Желательные знания по курсу «Физическая кинетика»

Автор заметок: Хоружий Кирилл

От: *26 мая 2023 г.*

Содержание

1 Проводимость Друде

Общефизическое рассмотрение. Рассмотрим движение электронов под действием электрического поля

$$m(\ddot{x} + \gamma\dot{x}) = eE,$$

в установившемся режиме $\ddot{x} = 0$, $\gamma = 1/\tau$, где τ – время столкновений. Так находим

$$v = \frac{e\tau}{m}E, \qquad j = env = \frac{ne^2}{m}\tau E, \qquad \Rightarrow \qquad \sigma_{\text{D}} = \frac{ne^2}{m}\tau.$$

τ-приближение. Воспользуемся τ-приближением для I_{st}

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + v_i\frac{\partial}{\partial r_i} + eE_i\frac{\partial}{\partial p_i}\right) f(r,p,t) = -\frac{f(r,p,t) - f_{\text{eq}}(p)}{\tau}.$$

Рассматривая однородную стационарную задачу приходим к уравнению, вида

$$eE_i\frac{\partial}{\partial p_i}f(p) = -\frac{\delta f(p)}{\tau},$$

где $\delta f = f - f_{\text{eq}}$, а хотим найти $j = e\int \frac{dp}{(2\pi\hbar)^d}\delta f(p) v(p)$.

Рассматривая задачу в предположение о линейном отклике, находим

$$f(p) = f_{\text{eq}}(p) + \chi_i(p)E_i + \ldots, \quad \Rightarrow \quad \chi_i(p) = -e\tau\frac{\partial}{\partial p_i}f_{\text{eq}}(p),$$

и подставляя это в выражение для j

$$j_i = -e^2\tau E_s\int\frac{dp}{(2\pi\hbar)^d}\frac{p_i}{m}\frac{\partial}{\partial p_s}f_{\text{eq}}(p) = \frac{e^2\tau E_i}{m}\int\frac{dp}{(2\pi\hbar)^d}f_{\text{eq}}(p),$$

где мы проинтегрировали по частям. Таким образом приходим к выражению для проводимости Друде

$$j_i = \frac{n_{\text{eq}}e^2\tau}{m}E_i = \sigma_{\text{D}}E_i, \qquad \sigma_{\text{D}} = \frac{n_{\text{eq}}e^2}{m}\tau.$$

Переменное поле. Пусть теперь $E_i = E_i(t)$, тогда

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + eE_i(t)\frac{\partial}{\partial p_i}\right) f(p,t) = -\frac{f(p,t) - f_{\text{eq}}(p)}{\tau}.$$

Переходя к линейному отклику, находим

$$\frac{\partial}{\partial t}\delta f(p,t) + eE_i(t)\frac{\partial}{\partial p_i}f_{\text{eq}}(p,t) = -\frac{\delta f(p,t)}{\tau},$$

или переходя к Фурье $\delta f(t) = \int\frac{d\omega}{2\pi}e^{-i\omega t}\delta f(\omega)$, находим

$$-i\omega\,\delta f(p,\omega) + eE_i(\omega)\frac{\partial}{\partial p_i}f_{\text{eq}}(p) = -\frac{\delta f(p,\omega)}{\tau},$$

тогда Фурье-образ поправки функции распределения будет равен

$$\delta f(p,\omega) = -\frac{eE_i(\omega)}{1 - i\omega\tau}\frac{\partial f_{\text{eq}}(p)}{\partial p_i}\tau.$$

Подставляя в выражение для тока j, получим

$$j_i(\omega) = \frac{\sigma_{\text{D}}}{1 - i\omega\tau}E_i(\omega) = \sigma(\omega)E_i(\omega),$$

с полюсом в нижней полуплоскости – причинная функция Грина. Собственно, после обратного Фурье, находим

$$j_i = \int_{-\infty}^{t}\sigma(t - t')E_i(t)\,dt', \qquad \Rightarrow \qquad \sigma(t) = \int\frac{d\omega}{2\pi}e^{-i\omega t}\frac{\sigma_{\text{D}}}{1 - i\omega\tau} = \sigma_{\text{D}}\cdot\frac{1}{\tau}e^{-t/\tau}\theta(t).$$

