \frac{d\omega}{D^2 + \omega^2} \right]^{-1},$$

выше которого происходит частичная синхронизация ансамбля осцилляторов, проявляющаяся в ненулевом значении r .

Фазовая синхронизация по (????) Колоколову

(удалю скорее всего, тут нет чего-то такого важного.)

К примерам из области физики относятся синхронизацию фаз взаимодействующих джозефсоновских переходов и лазеров.

Переход ансамбля осцилляторов от несогласованного состояния, когда каждый осциллятор колеблется с собственной частотой, к синхронизованному представляет собой аналог фазового перехода.

Контролируется этот переход силой взаимодействия между осцилляторами, которая после превышения некоторого порогового значения способна привести к коллективному поведению системы, несмотря на разброс собственных частот составляющих ее элементов и наличие шума.

Каждый осциллятор описывается фазой $\theta_i(t)$, которая может принимать значения от 0 до 2π .

Осцилляторы обладают собственными частотами Ω_i , определяющими скорости перемещения их фаз по фазовой окружности в отсутствие взаимодействия.

Эти частоты в общем случае могут быть функциями времени и фазы.

Вид взаимодействия между осцилляторами определяется свойствами конкретной физической или биологической системы, которая является предметом исследования.

Так, например, в моделях нейронных пулов наибольший интерес представляет импульсное взаимодействие.

В этом случае каждый осциллятор в момент достижения его фазой значения $2\pi (= 0)$ генерирует импульс, передающийся всем соседним элементам пула.

Данный импульс ведет к изменению фаз соседних осцилляторов на определенные величины, определяемые силами попарных взаимодействий.

В зависимости от знака приращения фазы взаимодействие может быть как возбуждающим, так и тормозящим.

Однако системы с импульсным взаимодействием весьма сложны с точки зрения аналитического описания и чаще всего исследуются численными методами.

Здесь мы рассмотрим более простую модель, в которой взаимодействие носит непрерывный и глобальный характер: в любой момент времени каждый осциллятор взаимодействует со всеми остальными.

Пусть динамика фазы описывается уравнением

$$\dot{\theta}_i = \Omega_i + \frac{K}{N} \sum_{j=1}^N \sin(\theta_j - \theta_i) + \xi_i$$

где $K \geq 0$ это константа взаимодействия, $N \gg 1$ - количество осцилляторов.

Множитель $1/N$ введен, чтобы обеспечить конечность силы взаимодействия в пределе $N \rightarrow \infty$.

Случайные процессы $\xi_i(t)$ представляет собой белый шум

$$\langle \xi_i(t) \rangle = 0, \quad \langle \xi_i(t_1) \xi_j(t_2) \rangle = 2D\delta_{ij}\delta(t_1 - t_2)$$

Модель, описываемая уравнением (5.41) называется моделью Курамото.

Теперь необходимо обсудить, что же является количественной мерой коллективной синхронизации.

Понятно, что если $K = 0$, то фазы осцилляторов независимы друг от друга и в любой момент времени распределены равномерно на фазовой окружности (в силу разброса собственных частот и наличия шума).

Если же константа взаимодействия достаточно велика, то ожидается коллективное поведение, выражающееся в неоднородности распределения на фазовой окружности.

В качестве меры синхронизации удобно выбрать комплексное число

$$re^{i\psi} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N e^{i\theta_j}$$

которое мы будем называть параметром порядка.

Этот параметр можно себе представить как вектор с началом в центре фазовой окружности.

Угол поворота этого вектора, ψ , есть средняя фаза осцилляторов ансамбля.

Длина вектора, r , является мерой эффективности фазировки осцилляторов вблизи средней фазы.

Если синхронизация в системе отсутствует, то осцилляторы равномерно распределены по фазовой окружности и $r = 0$.

Если ансамбль полностью синхронизован, то есть все осцилляторы движутся как одна точка на фазовой окружности, то $r = 1$.

Таким образом параметр (5.43) описывает коллективное поведение ансамбля осцилляторов как целого.

Равенство

$$re^{i(\psi-\theta_i)} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N e^{i(\theta_j-\theta_i)}$$

позволяет переписать уравнение динамики отдельного осциллятора как

$$\dot{\theta}_i = \Omega_i + Kr \sin(\psi - \theta_i) + \xi_i$$

Таким образом, мы видим перед собой пример теории среднего поля, встречающейся в задачах с многочастичным взаимодействием: взаимодействие элемента системы с окружением представляется как действие некоторого эффективного поля.

Теперь взаимодействие каждого осциллятора со всеми остальными выражено через среднеполевые характеристики r и ψ .

Фаза осциллятора "притягивается" к средней фазе ψ , а сила притяжения пропорциональна степени когерентности ансамбля r .

Предположим, что функция распределения осцилляторов по собственным частотам $g(\Omega)$ имеет вид симметричного пика около средней частоты Ω_0 : $g(\Omega_0 + \omega) = g(\Omega_0 - \omega)$.

Разумно предположить, что в установившемся режиме коллективная фаза ψ вращается с частотой Ω_0 , а амплитуда r не изменяется.

Выполним замену переменных $\theta_i \rightarrow \theta_i + \Omega_0 t$, что соответствует переходу в систему отсчета, вращающуюся с частотой Ω_0 .

В ней средняя фаза неподвижна и можно положить $\psi = 0$, выбрав соответствующим образом начало отсчета на фазовой окружности.

Тогда уравнение (5.45) приобретает вид

$$\dot{\theta}_i = \omega_i - Kr \sin \theta_i + \xi_i$$

где $\omega_i = \Omega_i - \Omega_0$. Введем функцию распределения осцилляторов по фазе и расстройке частоты

$$\rho(\theta, \omega, t) = \langle \delta(\theta - \theta_\omega(t)) \rangle_\xi$$

где $\theta_\omega(t)$ - решение уравнения (5.46) для осциллятора с собственной частотой ω при конкретной реализации случайного процесса ξ .

Эволюция данной функции описывается уравнением Фоккера-Планка

$$\partial_t \rho = -\partial_\theta [(\omega - Kr \sin \theta) \rho] + D \partial_\theta^2 \rho$$

Стационарное решение этого уравнения, удовлетворяющее периодическому граничному условию $\rho(\theta, \omega) = \rho(\theta + 2\pi, \omega)$, имеет вид

$$\rho(\theta, \omega) = \rho(0, \omega) \exp\left(\frac{-Kr + \omega\theta + Kr \cos \theta}{D}\right) \left(1 + \frac{(\exp(-\frac{2\pi\omega}{D}) - 1) \int_0^\theta \exp\left(\frac{-\omega\varphi - Kr \cos \varphi}{D}\right) d\varphi}{\int_0^{2\pi} \exp\left(\frac{-\omega\varphi - Kr \cos \varphi}{D}\right) d\varphi}\right)$$

где $\rho(0, \omega)$ определяется условием нормировки

$$\int_0^{2\pi} \rho(\theta, \omega) d\theta = 1$$

Функция распределения осцилляторов по фазе получается, если проинтегрировать (5.49) по частоте с весом $g(\Omega_0 + \omega)$

$$n(\theta) = \int_{-\infty}^{+\infty} g(\Omega_0 + \omega) \rho(\theta, \omega) d\omega$$

Вспоминая определение (5.43), мы можем выразить параметр порядка через функцию распределения

$$r = \int_0^{2\pi} n(\theta) e^{i\theta} d\theta = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega g(\Omega_0 + \omega) \int_0^{2\pi} d\theta \rho(\theta, \omega) e^{i\theta}$$

Последнее уравнение представляет собой условие самосогласования на лей среднеполевой теории и определяет величину параметра порядка.

Легко видеть, что при любом K уравнение самосогласования всегда имеет тривиальное нулевое решение $r = 0$, соответствующее полностью несинхронизованному режиму (когда $\rho(\theta, \omega) = 1/2\pi$).

Имеется однако еще одна ветвь решения, на которой параметр порядка становится отличным от нуля, начиная с некоторого критического значения константы взаимодействия K_c .

Чтобы определить точку перехода к синхронизованному состоянию, необходимо разложить правую часть уравнения (5.52) при $r \rightarrow 0$.

(?)

Функция распределения в пределе малого параметра порядка

$$\rho(\theta, \omega) = \frac{1}{2\pi} + \frac{DKr}{2\pi(D^2 + \omega^2)} \left(\cos \theta + \frac{\omega}{D} \sin \theta\right) + O(r^2)$$

Тогда уравнение (5.52(?)) приобретает вид

$$r = \frac{1}{2} DKr \int_{-\infty}^{+\infty} g(\omega + \Omega_0) \frac{d\omega}{D^2 + \omega^2} + O(r^2)$$

(мнимая часть занулилась в силу неизменности функции распределения $\rho(\theta, \omega)$ при одновременной смене знаков ее аргументов и предполагаемой симметричности функции $g(\Omega)$).

Сокращая на r , получаем следующее выражение для критической константы взаимодействия

$$K_c(D) = \frac{2}{D} \left[\int_{-\infty}^{+\infty} g(\omega + \Omega_0) \frac{d\omega}{D^2 + \omega^2} \right]^{-1}$$

Если константа взаимодействия K превышает это пороговое значение, то происходит частичная синхронизация ансамбля, проявляющаяся в ненулевом значении параметра порядка r .

критическая константа взаимодействия

(?77)

15.3.2 Другое о синхронизации (??)**О применениях фазовой синхронизации**

(уменьшил раздел, потому что не актуально мне каждое применение прорабатывать, их слишком много, они слишком разные. Может, потом добавлю сюда формулы на разные случаи, посмотрим.)

О явлении синхронизации говорят, когда в системе взаимодействующих осцилляторов возникают согласованные колебания, хотя каждый в отдельности взятый осциллятор обладает уникальной собственной частотой и подвержен случайному шуму.

Такой эффект представляет собой коллективное поведение и обусловлен наличием взаимодействия между осцилляторами.

Коллективную синхронизацию можно наблюдать на большом числе примеров биологических систем: клетки типа *pacemaker* в сердечной ткани; синхронизованная активность нейронов, ответственная за формирование ритмов головного мозга; синхронизация метаболизма дрожжевых клеток; синхронизация вспышек больших скоплений светлячков; согласованное стрекотание сверчков.

