Уравнения движения

November 15, 2023

1 Введение

Траектория: $x(t), y(t)$ и т.д. То, что описывает движение частицы. Результат решения уравнений движения.

Уравнения движения описывают силы (причины движения).

Поэтому они имеют вид дифференциальных уравнений, зависящих от времени.

Самый простой пример - уравнение Ньютона.

$$\frac{d^2x}{dt^2} \equiv \ddot{x} = \frac{1}{m}\sum F_x$$

$$\ddot{\vec{r}} = \frac{1}{m}\sum \vec{F}$$

В кристаллах вместо обычной массы будет стоять эффективная масса m^* электрона, которая может зависеть от направления.

Например, в арсениде галлия (GaAs) эффективная масса электрона:

$$m^* = 0.067m_e$$

Другие примеры уравнений движения: уравнения Лагранжа, уравнения Гамильтона и т.д.

Некоторые формы движения не приводят к конкретным траекториям. Примеры: квантовые уравненния (ур-е Шредингера), уравнения переноса (теплопроводности и диффузии).

2 Движение электронов в полупроводнике

Теория Друде - электроны в кристалле движутся так же, как в вакууме, но с другой (эффективной) массой, а также на них действует сила сопротивления со стороны кристалла, пропорциальная скорости.

$$\ddot{\vec{r}} = \frac{q}{m^*}\left(\vec{E} + \left[\dot{\vec{r}}, \vec{B}\right]\right) - \frac{\dot{\vec{r}}}{\tau}$$

τ - время рассеяния (на самом деле означает время свободного пробега электрона).

Если кроме полей и кристалла электрон движется в каком-то ещё потенциале $U(\vec{r})$ (например, он движется среди нанокристаллов или квантовых точек), то необходимо добавить силу, связанную с этим потенциалом:

$$\ddot{\vec{r}} = \frac{q}{m^*}\left(\vec{E} + \left[\dot{\vec{r}}, \vec{B}\right]\right) - \frac{\dot{\vec{r}}}{\tau} - \frac{1}{m^*}\nabla U$$

Если учесть тепловое движение, то нужно добавить случайное воздействие в уравнение движения, которое будет описывать случайное изменение скорости электрона под действием тепловых колебаний атомов. Можно вместо случайного изменения скорости случайно менять координату (это не соответствует физике явления, но проще сделать во время расчета). **Мы тепловое движение учитывать не будем (считаем, что эксперимент проводится при низких температурах, около 4К).**

Если сила сопротивления Друде описывает передачу части энергии электрона кристаллической решетке, то случайное блуждание будет описывать диффузию электронов (расплывание в стороны).

Уравнение движения на самом деле удобнее переписать, используя и координату, и скорость:

$$\begin{cases} \dot{\vec{v}} = & \frac{q}{m^*}\left(\vec{E} + \left[\vec{v}, \vec{B}\right]\right) - \frac{\vec{v}}{\tau} - \frac{1}{m^*}\nabla U\left(\vec{r}\right) \\ \dot{\vec{r}} = & \vec{v} \end{cases}$$

В случае случайного изменения координаты, мы можем модифицировать второе уравнение:

$$\begin{cases} \dot{\vec{v}} = & \frac{q}{m^*}\left(\vec{E} + \left[\vec{v}, \vec{B}\right]\right) - \frac{\vec{v}}{\tau} - \frac{1}{m^*}\nabla U\left(\vec{r}\right) \\ \dot{\vec{r}} = & \vec{v} + \vec{v}_{rand} \end{cases}$$

где $\vec{v}_{rand}$ - случайная добавка к скорости, которая меняется с каждым шагом по времени (шаги по времени у нас появятся, когда мы будем использовать численные методы).

Если учесть отталкивание между электронами, то необходимо добавить ещё силу Кулона:

$$\ddot{\vec{r}} = \frac{q}{m^*}\left(\vec{E} + \left[\dot{\vec{r}}, \vec{B}\right]\right) - \frac{\dot{\vec{r}}}{\tau} - \frac{1}{m^*}\nabla U + \frac{q^2}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon}\sum_n \frac{\vec{r} - \vec{r}_n}{\left|\vec{r} - \vec{r}_n\right|^3}$$

где n - индекс, проходящий по всем электронам, достаточно близким к тому, который мы рассматриваем (или всем электронам в нашей области расчёта).