2 Уравнение Больцмана

Уравнения Лиувилля. Нам пригодится *уравнение Лиувилля*

$$\dot{\boldsymbol{r}}_i = \frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{p}_i}, \qquad \dot{\boldsymbol{p}}_i = -\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{r}_i}, \qquad H = K(\boldsymbol{p}^N) + V(\boldsymbol{r}^N) + \Phi(\boldsymbol{r}^N), \qquad K(\boldsymbol{p}^N) = \sum_{i=1}^N \frac{\boldsymbol{p}_i^2}{2m}, \qquad \Phi(\boldsymbol{r}^N) = \sum_{i=1}^N \varphi(\boldsymbol{r}_i).$$

Важным его свойством является сохранение фазового объема

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \boldsymbol{j} = 0, \qquad \frac{\partial f^{[N]}}{\partial t} + \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}_i} \left[f^{[N]} \dot{\boldsymbol{r}}_i \right] + \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{p}_i} \left[f^{[N]} \dot{\boldsymbol{p}}_i \right] \right) = \frac{df^{[N]}}{dt} = 0,$$

где подставили $\rho = f^{[N]}$ и $\boldsymbol{j} = \{ f^{[N]} \dot{\boldsymbol{r}}_i, f^{[N]} \dot{\boldsymbol{p}}_i \}$.

Редуцированная функция. В дальнейшем пригодится *редуцированная функция* $f^{(n)}$:

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

где $d\boldsymbol{r}^{(N-n)} = d\boldsymbol{r}_{n+1} \ldots d\boldsymbol{r}_N$ и $d\boldsymbol{p}^{(N-n)} = d\boldsymbol{p}_{n+1} \ldots d\boldsymbol{p}_N$, $f^{[N]}$ – функция распределения N частиц.

БГКИ. Можем получить цепочку уравнений Боголюбова-Борна-Грина-Кирквуда-Ивона:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \sum_{i=1}^n \frac{\boldsymbol{p}_i}{m} \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}_i} + \sum_{i=1}^n \left[\boldsymbol{X}_i + \sum_{j=1}^n F_{ij} \right] \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{p}_i} \right) f^{(n)} = -\sum_{i=1}^n \int F_{i,n+1} \frac{\partial f^{(n+1)}}{\partial \boldsymbol{p}_i}\, d\boldsymbol{r}_{n+1}\, d\boldsymbol{p}_{n+1}, \tag{2.1}$$

для $n = 1, 2, \ldots$ с нормировкой $\int f^{(n)}\, d\boldsymbol{r}^n\, d\boldsymbol{p}^n = \frac{N!}{(N-n)!}$.

Приближение среднего поля. Для $n = 1$, после факторизации $f^{(2)}(\xi_1, \xi_2, t) = f^{(1)}(\xi_1^t) f^{(1)}(\xi_2^t)$, уравнение сведётся к приближению среднего поля – *бесстолкновительному уравнению Власова*

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\boldsymbol{p}_1}{m} \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}_1} + \left[\boldsymbol{X}_1 + \tilde{\boldsymbol{F}} \right] \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{p}_1} \right) f^{(1)} = 0, \qquad \tilde{\boldsymbol{F}}(\boldsymbol{r}_1, t) = \int \boldsymbol{F}_{12}(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) f^{(1)}(\boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{p}_2, t)\, d\boldsymbol{r}_2\, d\boldsymbol{p}_2, \tag{2.2}$$

которое валидно при $nd^3 \gg 1$.