обзор применений коллективной синхронизации в биологии Коллективную синхронизацию можно наблюдать на большом числе примеров биологических систем:

клетки типа *pacemaker* в сердечной ткани;

синхронизованная активность нейронов, ответственная за формирование ритмов головного мозга;

синхронизация метаболизма дрожжевых клеток;

синхронизация вспышек больших скоплений светлячков;

согласованное стрекотание сверчков.

обзор применений коллективной синхронизации в физике К примерам из области физики относятся

синхронизация фаз взаимодействующих джозефсоновских переходов и лазеров.

Переход ансамбля осцилляторов от несогласованного состояния, когда каждый осциллятор колеблется с собственной частотой, к синхронизованному представляет собой аналог фазового перехода.

Контролируется этот переход силой взаимодействия между осцилляторами, которая после превышения некоторого порогового значения способна привести к коллективному поведению системы, несмотря на разброс собственных частот составляющих ее элементов и наличие шума.

клетки типа *pacemaker* в сердечной ткани

синхронизованная активность нейронов, ответственная за формирование ритмов головного мозга

синхронизация метаболизма дрожжевых клеток

синхронизация вспышек больших скоплений светлячков

согласованное стрекотание сверчков

15.4 Теория перколяций (!?!?)

(мб когда-то займусь этим)

15.5 О кинетике и флуктуационных эффектах в макрофизике

(укажу эту связь, скорее всего она тоже есть, просто не актуально это, про это в отдельной записи только есть смысл писать, ну или в твердом теле. Окажусь не прав - увеличу этот раздел.)

(пока не знаю, что писать, все это выглядит как то, где кинетику знать не особо нужно, но пройду - пойму лучше.)

Теория Ландау

Теория среднего поля Низкотемпературная фаза Зала чи

Флуктуации, Теория Возмущений

Скейлинг Зала чи

Паркетные Диаграммы

Трикритическая точка

15.6 О кинетике полимеров (??)

(немного скажу про это, да и хватит.)

15.6.1 Основы описания полимеров

(пока только по Белану)

15.6.2 Модель свободно-сочлененной цепи

(пока очень малая теория этого. чуть что потом выгружу что-то еще, пока мало что выгружено, не актуально это.)

Характерное расстояние между концами цепи

Каков характерный размер клубка, образованного полимерной цепью с известными длиной сегмента Куна l_{eff} и полной контурной длиной L ? Ответ на этот вопрос легко найти, воспользовавшись свободно-сочлененной моделью. Будем характеризовать размер клубка как квадратный корень из среднего квадрата расстояния между концами цепи. Вектор, соединяющий начало и конец свободно-сочлененной цепи можно представить как сумму

$$\vec{R} = \sum_{i=1}^N \vec{l}_i$$

где $N = L/l_{\text{eff}}$ - число сегментов Куна, \vec{l}_i - вектор длины l_{eff} , направленный вдоль i -го сегмента. Тогда среднее расстояние между концами цепи

$$\sqrt{\langle \vec{R}^2 \rangle} = \sqrt{\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \langle \vec{l}_i \vec{l}_j \rangle} = \sqrt{\sum_i \langle \vec{l}_i^2 \rangle + \sum_{i \neq j} \langle \vec{l}_i \rangle \langle \vec{l}_j \rangle} = \sqrt{\sum_i \langle \vec{l}_i^2 \rangle} = \sqrt{N l_{\text{eff}}^2} = \sqrt{l_{\text{eff}}} L,$$

где мы использовали предположение о статистической независимости ориентаций различных в полностью растянутом состоянии, то есть $\sqrt{\langle \vec{R}^2 \rangle} \ll L$. К примеру, если принять $l_{\text{eff}} = 100$ нм, то согласно этим вычислениям размер глубка, образованного молекулой ДНК контурной длины 1 м составляет приблизительно 0.03 см. (Это много меньше метра, но гораздо больше размера клеточного ядра, имеющего диаметр порядка десяти микрометров, в которое реальные молекулы ДНК каким-то образом упакованы.)

15.6.3 Модель Рауза

Модель Рауза

Рассмотрим цепочку из $N \gg 1$ бусинок с гармоническим взаимодействием между соседями. Движение каждой из промежуточных бусинок цепи описывается уравнением

$$\frac{d\vec{r}_n}{dt} = \gamma (\vec{r}_{n+1} + \vec{r}_{n-1} - 2\vec{r}_n) + \frac{1}{\zeta} \vec{\xi}_n(t)$$

где $2 \leq n \leq N-1$, в то время как динамика крайних бусинок подчиняется уравнениям

$$\begin{aligned} \frac{d\vec{r}_1}{dt} &= \gamma (\vec{r}_2 - \vec{r}_1) + \frac{1}{\zeta} \vec{\xi}_1(t), \\ \frac{d\vec{r}_N}{dt} &= \gamma (\vec{r}_{N-1} - \vec{r}_N) + \frac{1}{\zeta} \vec{\xi}_N(t), \end{aligned}$$

Здесь \vec{r}_n - координата n -ой бусинки, $\gamma = k/\zeta$ - кинетический коэффициент, выражаемый как отношение коэффициента упругости k соединяющих соседние бусинки пружинок и коэффициента вязкого трения ζ бусинки, $\vec{\xi}_n(t)$ - ланжевеновская сила (гауссов белый шум), действующая на n -ую бусинку. Для случайных сил предполагается выполнение следующих соотношений

$$\langle \xi_{n\alpha}(t) \rangle = 0, \quad \langle \xi_{n\alpha}(t_1) \xi_{m\beta}(t_2) \rangle = 2k_B T \zeta \delta_{\alpha\beta} \delta_{nm} \delta(t_1 - t_2),$$

где k_B - постоянная Больцмана, T - температура среды, δ_{nm} и $\delta_{\alpha\beta}$ - символы Кронекера. Индексы n и m обозначают номера бусинок, а индексы α и β нумеруют декартовы компоненты вектора.

Использование модели Рауза для описания динамики полимера основано на следующей идее: мысленно разделим полимерную цепь на большое число подцепей, контурная длина λ каждой из которых удовлетворяет условию $l_{\text{eff}} \ll \lambda \ll L$, и будем рассматривать только движение концов этих подцепей, не интересуясь динамикой промежуточных сегментов. Концы полученных подцепей и соответствуют бусинкам, а влияние связывающих их промежуточных участков, динамика которых нам не интересна, учитывается посредством введения гармонического взаимодействия между соседними бусинками.

Каким образом можно обосновать присутствие гармонической силы в уравнениях (17-19)? Этот вопрос неизбежно должен возникнуть, так как обсуждая микроскопическую структуру макромолекул мы не упоминали наличие какой бы то ни

было упругой силы, которая бы препятствовала разведению в пространстве концов запутанного клубка. И если исходить, скажем, из простейшей модели свободно-сочлененной цепи, то свободное вращение сегментов друг относительно друга казалось бы означает отсутствие сопротивления цепи на внешнее растяжение, то есть отсутствие упругости. Так откуда же тогда может взяться упругое взаимодействие?

Макромолекула как термодинамическая система

Для прояснения этого вопроса, представим себе, что мы взяли полимерную цепь контурной длины λ за ее концы и медленно раздвинули их, так что расстояние R между концами увеличилось на относительно небольшую величину $\Delta R \ll R$. Если полимер действительно сопротивляется внешнему растяжению, то в этом процессе мы совершим некоторую ненулевую работу ΔA . Вычислим эту работу, заодно выяснив, на что она пошла. находящуюся в контакте с термостатом (роль которого играет окружающий раствор) при постоянной температуре. Согласно первому началу термодинамики

$$\Delta A = \Delta U - \Delta Q$$

где ΔU - это изменение внутренней энергии цепи, а ΔQ - количество теплоты, переданное полимеру раствором. Прежде всего, заметим что потенциальная энергия свободно-сочлененной цепи не зависит от ее конформации. Не изменилась в ходе процесса растяжения и кинетическая энергия, так как она определяется температурой, а последняя поддерживается постоянной. Отсюда можно заключить, что фигурирующее в р. (21) изменение внутренней энергии макромолекулы равно нулю

$$\Delta U = 0$$

Что касается количества теплоты, сообщенного полимерной цепи из раствора, то оно связано с изменением энтропии макромолекулы ΔS как

$$\Delta Q = T \Delta S.$$

Энтропия клубка

(!?!?!?! в термаче укажу на это, пока плохо указано это.)

Согласно статистическому определению энтропии

$$S = k_B \ln W(R)$$

где $W(R)$ это число возможных микросостояний полимерной цепи, реализующих данное макросостояние. Последнее задано "макроскопической" переменной R , то есть длиной вектора, соединяющего концы макромолекулы. Иными словами, $W(R)$ - это количество конфигураций цепи при фиксированном взаимном расположении ее концов. В силу равновероятности всех конформаций свободно-сочлененной цепи, следующей из независимости потенциальной энергии такого полимера от его формы, имеем $P(\vec{R}) = \frac{W(R)}{W_0}$, где $P(\vec{R})$ - заданная формулой (3) равновесная функция распределения вектора \vec{R} для предоставленного самому себе полимера, а W_0 - это полное число всех возможных конформаций свободного полимера. Значит

$$W(R) = W_0 P(\vec{R})$$

Из уравнений (24), (25) и (3), таким образом, находим

$$S = k \ln P(\vec{R}) + k \ln W_0 = \frac{3}{2} k \ln \frac{3}{2\pi \lambda l_{\text{eff}}} - \frac{3kR^2}{2\lambda l_{\text{eff}}} + k \ln W_0.$$

Мы видим, что энтропия уменьшается с увеличением расстояния между концами полимерной цепи. Это легко объяснить, если вспомнить, что вытянутая конформация всего одна, а запутанных много.