Тогда приходится решать систему уравнений движения для всех электронов сразу.

$$\ddot{\vec{r}}_k = \frac{q}{m^*}\left(\vec{E} + \left[\dot{\vec{r}}_k, \vec{B}\right]\right) - \frac{\dot{\vec{r}}_k}{\tau} - \frac{1}{m^*}\nabla U\left(\vec{r}_k\right) + \frac{q^2}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon}\sum_n \frac{\vec{r}_k - \vec{r}_n}{\left|\vec{r}_k - \vec{r}_n\right|^3}$$

3 Полная энергия

Полная энергия электронов без учета рассеяния (то есть силы сопротивления $-\frac{\vec{v}}{\tau}$) должна сохраняться. Это можно использовать для проверки точности метода расчёта.

Перед этим учтём, что напряженность поля (у нас оно направлено только по оси x) связана с потенциалом:

$$\vec{E} = -\frac{\partial}{\partial x}\varphi$$

$$q\vec{E} = -\frac{\partial}{\partial x}U_E$$

Однородное электрическое поле:

$$U_E = U_0 - qEx$$

Запишем выражение для полной энергии одного электрона:

$$W = K + U = \frac{m}{2}\left(v_x^2 + v_y^2\right) + U_{QD}\left(x, y\right) + U_0 - qEx$$

С учетом периодических граничных условий, когда электрон переходит через правую границу, энергия скачком увеличивается на qEL, что не соответствует физике процесса.

Решением этой проблемы будет хранить **истинную координату** $\tilde{x}$ для каждого электрона. То есть при каждом переходе через правую или через левую границу, нужно сохранять его настоящую координату, хотя во всех уравнениях будет "внутренняя координата" расчётной области, для которой выполняется условие:

$$x \in [0, L]$$

Если разобраться, как правильно сохранять $\tilde{x}$ на каждом шаге, то можно вычислять правильную энергию:

$$W = K + U = \frac{m^*}{2}\left(v_x^2 + v_y^2\right) + U_{QD}\left(x, y\right) + U_0 - qE\tilde{x}$$

Как влияет сила сопротивления $-\frac{\vec{v}}{\tau}$ на полную энергию?

Без учета других слагаемых уравнение движения (уравнение Друде) будет иметь вид:

$$\dot{\vec{v}} = \frac{q}{m^*}\vec{E} - \frac{\vec{v}}{\tau}$$

Его точным решением при нулевом начальном условии $\vec{v}(0) = 0$ будет:

$$\vec{v}(t) = \frac{q\tau\vec{E}}{m^*}\left(1 - \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right)\right)$$

$$\frac{q\tau E}{m^*} = v_\infty$$

$$\mu = \frac{v_\infty}{E} = \frac{q\tau}{m^*}$$

$$\sigma = qn\mu$$

Получается, что полная энергия электрона должна иметь вид:

$$W = K + U = \frac{m^*}{2}v^2 = \frac{q^2E^2\tau^2}{2m^*}\left(1 - \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right)\right)^2$$

$$W(t \to \infty) = \frac{q^2E^2\tau^2}{2m^*}$$

$$\tilde{x}(t \to \infty) = \tilde{x}_0 + v_\infty t$$

Всю остальную энергию, которую он мог бы получать от электрического поля, он отдает кристаллу.

$$Q(t \to \infty) = qE\tilde{x} = qE\left(\tilde{x}_0 + v_\infty t\right) = Q_0 + qEv_\infty t = Q_0 + \frac{\tau q^2E^2}{m^*}t$$

$$Q(t \to \infty) = Q_0 + q\mu E^2 t$$

Для n электронов получаем:

$$Q(t \to \infty) = Q_0 n + qn\mu E^2 t = Q_0 n + \sigma E^2 t$$

Мощность нагрева равна:

$$P = \frac{dQ}{dt} = \sigma E^2 = \frac{j^2}{\sigma} = \rho j^2$$

Это в точности закон Джоуля-Ленца.