Интеграл столкновений. Для $n = 2$, игнорируя трёхчастичные столкновения, получаем соотношение для двухчастичной функции

$$\boldsymbol{F}_{12} \left(\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{p}_1} - \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{p}_2} \right) f^{(2)} = -\left(\frac{\boldsymbol{p}_1}{m} \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}_1} + \frac{\boldsymbol{p}_2}{m} \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}_2} \right) f^{(2)},$$

которое, при подстановке в выражение для $n = 1$, приводит к интегралу столкновений

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\boldsymbol{p}_1}{m} \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}_1} + \boldsymbol{X}_1 \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{p}_1} \right) f^{(1)}(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{p}_1, t) = -\int \boldsymbol{F}_{12} \left(\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{p}_1} - \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{p}_2} \right) f^{(2)}\, d\xi_2 = \int \left[\frac{\boldsymbol{p}_2}{m} - \frac{\boldsymbol{p}_1}{m} \right] \frac{\partial f^{(2)}}{\partial \boldsymbol{r}}\, d\boldsymbol{r}\, d\boldsymbol{p}_2,$$

где в правой части можно приглядевшись увидеть интеграл столкновений в приближении Больцмана

$$\int d\boldsymbol{p}_2\, d^2\sigma \boldsymbol{v}_{\text{отн}} \left(f^{(1)}(\boldsymbol{p}_2', \boldsymbol{r}, t) f^{(1)}(\boldsymbol{p}_1', \boldsymbol{r}, t) - f^{(1)}(\boldsymbol{p}_2, \boldsymbol{r}, t) f^{(1)}(\boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{r}, t) \right), \tag{2.3}$$

с $\boldsymbol{v}_{\text{отн}} = \frac{\boldsymbol{p}_2}{m} - \frac{\boldsymbol{p}_1}{m}$.

3 Тепловой баланс

Локальное равновесие. Мы в дальнейшем будем верить в локальное равновесие

$$f(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p}, t) \approx \left(\exp\left(\frac{\varepsilon(\boldsymbol{p}) - \mu(\boldsymbol{r}, t)}{T(\boldsymbol{r}, t)}\right) \pm 1\right)^{-1}, \qquad |l\, T'_r| \ll T,$$

где l – длина свободного пробега.

Законы сохранения. Можем получить, что

$$\frac{\partial S(\boldsymbol{r}, t)}{\partial t} + \operatorname{div} \boldsymbol{J}_s = -\boldsymbol{J}_Q \cdot \frac{\boldsymbol{\nabla} T}{T^2} + \boldsymbol{J}_e \cdot \frac{\boldsymbol{\mathcal{E}}}{T},$$

где $\boldsymbol{\mathcal{E}}$ – электрическое поле, $\boldsymbol{J}_Q$ – поток тепла. При этом выполняются закон сохранения числа частиц:

$$\frac{\partial n(\boldsymbol{r}, t)}{\partial t} + \operatorname{div} \boldsymbol{J} = 0, \qquad \boldsymbol{J} = \int \frac{d^3\boldsymbol{p}}{(2\pi\hbar)^3} f(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p}, t) \boldsymbol{v}(\boldsymbol{p}),$$

верным для любого локального в координатном пространстве интеграле столкновений. Аналогично для энергии

$$\frac{\partial E(\boldsymbol{r}, t)}{\partial t} + \operatorname{div} \boldsymbol{J}_E = 0, \qquad \boldsymbol{J} = \int \frac{d^3\boldsymbol{p}}{(2\pi\hbar)^3} \varepsilon(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{r}) f(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p}, t) \boldsymbol{v}(\boldsymbol{p}),$$

для упругих столкновений.

Тепло. Из термодинамики

$$T\frac{\partial S}{\partial t} = \frac{\partial Q}{\partial t} = \frac{\partial E}{\partial t} - (\mu + e\varphi)\frac{\partial n}{\partial t} = -\frac{\partial \boldsymbol{J}_E}{\partial \boldsymbol{r}} + (\mu + e\varphi)\frac{\partial \boldsymbol{J}_e}{\partial e\boldsymbol{r}}.$$

Здесь удобно ввести

$$\boldsymbol{\mathcal{E}} = \boldsymbol{\mathcal{E}}_{\text{ext}} - \nabla\mu/e = -\nabla(\mu + e\varphi)/e, \qquad \boldsymbol{J}_Q \overset{\text{def}}{=} \boldsymbol{J}_E - (\mu + e\varphi)\boldsymbol{J}_e/e,$$

и получить

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial \boldsymbol{j}_Q}{\partial \boldsymbol{r}} = \boldsymbol{\mathcal{E}} \cdot \boldsymbol{J}_e.$$

Задачу можно посмотреть на с. 103 `презентации`.