Энтропийная упругость полимерной цепи

Подстановка формул (22), (23) и (26) в уравнение (21) дает $\Delta A = \frac{3k_B T}{\lambda_{\text{eff}}} R \Delta R$. Знание работы ΔA , затраченной внешней силой на увеличение R на относительно малую величину ΔR позволяет найти силу натяжения между концами полимерной цепи

$$f(R) = \frac{\Delta A}{\Delta R} = \frac{3k_B T}{\lambda_{\text{eff}}} R$$

которая, таким образом, пропорциональна R , причем величина $k = \frac{3k_B T}{\lambda l}$ играет роль коэффициента жесткости. Отметим, что эта формула оправдана только в гауссовой области растяжений, когда расстояние между концами цепи далеко от своего максимально возможного растяжения, $R \ll \lambda$. Итак, мы выяснили, что упругость свободно-сочлененной цепи имеет энтропийное происхождение: при растяжении полимер распрямляется, т. е. переходит из беспорядочно запутанной конформации в более вытянутую; энтропия при этом уменьшается, и поскольку полимер находится в контакте с термостатом, процесс растяжения требует совершения работы. Эффективный коэффициент жесткости оказывается пропорционален температуре, что объясняется как раз энтропийной природой упругости полимерной цепи, и обратно пропорционален контурной длине λ , то есть мал для очень длинных цепей.

Континуальный предел модели Рауза

Вернемся к уравнению (17). Если число бусинок очень велико, $N \gg 1$, то оправдан переход к континуальному пределу

$$\vec{r}_{n+1}(t) + \vec{r}_{n-1}(t) - 2\vec{r}_n(t) \rightarrow \frac{\partial^2 \vec{r}(n, t)}{\partial n^2}$$

где n теперь рассматривается как континуальная переменная. Тогда из Ур. (17) получаем

$$\frac{\partial \vec{r}(n, t)}{\partial t} = \gamma \frac{\partial^2 \vec{r}(n, t)}{\partial n^2} + \frac{1}{\zeta} \vec{\xi}(n, t)$$

где для стохастического поля $\vec{\xi}(n, t)$ справедливо

$$\langle \xi_\alpha(n, t) \rangle = 0, \quad \langle \xi_\alpha(n, t_1) \xi_\beta(m, t_2) \rangle = 2\zeta k_B T \delta_{\alpha\beta} \delta(n - m) \delta(t_2 - t_1)$$

Таким образом, в континуальном пределе компоненты векторного поля $\vec{r}(n, t)$, которое описывает координаты участков полимерной цепи, пронумерованных индексом n , эволюционируют согласно неоднородному уравнению диффузии со стохастической "накачкой" $\vec{\xi}(n, t)$.

Граничные условия

Уравнение (29) должно решаться на отрезке $n \in [0, N]$ с граничными условиями

$$\partial_n \vec{r}(0, t) = \partial_n \vec{r}(N, t) = 0$$

Последнее связано с тем, что для концевых бусинок исходные дискретные уравнения имеют вид

$$\begin{aligned}\frac{d\vec{r}_0}{dt} &= \gamma (\vec{r}_1 - \vec{r}_0) + \frac{1}{\zeta} \vec{\xi}_0(t), \\ \frac{d\vec{r}_N}{dt} &= \gamma (\vec{r}_{N-1} - \vec{r}_N) + \frac{1}{\zeta} \vec{\xi}_N(t).\end{aligned}$$

Чтобы уравнения (32) и (33) по форме совпали с уравнением (17) справедливым для каждой из промежуточных бусинок, введем фиктивные бусинки с номерами -1 и N , положив при этом $\vec{r}_{-1}(t) = \vec{r}_0(t)$ и $\vec{r}_{N+1}(t) = \vec{r}_N(t)$. Тогда для бусинок 0 и N уравнения динамики примут вид

$$\begin{aligned}\frac{d\vec{r}_0}{dt} &= \gamma (\vec{r}_1 + \vec{r}_{-1} - 2\vec{r}_0) + \frac{1}{\zeta} \xi_0(t) \\ \frac{d\vec{r}_N}{dt} &= \gamma (\vec{r}_{N+1} + \vec{r}_{N-1} - 2\vec{r}_N) + \frac{1}{\zeta} \xi_N(t),\end{aligned}$$

то есть в континуальном пределе они будут переходить в Ур. (29). А условия $\vec{r}_{-1}(t) = \vec{r}_0(t)$ и $\vec{r}_{N+1}(t) = \vec{r}_N(t)$ в этом же пределе эквивалентны Ур. (31), которые, таким образом, должны сопровождать Ур. (29). Отметим, что сказанное выше по поводу граничных условий относится к случаю полимера со свободными концами. Если же мы будем рассматривать динамику кольцевого полимера, то Ур. (31), очевидно, следует заменить условием периодичности $\vec{r}(0, t) = \vec{r}(N, t)$.

Решение уравнений Рауза

С континуальной версией модели Рауза несколько проще работать с точки зрения аналитических вычислений чем с дискретной. Покажем, как, решая уравнение (29), можно найти такую величину как время корреляции стохастической динамики полимера, то есть время, в течение которого цепь "помнит" свою текущую конформацию. Для этой цели вычислим для полимерной цепи в статистически-стационарном состоянии корреляционную функцию $\langle \vec{R}(0) \cdot \vec{R}(t) \rangle$, где $\vec{R} \equiv \vec{r}(N, t) - \vec{r}(0, t)$ — вектор, соединяющий свободные концы полимера, а угловые скобки $\langle \dots \rangle$ обозначают процедуру усреднения по тепловому шуму. Мы должны прежде всего решить уравнение (29) с граничными условиями (31) для заданной реализации ланжевеновского случайного поля $\vec{\xi}(n, t)$. Искомое решение может быть записано в виде

$$\vec{r}(n, t) = \frac{1}{\zeta} \int_{-\infty}^t dt_0 \int_0^N dn_0 G(n, t; n_0, t_0) \vec{\xi}(n_0, t_0)$$

где $G(n, t | n_0, t_0)$ — это функция Грина одномерного уравнения диффузии $\frac{\partial G}{\partial t} = \gamma \frac{\partial^2 G}{\partial n^2}$ на отрезке $n \in [0, N]$ с начальным условием $G(n, t_0 | n_0, t_0) = \delta(n - n_0)$ и граничными условиями $\partial_n G(0, t | n_0, t_0) = \partial_n G(N, t | n_0, t_0) = 0$, где $0 \leq n_0 \leq N, 0 \leq n \leq N$ и $t \geq t_0$. Используя метод преобразования Фурье, получаем

$$G(n, t | n_0, t_0) = \frac{2}{N} \sum_{m=0}^{+\infty} e^{-\gamma q_m^2 (t-t_0)} \cos[q_m n_0] \cos[q_m n]$$

Тогда

$$\vec{R}(t) = \frac{2}{N\zeta} \sum_{m=0}^{+\infty} \int_{-\infty}^t dt_0 e^{-\gamma q_m^2 (t-t_0)} \int_0^N dn_0 \cos[q_m n_0] (\cos[q_m N] - 1) \vec{\xi}(n_0, t_0).$$

Для парного коррелятора находим

$$\begin{aligned}
 \langle \vec{R}(0) \cdot \vec{R}(t) \rangle &= \frac{4}{N^2 \zeta^2} \sum_{m=0}^{+\infty} \sum_{l=0}^{+\infty} (\cos [q_m N] - 1) (\cos [q_l N] - 1) \int_{-\infty}^0 dt_0 \int_{-\infty}^t dt'_0 e^{\gamma q_m^2 t_0 - \gamma q_l^2 (t-t'_0)} \\
 &\cdot \int_0^N dn_0 \int_0^N dn'_0 \cos [q_m n_0] \cos [q_l n'_0] \langle \vec{\xi}(n_0, t_0) \cdot \vec{\xi}(n'_0, t'_0) \rangle = \\
 &= \frac{4}{N^2 \zeta^2} \sum_{m=0}^{+\infty} \sum_{l=0}^{+\infty} (\cos [q_m N] - 1) (\cos [q_l N] - 1) \int_{-\infty}^0 dt_0 \int_{-\infty}^t dt'_0 e^{\gamma q_m^2 t_0 - \gamma q_l^2 (t-t'_0)} \cdot \\
 &\cdot \int_0^N dn_0 \int_0^N dn'_0 \cos [q_m n_0] \cos [q_l n'_0] 2\zeta k_B T \cdot 3\delta(n_0 - n'_0) \delta(t_0 - t'_0) = \\
 &= \frac{24k_B T}{N^2 \zeta} \sum_{m=0}^{+\infty} \sum_{l=0}^{+\infty} (\cos [q_m N] - 1) (\cos [q_l N] - 1) e^{-\gamma q_l^2 t} \int_{-\infty}^0 dt_0 e^{\gamma(q_m^2 + q_l^2)t_0} \cdot \\
 &\int_0^N dn_0 \cos [q_m n_0] \cos [q_l n_0] = \\
 &= \frac{24k_B T}{N^2 \zeta} \sum_{m=0}^{+\infty} \sum_{l=0}^{+\infty} (\cos [q_m N] - 1) (\cos [q_l N] - 1) \frac{e^{-\gamma q_l^2 t}}{\gamma (q_m^2 + q_l^2)} \cdot \frac{N}{2} \delta_{ml} = \\
 &= \frac{6k_B T}{N \gamma \zeta} \sum_{m=0}^{+\infty} (\cos [q_m N] - 1)^2 \frac{e^{-\gamma q_m^2 t}}{q_m^2} = \frac{24Nk_B T}{\pi^2 \gamma \zeta} \sum_{k=0}^{+\infty} \frac{\exp\left(-\frac{\pi^2(2k+1)^2 \gamma t}{N^2}\right)}{(2k+1)^2}.
 \end{aligned}$$

Таким образом, время, за которое парная корреляционная функция $\langle \vec{R}(0) \cdot \vec{R}(t) \rangle$ затухает в e раз, оценивается как

$$\tau_{\text{cor}} \approx \frac{N^2}{\pi^2 \gamma}$$

Problem

Из формулы $\frac{24Nk_B T}{\pi^2 \gamma \zeta} \sum_{k=0}^{+\infty} \frac{\exp\left(-\frac{\pi^2(2k+1)^2 \gamma t}{N^2}\right)}{(2k+1)^2}$ получите выражение для равновесного расстояния между концами цепи в модели Рауза.

$$\langle \vec{R}^2 \rangle_{eq} = \langle \vec{R}(0) \cdot \vec{R}(0) \rangle = \frac{24Nk_B T}{\pi^2 \gamma \zeta} \sum_{k=0}^{+\infty} \frac{1}{(2k+1)^2}$$

Чтобы вычислить сумму $\sum_{k=0}^{+\infty} \frac{1}{(2k+1)^2}$ рассмотрим контурный интеграл в комплексной плоскости $\oint_{\Gamma_N} dz f(z)$, где $f(z) = \frac{1}{z^2} \tan \frac{\pi z}{2}$ и $\Gamma_N = [-2N-2; 2N+2]^2$. Так как функция $\tan \frac{\pi z}{2}$ имеет полюса первого порядка в точках $z_k = 2k+1$, а функция $1/z^2$ - полюс второго порядка в нуле, то в силу теоремы о вычетах можем записать

$$\oint_{\Gamma_N} dz f(z) = 2\pi i \left(\text{res}_{z=0} f(z) + \sum_{k=-N-1}^N \text{res}_{z=z_k} f(z) \right)$$

где

$$\begin{aligned}
 \text{res}_{z=0} f(z) &= \lim_{z \rightarrow 0} \frac{d}{dz} [z^2 f(z)] \Big|_{z=0} = \frac{\pi}{2} \\
 \text{res}_{z=z_k} f(z) &= \lim_{z \rightarrow z_k} [(z - z_k) f(z)] = -\frac{2}{\pi(2k+1)^2}
 \end{aligned}$$

Очевидно, что при $N \rightarrow +\infty$ рассматриваемый контурный интеграл стремится к нулю. Значит

$$\operatorname{res}_{z=f(z)} + \sum_{k=-\infty}^{+\infty} \operatorname{res}_z = z_k f(z) = 0$$

$$\frac{\pi}{2} - \frac{4}{\pi} \sum_{k=0}^{+\infty} \frac{1}{(2k+1)^2} = 0$$

Таким образом, $\sum_{k=0}^{+\infty} \frac{1}{(2k+1)^2} = \pi^2/8$ и, следовательно, $\langle \vec{R}^2 \rangle_{eq} = \frac{3Nk_B T}{\gamma \zeta}$.

15.6.4 On Polymers and Ideal Random Chains by Kleinert

(основная теория про это не в этой записи, в записи по биологии, там где-то анализ молекул должен быть. тут - чуть напишу это, если будет потребность, пока это не важная тема.)

Exact End-to-End Distribution in Three Dimensions Short-Distance Expansion for Long Polymer

Saddle Point Approximation to Three-Dimensional End-to-End Distribution

15.6 Path Integral for Continuous Gaussian Distribution

15.7 Stiff Polymers by Kleinert

15.7.1 Sliced Path Integral .

.

15.7.2 Relation to Classical Heisenberg Model

.

15.7.3 End-to-End Distribution

15.7.4 Moments of End-to-End Distribution

15.8 Continuum Formulation

15.8.1 Path Integral

15.8.2 Correlation Functions and Moments

15.9 Schrodinger Equation and Recursive Solution for Moments

15.9.1 Setting up the Schrodinger Equation

15.9.2 Recursive Solution of Schrodinger Equation

15.9.3 From Moments to End-to-End Distribution for $D = 3$

.

15.9.4 Large-Stiffness Approximation to End-to-End Distribution

15.9.5 Higher Loop Corrections

15.10 Excluded-Volume Effects

15.11 Flory's Argument

15.12 Polymer Field Theory

15.13 Fermi Fields for Self-Avoiding Lines

15.7 К аэродинамике

15.7.1 Некоторые темы

задача о вхождении ракеты в атмосферу

говорят, там как раз интеграл столкновений и рассматриваем

15.7.2 (+)y1 моделирование погоды

упражнение 1 дз

итоги модели

модель погоды - подробное описание

матрица переходов и предельное распределение

???

15.8 К ядерным процессам

говорят, что часто рассчитывают кинетикой ядерные реакторы.

15.8.1 Замедление нейтронов

задача с лекций Колоколова, просто интересно очень.

итоги модели

модель

Задача Найти стационарное пространственное распределение в зависимости от энергии для точечного источника моноэнергетических нейтронов, замедляющихся в среде в результате упругого рассеяния на ядрах массой $A \gg 1$, считая сечение рассеяния не зависящим от энергии нейтрона.

Решение Качественное рассмотрение.

При рассеянии легкой частицы массой m (нейтрона), движущейся со скоростью v , на неподвижной частице массой $M \approx At$, переданный импульс меняется от нулевого до максимального $\Delta P \approx 2mv$, так что теряемая энергия $\Delta \varepsilon \approx (\Delta P)^2 / 2M \sim (m/M)\varepsilon$.

Тогда для того, чтобы замедлиться от энергии ε_0 до ε , нейтрону потребуется испытать число соударений N , определяемое из соотношения

$$(1 - m/M)^N \sim \varepsilon/\varepsilon_0, \text{ т.е. } N \sim (M/m) \ln(\varepsilon_0/\varepsilon)$$

Если длина свободного пробега равна λ , то вероятность $P(r)$ оказаться на расстоянии r за N шагов длиной λ в результате случайного блуждания пропорциональна

$$P(r) \sim \exp\left(-\frac{3r^2}{2N\lambda^2}\right) = \exp\left(-\frac{3r^2}{2\lambda^2(M/m)\ln(\varepsilon_0/\varepsilon)}\right)$$

Эта же величина определяет и распределение числа нейтронов по энергии с точностью до предэкспоненциального множителя.

Описание замедления нейтронов с помощью уравнения Фоккера - Планка.

Для количественного описания процесса замедления нейтронов рассмотрим кинетическое уравнение для функции распределения нейтронов $f(\vec{r}, \vec{p})$ по импульсам \vec{p} и координатам \vec{r} в стационарном случае при отсутствии внешних полей:

(потом запишу, если дойду)

15.9 Кинетика в космологии (!?!?)

15.9.1 Основные уравнения

(пока пишу в космологии, потом здесь укажу их.)

15.10 К математике (??)

15.10.1 связь со случайными процессами

???

15.11 финансы

которые хз, куда вписать

15.11.1 применение кинетики в игре на бирже

????

Part IX

Appendix

A Preface and main motivation

(потом напишу)

A.1 Ещё мотивация

Обсудим, зачем изучать кинетику.

(в настоящий момент этот раздел не сделан, так что рекомендуется найти с помощью оглавления нужную тему и смотреть только нее)

кинетика - неравновсная статистическая механика - в теоретическом минимуме физика

с ней можно моделировать классные диффузионные модели

по сути в любую задачу можно добавить хаос и беспорядок, и тогда нужна именно кинетика

вроде бы, так и происходит, что каждая тема просто усложняется кинетикой и всё.
потом пропишу подробнее.

A.1.1 Мотивация к разделам кинетики

(там, кстати, много разделов, потом укажу их, пока даже не особо знаю это.)

A.2 Мышление профессионалов в кинетике

Попробуем понять, какое мышление способствует наиболее эффективному и интересному изучению кинетики.

(пока не нужно читать)

A.2.1 Способы догадаться до всех главных идей

незаменимая часть нормального понимания кинетикаа.

способы догадаться до описания броуновского движения

(???)

A.2.2 Необходимые темы для кинетика

газовая термодинамика

потому что много очень газовых явлений.

квантовая механика: общий подход

матрица плотности, всё вообще, что происходит

квантовая механика: теория рассеяния

именно на нее опирается большая часть кинетики, которая связана с функцией Грина.
именно она нужна для Левитова Шитова.
без нее отлеты будут слишком большие.
разные отсылки к ней часто встречаются.

типичные уравнения математической физики

ибо эти идеи очень уж часто используются.

фундаментальная статистическая физика

а пока я хз, как связано это, как будто бы даже разные методы...
хз.
но пока кажется, что это нужно скорее.

физика конденсированного состояния

очень много к ней приложений.

А.2.3 Дополнительные темы для кинетика**гидродинамика**

тоже связка с ней большая очень.

теория случайных процессов

вообще там связь есть, так что вот, мб нужно, но хз.

математическая статистика

вроде нужна, вроде нет, не знаю.

А.2.4 способы изучения кинетики**важно как можно скорее прорабатывать выход на простые модели и расчет конкретных величин**

потому что теории большие, они могут навсегда и засосать.
это не нужно.
важно отслеживать этот выход и прописывать!!! ибо с этим скорее начнешь решать задачи, а это самое главное.
без этого в пустую время может быть просто потрачено.

сперва теория кинетики, потом моделирование (?)

не уверен, кстати.

имеем рабочие структуры по электродинамике сплошных сред, квантовой механике, и желательно по статфизу и гидродинамике

на другие структуры отсылок заметно больше, чем в других записях.

если есть какое-то уравнение, то просто обозначь все непонятное большим оператором, а дальше обрати его

Достаточно странно делается это, тем не менее, такое видно.

А.3 Литература по кинетике

книг и статей по кинетике целая тонна, так что соберем их тут, чтобы не потеряться в них.

А.3.1 Основная

Основная обучающая

Tong. D. Kinetics

Крутые более 100 страниц лекций, первые из тех, которые я хотел бы изучать.

[14] Лифшиц Е.М., Питаевский Физическая кинетика

Пока с нее начал, не уверен, что это на самом деле лучшая книга для этого, но думаю, сойдет, вряд ли там фигня будет.

Белан Лекции ВШЭ по кинетике

Замечательные лекции, учиться по ним одно удовольствие, пусть и не все там просто. В открытом доступе нет, если потерял их - не знаю, Белану что ли можно написать, проблема будет найти их.

Задачники

[8] С.Н. Бурмистров Задачи по физической кинетике

много ссылок есть на этот задачник, порешаю позже. Отдельная работа на пару недель скорее всего.

[11] Левитов Шитов Функция Грина. Задачи и решения.

некоторые главы чисто по кинетике, то, что нужно. только по другим структурам подготовиться как следует нужно, это важно!

А.3.2 Дополнительная

Другая обучающая литература

Румер Ю.Б., Рывкин М.Ш. Термодинамика, статистическая физика и кинетика

Там более 100 страниц про кинетику, кстати, так что тоже многому можно по ней научиться.

Я.В. Фоминов Фононы в кристаллах. Курс лекция для ПТФ, 2022

50 страниц многих известных тем, многие модели рассмотрены, крутая методичка, 1 неделя только в ней тренироваться - минимум. Качается на сайте ПТФ.

[9] Колоколов И. В. Лекции и семинары по курсу “Физическая кинетика и стохастические процессы”

небольшая и очень интересная запись, потому что там обсуждаются задачи, которые на самом деле хочется вписать и решать. Плюсы в том, что вкратце приведена теория и заданы интересные задачи. Минусы в том, что кроме этого ничего нет, так что теорию собираем сперва из других подробных книг.

Колоколов Семинары по физической кинетике

Вроде небольшой файл с сутью кинетики, когда-то посмотрю.

[5] Максимов Л. А., Полищук И. Я. Лекции по физической кинетике: Учебное пособие

Наверное, хорошие лекции с интересными моделями, пока не смотрел, скорее всего хорошая идея посмотреть их.

[10] В.Н.Глазков заметки к лекциям по общей физике

Глазков все еще очень полезен, потому что вкратце о многом записал. так что некоторые места по нему смотрю, без этого не получается. параграфы введения очень во многом именно по нему написаны.

[2] Daniel Arovas Lecture Notes on Nonequilibrium Statistical Physics

тоже на нее много ссылок, тоже важно досмотреть потом будет.

[1] D. Arovas Lecture Notes on Condensed Matter Physics (University of California, San Diego),

Очень крутая вроде книга тем, что вкратце раскрыты многие актуальные задачи твердого тела. Кинетическая теория металлов из нее в некоторых местах взята. сперва основы только собрать нужно.

[16] Э. Сон Лекции по физической механике

очень интересных много моделей описано вкратце, так что их добавлю, прямо очень хочется их вставить. ну а объем не большой, не малый, в физической механике тем все-таки достаточно, чтобы пару дней только над ней просидеть.

Максимов Полищук Введение к теории фазовых переходов первого рода

методичка от МФТИ на 30 стр про Фоккера-Планка и образование зародышей, некоторые части этой теории возьму, хорошее вроде короткое изложение, просто мне не актуально, так что так и не усвоил это.

Максимов Полищук элементы теории кинетики твердых тел

про всякие экситоны, поляроны, спиновые волны. Может, это лучшая литература для этих разделов, пока не актуально просто и нет времени проверять.

Другая профессиональная литература по теории

[3] Hansen, Jean-Pierre and McDonald, Ian R Theory of simple liquids

Крутая большая книга, когда-то открыл, подумал, что стану умным - когда-то пройду. Пока вроде не актуально.

[15] Лебедев "флуктуационные эффекты в макрофизике"

Крутая книга, но вроде это больше по твердому телу, так что если и буду заниматься, то только в записи по нему.

В.Л. Гуревич, «Кинетика фононных систем», М.: Наука, 1980.

ПТФ говорит, что про фононы хорошая книга, мб, не до нее.

Я. Пригожин НЕРАВНОВЕСНАЯ СТАТИСТИЧЕСКАЯ МЕХАНИКА Перевод с английского В. А. БЕЛОКОНЯ и В. А. УГАРОВА

Книга по кинетике с разными диаграммами, чтобы польза была, думаю, нужно КТП и обычную кинетику сперва нормально отработать. Плюс скорее всего нужны эти методы только в специфических задачах. Пока не вижу смысла открывать.

А.М. Косевич, «Основы механики кристаллической решётки», М.: Наука, 1972.

ПТФ говорит, что про фононы хорошая книга, мб, не до нее.

D. Arovas, Lecture Notes про металлы кин теория

крутая книга вроде

Bogolyubov-NN-Izbrannye-trudy-po-statisticheskoi-fizike.djvu

Hansen Theory of simple Liquids

Биккин Х. М., Ляпилин И. И. Неравновесная термодинамика и физическая кинетика

Гантмахер рассеяние электронов в металлах

Что-то про это очень подробное, пока не смотрел особо, но мб крутая книга тоже.

Сон Э. Лекции по физической механике мфти

Хз, мб что-то в них и будет, открыл, вроде неплохие.

Статьи про квантовые явления

[4] G.B. Lesovik, I.A. Sadovskyy Scattering matrix approach to the description of quantum electron transport

про квантовый транспорт, наверное, хорошая статья. Очень многогранная, так что для изучения нужно бы и квантмех, и оптику, и многое другое вывести на нормальный уровень. Может, потом займусь. Начал даже выгружать ее, но тут сперва нужно в тренировках посидеть..

Про углубленные методы кинетики

Книги с углубленными методами, которые буду читать после основной литературы.

И.А. Квасников Теория неравновесных систем

рекомендуют, мб буду смотреть разные детали. пока что как-то вообще не до нее, вряд ли скоро дойду.

[7] Боголюбов Н Н избранные труды по статистической физике

Интересная очень книга с многими дополнениями, надеюсь, выйду до нее, сперва основы квантовой механики собрать нужно, а также типичными методами овладеть.

Петручине Ф. теория открытых квантовых систем

какая-то интересная книга, в которой случайные процессы, мб там что-то интересное есть??? пока дойти до нее очень уж сложно. . вообще хз, о чем она.

По приложениям кинетики к металлами

Гантмахер Левинсон Рассеяние носителей тока в металлах и полупроводниках

Вроде много интересных формул, подробно проходится рассеяние. мб буду изучать, дополню квантмех и тут главу про металлы.

[6] Абрикосов Основы теории металлов

очень крутая большая книга, которая больше в твердом теле будет применяться, тем не менее, в кинетике наверняка многое также будет.

литература по необходимым предметам для кинетики

[13] Ландау Статистическая физика т. 5

В кинетике много используется базовых знаний статистической физики, которые раскрыты в этой книге. Например, принцип симметрии кинетических коэффициентов.

[12] Ландау Статистическая физика т. 9

литературные советы из Левитова Шитова

(потом разберу, впишу, удалю.)

Теория ферми-жидкости Ландау, включая кинетическое уравнение и коллективные возбуждения, изложена в [6], §1 – 6 и [1], §2.

Простой вывод закона дисперсии плазмонов с помощью приближения случайных фаз можно найти в [3], §9.5, 9.6.

Корреляционная и обменная энергии кулоновского взаимодействия в Электронной ферми-жидкости рассматривается в [3], §9.4, 9.8, 9.9, [6], §85 и [1], §22. Мп - кроскопическое обоснование теории ферми-жидкости, базирующееся на функциях Грина, приведено в [1], §18, 19, а также в [6], §15 – 21. Полезно также обратиться к оригинальным работам (см. сборник статей на с. 185).

А.4 Общий обзор кинетики

что вообще в нем происходит?

А.4.1 Популярное введение в кинетику

Обсудим, что из себя представляет кинетика кратко, выделяя самую суть.

А.4.2 Обзор кинетики как науки

появление кинетика в нашей картине мира

вроде бы мы хотим писать

недостатки классической кинетики

(? пока их не вижу. потом тут же и ответ про то, зачем переходим к квантовой кинетике?)

обзор различных задач, которая кинетика решает

пока хз

обзор сфер жизни, в которых применяется кинетика

???

ну твердое тело, а где еще?

А.4.3 Обзор различных кинетических явлений

(должно быть очень мотивирующе написано. также что-то будет повторяться с уже написанными темами, тут с точки зрения обзора и мотивации пишу)

Обсудим вкратце, какие есть кинетические явления вокруг нас. Выделим из них интересные и актуальные.

А.4.4 О приложениях и наиболее прикладные темы

обсудим, какие темы на самом деле самые важные тут.

разряженный газ описывается уравнением Больцмана

где тут я про него пишу кстати?

задачи о свойствах материалов с различными примесями

в твердом теле это нужно в общем.

А.4.5 Общий обзор

Основные кинетические формулы и закономерности

Обзор моделей классической кинетики

(о всем, что вообще там есть вкратце скажу)

Обзор моделей квантовой кинетики

(о всем, что вообще там есть вкратце скажу)

обзор теоретических подходов

такие-то есть, такие полезные, такие - нет.

Удивительные факты

(в настоящий момент этот раздел не сделан, так что рекомендуется найти с помощью оглавления нужную тему и смотреть только нее)

Результаты кинетика

Применения кинетика в других разделах физики

мб раздела выше и хватит, посмотрим.

Обзор дальнейших развитий кинетики

А.4.6 Связь кинетики с другими разделами физики

(потом когда-то допишу)

связь кинетики с термодинамикой

кинетика и механика

по сути с нее стартуем.

кинетика и оптика

Теоремы Винера-Хинчина, всё, что со случайными процессами связано.

какие-то минимальные связи в общем...

но есть!

пропишу позже

также есть квантовая оптика и задачи про двухуровневые системы, где методами квантовой кинетики доказывается, что в двухуровневой системе невозможна инверсия заселенности при только лишь когерентной накачке.

(см ниже где-то)

кинетика и КТП

по сути если квантовые столкновения рассматриваем - то могут какие почти угодно частицы вылазить, так что описывать нормально это нужно КТП.

потом уже интеграл столкновений и всё такое.

проработаю эту связь потом.

кинетика и статфиз

по сути этот формализм и рассматриваем, только неравновесные уже процессы.

(?)

кинетика и квантовая механика

такая же мб связь, как и с механикой?

кинетика и электродинамика

плазма.

все электрические эффекты в телах

тут тоже большая связь

А.4.7 Связь кинетики с математическими и нефизическими науками

(вот это скоро могу проработать, ибо случпроцы изучаю. пока хз, какая связь)

Связь со случайными процессами

А.4.8 Короткий исторический обзор

(пока не актуально)

Спор Ландау и Власова

А.5 Описание записи

(в настоящий момент этот раздел не сделан, так что рекомендуется найти с помощью оглавления нужную тему и смотреть только нее)

А.5.1 описание глав и разделов

описание записи в целом

первая часть - обзор кинетики

типа обо всем, что происходит.

...

вторая часть - классическая кинетика

по сути эту часть только и необходимо знать для типичных задач.

приложения

какие вообще приложения я разбирал?

А.5.2 обозначения и константы

А.6 Кинетические головоломки

(в настоящий момент этот раздел не сделан, так что рекомендуется найти с помощью оглавления нужную тему и смотреть только нее)

сбалансирую потом по интересности, пока лишь копия разных параграфов них.

позже чуть адаптировано будет под читателя.

(многое возьму из следующей главы, самое интересное)

Обсудим избранные кинетические задачи, которые интересно пообсуждать.

А.6.1 идейные вопросы кинетики

рост энтропии при микро взаимодействии

так растёт она или нет?

вроде нет.

что там квантмех про это кстати говорит?

или Н-теорема?

не знаю.

запоминание системы прошлого

помнит ли система прошлое воздействие?

там модели есть и можно потом нормально ответить про это.

А.6.2 модельные кинетические головоломки

задача о случайном блуждании (?)

пока не выбрал, какая, но позже некоторые интересные освою

распределение плотности газа, вылетающего из полупространства

А.6.3 интересные явления

(пока их поднабрать и прописать в записи нужно, потом сюда буду выделять)

закипание воды в чайнике

просто и интересно.

модель погоды

решить сперва бы ее...

В Математика для кинетики

В.1 Случайные процессы

обзор применений

основные методы описания стохастических процессов

стохастическое исчисление Ито

пока с википедии, не знаю, насколько оно нужно

обзор применений хз?

обзор Исчисление Ито - математическая теория, описывающая методы манипулирования со случайными процессами, такими как броуновское движение (или винеровский процесс).

Названа в честь создателя, японского математика Киёси Ито.

Часто применяется в финансовой математике и теории стохастических дифференциальных уравнений.

Центральным понятием этой теории является интеграл Ито

$$Y_t = \int_0^t H_s dX_s$$

записывающийся также в виде $Y = H \cdot X$, где X - броуновское движение или, в более общей формулировке, полумартингал.

Можно показать, что путь интегрирования для броуновского движения нельзя описать стандартными техниками интегрального исчисления.

В частности, броуновское движение не является интегрируемой функцией в каждой точке пути и имеет бесконечную вариацию по любому временному интервалу.

Таким образом, интеграл Ито не может быть определен в смысле интеграла Римана - Стильеса.

Однако, интеграл Ито можно определить корректно, если заметить, что подынтегральная функция H есть адаптивный процесс; это означает, что зависимость от времени t его среднего значения определяется поведением только до момента t .

Обозначения

$$\int_0^t H dX \equiv \int_0^t H_s dX_s$$

Интегрирование броуновского движения

$$\int_0^t H dB = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{t_{i-1}, t_i \in \pi_n} H_{t_{i-1}} (B_{t_i} - B_{t_{i-1}})$$

Процесс Ито

$$X_t = X_0 + \int_0^t \sigma_s dB_s + \int_0^t \mu_s ds$$

Семимартингалы, как интеграторы

$$\int_0^t H dX = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{t_{i-1}, t_i \in \pi_n} H_{t_{i-1}} (X_{t_i} - X_{t_{i-1}})$$

где $0 = t_0 < t_1 < \dots < t_{n-1} < t_n = t$, $\max(t_i - t_{i-1}) \rightarrow 0$ - последовательность разбиений интервала $[0, t]$ с длиной подынтервалов стремящейся нулю.

марковские процессы

тут теория, которая нужна будет.

флуктуационно-диссипативная теорема

используется во втором дз, так что нужно пройти, без этого никак.

формулировка

обзор применений вроде не так уж редко применяется.
пока не знаю.

В.1.1 основы математической статистики

Совместное распределение гауссовых случайных величин (колоколов добавил в место про Ф-Пл, я мб там тоже про это запишу)

Производящая функция для совместного распределения гауссовых случайных величин

Матрица корреляций

Теорема Вика

принцип формирования статистики

определение статистики в терминах оптимальных флуктуаций ,

перемежаемость статистики

величина нормировочной константы Пусть имеется K действительных переменных x_i , функция распределения которых имеет гауссов вид:

$$\rho(x_1, x_2, \dots, x_K) = \frac{1}{N} \exp(-x_i A_{ij} x_j)$$

где \hat{A} - симметричная положительно определённая матрица.

Покажите, что из условия $\int \rho d^K x = 1$ следует следующее выражение для нормировочной константы

$$N = \frac{(2\pi)^{K/2}}{\sqrt{\det A}}$$

корреляции для гауссовского распределения Вычислите парную корреляционную функцию

$$\langle x_i x_j \rangle$$

а затем корреляционные функции произвольного порядка

$$\langle x_i x_j \dots x_n x_m \rangle$$

Сумма большого количества независимых одинаково распределённых случайных величин Центральная предельная теорема.

Расширение центральной предельной теоремы: функция Крамерса. Задача 2: Рассмотрим случайную величину X , являющуюся суммой случайных переменных $x_j, j = \overline{1, N}$

$$X = x_1 + x_2 + \dots + x_N$$

имеющих одинаковую функцию распределения $p(x)$.

Для простоты положим, что $\langle x \rangle = 0$.

При $N \gg 1$ функция распределения $\mathcal{P}(X)$ для X может быть записана в универсальном виде:

$$\mathcal{P}(X) \approx \text{Const} \cdot \exp\{-NS(X/N)\}$$

Вычислить $S(X/N)$ для $p(x) = \frac{2}{\pi} \frac{1}{(1+x^2)^2}$.

При каких ограничениях на X/N работает гауссова аппроксимация:

$$S(X/N) \approx \frac{(X/N)^2}{2 \langle x^2 \rangle}?$$

В.1.2 теория меры

обзор применений

слабая сходимость

В.1.3 Марковские цепи

обзор применений хз

В.1.4 Математическая физика

Без нее судя по всему никуда, постоянно там и тут возникают эти понятия, которые правильнее всего привести для справок в одном месте.

потом четко пропишу.

В.1.5 Пропагатор

обзор применений

В.1.6 Уравнения Эйнштейна-Колмогорова

обзор применений

В.1.7 Численные методы

обзор применений

обзор методов

(+)9 алгоритм Монте-Карло

суть метода Монте-Карло Многие процессы, возникающие в статистической физике, могут быть представлены как марковские.

По существу, марковский процесс - это стохастический процесс с короткой памятью, то есть процесс, который быстро забывает свою предысторию.

Марковское условие устанавливает, что вероятность какого-то события, обусловленная m предыдущими событиями, зависит только от последнего события.

Для любого стохастического процесса важную роль играет величина $T(x, t | x', t')$, которая равна плотности вероятности того, что процесс принимает значение в момент времени t при условии, что процесс принимает значение x' в некоторое начальное время t' .

Поэтому данная вероятность называется условной вероятностью перехода, или просто пропагатором.

Как следует из определения, пропагатор удовлетворяет соотношениям: $\int T(x, t | x', t') dx = 1, \lim_{t \rightarrow t'} T(x, t | x', t') = \delta(x - x')$.

Первое уравнение выражает тот факт, что с вероятностью 1 процесс принимает некоторое значение при любом фиксированном времени, а второе уравнение утверждает, что, при стремлении к нулю приращению времени с вероятностью 1 процесс не меняется.

Плотность вероятности $p(x, t)$, которая является просто плотностью для безусловной вероятности того, что процесс принимает значение в момент времени t , связана с начальной плотностью в некоторый момент времени t_0 очевидным соотношением: $P(x, t) = \int T(x, t | x', t_0) P(x', t_0) dx'$.

Используя определение пропагатора, мы, таким образом, получаем интегральное уравнение Чепмена-Колмогорова: $T(x_3, t_3 | x_1, t_1) = \int T(x_3, t_3 | x_2, t_2) T(x_2, t_2 | x_1, t_1) dx_2$.

В итоге для определения стохастического марковского процесса нам нужно определить пропагатор $T(x, t | x', t')$, удовлетворяющий уравнению Чепмена-Колмогорова, и начальную плотность $p(x, t_0)$.

Поэтому, по существу, классификация марковских процессов сводится к классификации решений уравнения Чепмена-Колмогорова.

Из интегрального уравнения можно получить дифференциальное уравнение движения для пропагатора.

Для скачкообразных процессов оно имеет вид

$$\frac{\partial}{\partial t} T(x, t | x', t') = \int [W(x | x'', t) T(x'', t | x', t') - W(x'' | x, t) T(x, t | x', t')] dx''$$

Это дифференциальное уравнение Чепмена-Колмогорова для скачкообразного процесса.

Оно называется основным уравнением.

Такое же уравнение имеет место и для плотности $p(x, t)$:

$$\frac{\partial}{\partial t} p(x, t) = \int [W(x | x', t) p(x', t) - W(x' | x, t) p(x, t)] dx'$$

Это уравнение также называется основным уравнением.

Однако необходимо помнить, что основное уравнение в действительности есть уравнение для вероятности условного перехода процесса.

Это важное место, так как уравнение для плотности первого порядка $p(x, t)$, эволюционирующей во времени, недостаточно для полного определения стохастического марковского процесса.

Основное уравнение допускает наглядную интерпретацию в виде уравнения баланса для интенсивности изменения плотности вероятности в точке x .

Первый член с

правой стороны описывает интенсивность роста плотности вероятности в x , которая происходит благодаря скачкам из других состояний x' в состояние x .

Второй член описывает интенсивность снижения вероятности вследствие скачков из состояния x .

Пуассоновский процесс.

Однородный пуассоновский процесс описывает число $N(t)$ независимых событий во временном интервале от 0 до t , где каждое событие происходит с постоянной интенсивностью γ .

Пусть величина γ характеризует интенсивность излучения отдельного фотона в единицу времени.

Надо определить количество $N(t)$ фотонов, излучаемых за ограниченный промежуток времени от 0 до t .

Для этого мы полагаем, что для всех излучаемых фотонов интенсивность γ постоянна, а каждый излучательный процесс проходит согласно тем же самым условиям и независимо от всех предыдущих.

Величина $N(t)$ становится стохастическим марковским процессом, известным как (однородный) процесс Пуассона.

Он описывается следующим основным уравнением для пропагатора:

$$\frac{\partial}{\partial t} T(n, t | n', t') = \gamma T(n-1, t | n', t') - \gamma T(n, t | n', t')$$

Мы поставим детерминированное начальное условие $N(0) = 0$, то есть $P(n, 0) = \delta_{n,0}$.

Пуассоновский процесс представляет пример одношагового процесса, для которого, если задано, что $N(t) = n$, то возможны только переходы в соседние состояния $n \pm 1$.

Он даже еще проще, если возможны только переходы из n в $n+1$, а интенсивность перехода γ - константа, которая не зависит от n .

Основное уравнение для пуассоновского процесса может быть решено точно.

Это можно сделать посредством характеристической (производящей) функции

$$G(k, t) = \sum_{n=n'}^{\infty} e^{ik(n-n')} T(n, t | n', t')$$

с фиксированными n' и t' .

Мы производим суммирование от $n = n'$ до бесконечности, принимая во внимание, что $T(n, t | n', t') = 0$ при $n < n'$.

Это условие есть прямое следствие того факта, что скачки только увеличивают число $N(t)$.

Подставляя характеристическую функцию в основное уравнение, получаем

$$\frac{\partial}{\partial t} G(k, t) = \gamma [e^{ik} - 1] G(k, t)$$

откуда непосредственно следует решение

$$G(k, t) = \exp [\gamma (t - t') (e^{ik} - 1)]$$

где мы используем начальное условие $G(k, t = t') = 1$, которое, в свою очередь, следует из $T(n, t' | n', t') = \delta_{nn'}$.

При сравнении разложения в ряд Тейлора характеристической функции

$$G(k, t) = \sum_{n=0}^{\infty} e^{ikn} \frac{[\gamma (t - t')]^n}{n!} e^{-\gamma(t-t')} = \sum_{n=n'}^{\infty} e^{ik(n-n')} \frac{[\gamma (t - t')]^{(n-n')}}{(n - n')!} e^{-\gamma(t-t')}$$

с её определением сразу получаем пропагатора процесса Пуассона в виде

$$T(n, t | n', t') = \frac{[\gamma (t - t')]^{(n-n')}}{(n - n')!} e^{-\gamma(t-t')}, \quad n \geq n'$$

Ожидаемо, процесс однороден во времени, а также однороден и в пространстве, в том смысле, что $T(n, t | n', t')$ зависит только от разности $n - n'$.

Соответствующее распределение вероятности $P(n, t) = T(n, t | 0, 0)$ есть

$$P(n, t) = \frac{(\gamma t)^n}{n!} e^{-\gamma t}, \quad n \geq 0$$

и оно представляет собой распределение Пуассона с равными математическим ожиданием (средним значением) и дисперсией:

$$\bar{n} \equiv \langle n \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} n P(n, t) = \gamma t, \quad \overline{(n - \bar{n})^2} = \langle (n - \bar{n})^2 \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} (n - \bar{n})^2 P(n, t) = \gamma t$$

Для этого распределения $P(n, t) = \frac{\bar{n}^n}{n!} e^{-\bar{n}}$ можно легко показать прямым вычислением, что $\langle (n - \bar{n})^2 \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} n^2 \frac{\bar{n}^n}{n!} e^{-\bar{n}} - \bar{n}^2 = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{n \bar{n}^n}{(n-1)!} e^{-\bar{n}} - \bar{n}^2 = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\bar{n}^n}{(n-1)!} e^{-\bar{n}} + \sum_{n=2}^{\infty} \frac{\bar{n}^n}{(n-2)!} e^{-\bar{n}} - \bar{n}^2 = \bar{n} e^{-\bar{n}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\bar{n}^n}{n!} + \bar{n}^2 e^{-\bar{n}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\bar{n}^n}{n!} - \bar{n}^2 \equiv \bar{n}$ Вычислим также двухвременную корреляционную функцию, определенную как

$$\langle N(t) N(t') \rangle = \langle N(t') N(t) \rangle = \sum_{n_1, n_2} n_2 n_1 T(n_2, t | n_1, t') T(n_1, t' | 0, 0)$$

где во второй строчке мы допускаем без ограничения общности, что $t \geq t'$.

Дифференцируя по t и применяя основное уравнение, мы находим, что

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \langle N(t) N(t') \rangle &= \gamma \sum_{n_1, n_2} [n_2 T(n_2 - 1, t | n_1, t') - n_2 T(n_2, t | n_1, t')] n_1 T(n_1, t' | 0, 0) = \\ &= \gamma \sum_{n_1, n_2} n_1 T(n_2, t | n_1, t') T(n_1, t' | 0, 0) = \gamma \sum_{n_1} n_1 T(n_1, t' | 0, 0) = \gamma \langle N(t') \rangle = \gamma^2 t' \end{aligned}$$

На втором шаге мы сделали сдвиг $n_2 \rightarrow n_2 + 1$ переменной суммирования n_2 В члене прихода основного уравнения.

Тогда с использованием начального условия $\langle N(t') N(t') \rangle = \gamma^2 t'^2 + \gamma t'$ мы находим следующее выражение для двухвременной корреляционной функции однородного процесса Пуассона: $\langle N(t) N(t') \rangle = \gamma^2 t t' + \gamma t'$.

Мы могли бы рассмотреть отдельное уравнение для вероятностей $\frac{d}{dt} P(n, t) = \gamma \{P(n-1, t) - P(n, t)\}$.

Производящая функция $P(z, t) = \sum_{n=0}^{\infty} z^n P(n, t)$ подчиняется уравнению $\frac{\partial P}{\partial t} = \gamma(z-1)P \rightarrow P(z, t) = e^{(z-1)\gamma t} P(z, 0)$.

Если начальное распределение $P(n, 0) = \delta_{n,0}$, то получаем пуассоновское распределение $P(n, t) = \frac{(\gamma t)^n}{n!} e^{-\gamma t}$.

алгоритм метрополиса Алгоритм Метрополиса -Представим себе, что у нас есть функция распределения случайных величин $P(x)$.

Хочется построить алгоритм, который давал бы последовательность случайных величин, соответствующих данному распределению.

- Иными словами, предлагается построить генератор случайных чисел, который бы генерировал случайные числа, распределенные согласно $P(x)$.

пример: зависимость намагниченности от температуры в одномерной модели Изинга Методом Монте-Карло найти зависимость намагниченности от температуры в одномерной модели Изинга.

Сравнить полученные данные с аналитическим решением этой модели.

пуассоновский случайный процесс: решение Пропагатор пуассоновского случайного процесса удовлетворяет уравнению:

$$\partial_t T(n, t | n', t') = \gamma T(n-1, t | n', t') - \gamma T(n, t | n', t')$$

В качестве n может выступать, например, число излученных фотонов при эмиссии.

Решить уравнение.

пуассоновский случайный процесс: построение (?) Численно построить соответствующий Пуассоновский случайный процесс $N(t)$.

[Петруччионе Ф., Бройер Х.-П., Теория открытых квантовых систем. М.-Ижевск: 2010. Глава 1]

избранные примеры

(основные примеры уже встроены в соответствующие главы, тут чисто ради пояснения вставим)

В.1.8 элементы математического анализа

анализ нужен не так сильно в кинетике, однако и его также полезно будет указать, потому что часто различные темы используются.

полиномы Сонина полиномы Сонина нужны в приближенном решении кинетического уравнения.

Эти функции определяются формулой

$$S_r^s(x) = \frac{1}{s!} e^x x^{-r} \frac{d^s}{dx^s} e^{-x} x^{r+s}$$

...

преобразование интегралов

взятие интеграла методом перевала

В.2 Другие темы

В.2.1 Континуальный интеграл для кинетики (???)

(указание этих методов будет, мало ли, иногда будет он нужен.)

С Физика для кинетики

(пока вообще не уверен, что это на самом деле нужно расписывать, на всякий случай.)

С.1 статистическая физика

Начнем обсуждение физических основ с понятий статистической физики, как с части, наиболее близкой к кинетике.

суть и формулировка принцип Онсагера много используется в кинетике, обсудим его.

примеры принцип Онсагера думаю, примеры - самое важное.

С.2 Классическая механика

Приведем вкратце элементы теоретической механики, которые используются в кинетике.

(по ним полно вопросов, так что позже в механике ответы на это все буду прописывать.)

С.2.1 основы механики

определение механической системы из N частиц Consider an isolated, macroscopic system consisting of N identical, spherical particles of mass m enclosed in a volume V .

In classical mechanics the dynamical state of the system at any instant is completely specified by the $3N$ coordinates $\mathbf{r}^N \equiv \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N$ and $3N$ momenta $\mathbf{p}^N \equiv \mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_N$ of the particles.

The values of these $6N$ variables define a phase point in a $6N$ -dimensional phase space.

Let \mathcal{H} be the hamiltonian of the system, which we write in general form as

$$\mathcal{H}(\mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N) = K_N(\mathbf{p}^N) + V_N(\mathbf{r}^N) + \Phi_N(\mathbf{r}^N)$$

where $K_N = \sum_{i=1}^N \frac{|\mathbf{p}_i|^2}{2m}$ это кинетическая энергия, V_N межатомная потенциальная энергия, и Φ_N это потенциальная энергия взаимодействия частицы с внешним полем.

If there is no external field, the system will be both spatially uniform and isotropic.

The motion of the phase point along its phase trajectory is determined by Hamilton's equations:

$$\dot{\mathbf{r}}_i = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{p}_i}, \quad \dot{\mathbf{p}}_i = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{r}_i}$$

These equations are to be solved subject to $6N$ initial conditions on the coordinates and momenta.

Since the trajectory of a phase point is wholly determined by the values of $\mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N$ at any given time, it follows that two different trajectories cannot pass through the same point in phase space.

The aim of equilibrium statistical mechanics is to calculate observable properties of a system of interest either as averages over a phase trajectory (the method of Boltzmann), or as averages over an ensemble of systems, each of which is a replica of the system of interest (the method of Gibbs).

The main features of the two methods are reviewed in later sections of this chapter.

приведенная функция распределения Описание системы полной функцией распределения во многом не имеет излишне детальное.

Чаще нам интересно поведение только подмножества этих частиц n , а оставшаяся информация может быть получена интегрированием функции $f^{[N]}$ по координатам и импульсам по остальным $(N - n)$ частицам.

Для этого вводится приведенная функция распределения $f^{(n)}(\mathbf{r}^n, \mathbf{p}^n; t)$ как

$$f^{(n)}(\mathbf{r}^n, \mathbf{p}^n; t) = \frac{N!}{(N - n)!} \iint f^{[N]}(\mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N; t) d\mathbf{r}^{(N-n)} d\mathbf{p}^{(N-n)}$$

где $\mathbf{r}^n \equiv \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n$ и $\mathbf{r}^{(N-n)} \equiv \mathbf{r}_{n+1}, \dots, \mathbf{r}_N$.

Теперь величина $f^{(n)} d\mathbf{r}^n d\mathbf{p}^n$ равна вероятности найти группу из n частиц в элементе приведенного фазового объема $d\mathbf{r}^n d\mathbf{p}^n$ at time t , irrespective of the coordinates and momenta of the remaining particles; the combinatorial factor $N!/(N - n)!$ is the number of ways of choosing a subset of size n .

физический смысл функции распределения то се, оттуда-то получается...

физический смысл одночастичной функции распределения

получение k -частичной функции распределения

уравнение Лиувилля как основа описания функции распределения в подходе Гиббса Приведем вкратце обзор подхода Гиббса к статистической механике.

Распределение частицы системы в фазовом пространстве описывается пространственно-фазовой плотностью распределения плотностью вероятности $f^{[N]}(\mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N; t)$.

Величина $f^{[N]} d\mathbf{r}^N d\mathbf{p}^N$ выражает вероятность, что за время t физическая система находится в данном микроскопическом состоянии, что соответствует наличие частицы в инфинитезимальном, $6N$ -мерном элементе фазового пространства $d\mathbf{r}^N d\mathbf{p}^N$.

Это определение выражает то, что интеграл по $f^{[N]}$ всему фазовому пространству имеет вид:

$$\iint f^{[N]}(\mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N; t) d\mathbf{r}^N d\mathbf{p}^N = 1$$

для всех t .

Зная сполна функцию распределения вероятности, можно посчитать среднее значение любой функции координат и импульсов.

The time evolution of the probability density at a fixed point in phase space is governed by the Liouville equation, which is a $6N$ -dimensional analogue of the equation of continuity of an incompressible fluid; it describes the fact that phase points of the ensemble are neither created nor destroyed as time evolves.

Уравнение Лиувилля может быть записано, как

$$\frac{\partial f^{[N]}}{\partial t} + \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial f^{[N]}}{\partial \mathbf{r}_i} \cdot \dot{\mathbf{r}}_i + \frac{\partial f^{[N]}}{\partial \mathbf{p}_i} \cdot \dot{\mathbf{p}}_i \right) = 0$$

или в более компактном виде

$$\frac{\partial f^{[N]}}{\partial t} = \{ \mathcal{H}, f^{[N]} \}$$

с помощью скобок Пуассона: $\{A, B\} \equiv \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial A}{\partial \mathbf{r}_i} \cdot \frac{\partial B}{\partial \mathbf{p}_i} - \frac{\partial A}{\partial \mathbf{p}_i} \cdot \frac{\partial B}{\partial \mathbf{r}_i} \right)$

Также можно ввести оператор Лиувилля \mathcal{L} , как

$$\mathcal{L} \equiv i\{ \mathcal{H}, \}$$

и теперь записать уравнение Лиувилля как:

$$\frac{\partial f^{[N]}}{\partial t} = -i\mathcal{L}f^{[N]}$$

Теперь формально решение имеет вид:

$$f^{[N]}(t) = \exp(-i\mathcal{L}t)f^{[N]}(0)$$

The Liouville equation can be expressed even more concisely in the form

$$\frac{df^{[N]}}{dt} = 0$$

where d/dt denotes the total derivative with respect to time.

This result is called the Liouville theorem.

The meaning of the Liouville theorem is that the probability density, as seen by an observer moving with a phase point along its phase trajectory, is independent of time.

Consider the phase points that at time $t = 0$ are contained within a phasespace element $d\mathbf{r}^N(0)d\mathbf{p}^N(0)$.

As time increases, the element will change in shape but no phase points will enter or leave, otherwise phase trajectories would cross each other.

The Liouville theorem therefore implies that the volume of the element must remain the same.

volume in phase space is said to be "conserved".

In mathematical terms, conservation of volume in phase space is equivalent to the statement that the jacobian corresponding to the transformation $\mathbf{r}^N(0), \mathbf{p}^N(0) \rightarrow \mathbf{r}^N(t), \mathbf{p}^N(t)$ is equal to unity; this is easily proved explicitly.

The time dependence of any function of the phase-space variables, $B(\mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N)$ say, may be represented in a manner similar to (2.1.9).

Although B is not an explicit function of t , it will in general change with time as the system moves along its phase trajectory.

The time derivative of B is therefore given by

$$\frac{dB}{dt} = \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial B}{\partial \mathbf{r}_i} \cdot \dot{\mathbf{r}}_i + \frac{\partial B}{\partial \mathbf{p}_i} \cdot \dot{\mathbf{p}}_i \right)$$

or, from Hamilton's equations.

$$\frac{dB}{dt} = \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial B}{\partial \mathbf{r}_i} \cdot \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{p}_i} - \frac{\partial B}{\partial \mathbf{p}_i} \cdot \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{r}_i} \right) = i\mathcal{L}B$$

which has as its solution

$$B(t) = \exp(i\mathcal{L}t)B(0)$$

Note the change of sign in the propagator compared with)2.1 .10 (??????).

смысл теоремы Лиувилля

вывод теоремы Лиувилля

зануление слагаемых при интегрировании по координатам или импульсам

С.2.2 механическая теория столкновений

Часто нужно помнить основы теории столкновений.

(пропишу сперва в самой механике это!!!)

С.3 квантовая механика

чисто то, что будем использовать.

ничего другого.

матрица плотности

все про нее, ибо она и нужна.

обзор применений матрицы плотности в кинетике в теории линейного отклика
она нужна (максимов так говорит)

также в начале самом она нужна.

доучу скоро!

модели квантовой механики**квазиклассика**

Кинетика часто работает именно на квазиклассическом уровне, так что эти методы следует понимать нормально.

(сперва в квантмехе прописываю, потом в этой записи в задачах, потом уже собирать буду сюда в дополнения)

квантовая теория рассеяния

золотое правило Ферми (????!!!) - короткая теория напомним, потому что оно нужно

золотое правило Ферми (????!!!) - применения в кинетике напомним, потому что оно нужно

Борновское приближение - короткая теория

Борновское приближение - применения в кинетике

С.4 необходимая электродинамика

обсудим основы электродинамики, которые используются в критических явлениях в электромагнитных средах.

основы электродинамика

уравнения максвелла К этим уравнениям надо присоединить систему усредненных уравнений Максвелла:

$$\begin{aligned}\operatorname{rot} \mathbf{E} &= -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, & \operatorname{div} \mathbf{B} &= 0 \\ \operatorname{rot} \mathbf{B} &= \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}, & \operatorname{div} \mathbf{E} &= 4\pi\rho,\end{aligned}$$

где ρ и \mathbf{j} - средние плотность зарядов и плотность тока, выражающиеся через функции распределения очевидными формулами

$$\begin{aligned}\rho &= e \int (zf_i - f_e) d^3p \\ \mathbf{j} &= e \int (zf_i - f_e) \mathbf{v} d^3p\end{aligned}$$

равновесная плазма в двух словах

С.5 основы гидродинамики

Обсудим гидродинамику с точки зрения кинетики.

Эйлеров и Лагранжев способы описания жидкости классика.

Уравнение Навье-Стокса с точки зрения гидродинамики

D Моделирование кинетических явлений

Моделирование - одно из самых вдохновляющих, что есть в кинетике.

обсудим, как это моделировать, ибо на самом деле очень интересно смотреть на различные хаотические анимации.

D.1 Примеры моделирования

D.1.1 моделирование диффузии

D.1.2 моделирование геометрического хаоса (???)

мб это кинетикой делается, если запрограммировать??
красивые такие анимации????

References

- [1] Daniel Arovas. Lecture notes on condensed matter physics, chapter 1 boltzmann transport. *Department of Physics, University of California, San Diego*, page 46, 2010.
- [2] Daniel Arovas. Lecture notes on nonequilibrium statistical physics. 2018.
- [3] Jean-Pierre Hansen and Ian R McDonald. *Theory of simple liquids*. Elsevier, 1990.
- [4] Gordei B Lesovik and Ivan A Sadovskyy. Scattering matrix approach to the description of quantum electron transport. *Physics-Uspekhi*, 54(10):1007–1059, Oct 2011.
- [5] Максимов Л. А. and Полищук И. Я. *Лекции по физической кинетике: Учебное пособие*. М.: МФТИ, 2007.
- [6] Алексей Алексеевич Абрикосов. *Основы теории металлов*. Физматлит, 2010.
- [7] Н Н Боголюбов. *Избранные труды по статистической физике*. МГУ, 1979.
- [8] С.Н. Бурмистров. *Задачи по физической кинетике: Учебное пособие*. Долгопрудный: Издательский Дом Интеллект, 2016.
- [9] Колоколов И. В. Лекции и семинары по курсу “Физическая кинетика и стохастические процессы”.
- [10] В.Н.Глазков. Заметки к лекциям по общей физике. 2018.
- [11] А В Шитов Л С Левитов. *Функция Грина Задачи и Решения*.
- [12] Л Д Ландау and Е М Лифшиц. Теоретическая физика (Том 9. Статистическая физика. Часть 2). *книга*, 2004.
- [13] ЛД Ландау and ЕМ Лифшиц. Теоретическая физика. Том v. Статистическая физика, часть 1. *книга*, 1976.
- [14] ЛД Ландау, ЕМ Лифшиц, and ЛП Питаевский. Теоретическая физика. Том X. Физическая кинетика. 2002.
- [15] В.В Лебедев. Флуктуационные эффекты в макрофизике, курс лекций, 2004.
- [16] Э.Е.Сон. Лекции по физической механике. 2010.