Теорема Онзагера – $L_{ij} = L_{ji}$.

Эффект Зеебека – это термоэлектрический эффект, при котором появляется разность потенциалов на контакте двух проводников разной температуры.

Эффект Пельтье – термоэлектрическое явление переноса энергии при прохождении электрического тока в месте контакта (спая) двух разнородных проводников, от одного проводника к другому.

4 Марковские процесса

Уравнение Чепмена-Колмогорова. Далее говорим о *пропагаторе*

$$T(x,t|x',t') = \delta(x - \Phi_{t-t'}(x')),$$

иначе вероятности перехода из x в x' за время $t-t'$, где $\Phi_{t-t'}(x')$ – эволюция системы.

В дискретном случае *уравнение Чепмена-Колмогорова* –

$$T_{t+s} = T_t T_s,$$

матрицы переходов просто перемножаются.

Нам интереснее будет работать с диференциальным уравнением Чепмена-Колмогорова

$$\partial_t P(n,t) = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \left(W(n|m,t)P(m,t) - W(m|t,t)P(n,t) \right), \tag{4.1}$$

где первое слагаемое – приток из системы, второе – отток в систему.

5 Уравнение Навье-Стокса

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetur adipisicing elit, sed do eiusmod tempor incididunt ut labore et dolore magna aliqua. Ut enim ad minim veniam, quis nostrud exercitation ullamco laboris nisi ut aliquip ex ea commodo consequat. Duis aute irure dolor in reprehenderit in voluptate velit esse cillum dolore eu fugiat nulla pariatur. Excepteur sint occaecat cupidatat non proident, sunt in culpa qui officia deserunt mollit anim id est laborum.

6 Уравнение Фоккера-Планка

Уравнение Ланжевена. Стохастическое уравнение Ланжевена
$$\frac{dx}{dt} = g(x(t)) + \xi(t),$$
где $\xi(t)$ – случайный процесс. Заметим, что
$$T(x,t|x',t') = \langle \delta(x - \Phi_{t-t'}(x')) \rangle_\xi,$$
и можем разложиться в ряд
$$E(x, t+\delta t|x', t) = \langle \delta(x - \delta x(t) - x') \rangle = \left(1 + \langle \delta x(t) \rangle \frac{d}{dx'} + \frac{1}{2} \langle |\delta x(t)|^2 \rangle \frac{d^2}{dx'^2} + \ldots \right) \delta(x - x')$$
Далее заменим средние первого порядка на F_1 и второго на F_2, а остальные малы.

Уравнение Фокера-Планка. Получаем *уравнение Фокера*
$$\frac{\partial}{\partial t} T(x,t|x_0,t_0) = -\frac{d}{dx}\left(F_1(x) T(x,t|x_0,t_0)\right) + \frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2}\left(F_2(x) T(x,t|x_0,t_0)\right).$$
Вообще F мы знаем из уравнения Ланжевена
$$F_1(x)\delta t = \langle \delta x(t) \rangle = g(x), \qquad F_2(x) = \frac{1}{\delta t}\int_t^{t+\delta t} \langle \xi(t_1)\xi(t_2) \rangle \, dt_1 \, dt_2 = D.$$
Подробнее в `билетах` на странице 45.

Подставим для Фоккера-Планка
$$g(x) = (v(p),\, F(r)) = \frac{d}{dt}\begin{pmatrix} r \\ p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v(p) \\ -\gamma p - \nabla U + \xi_p(t) \end{pmatrix}, \qquad T(x,t|x_0,t_0) = \langle f(r,p,t) \rangle_\xi.$$
И в более конкретизированном виде для $P = \langle f(r,p,t) \rangle$.
$$\frac{\partial}{\partial t} P + \frac{\partial}{\partial r} vP + \frac{\partial}{\partial p}(-\gamma p - \nabla U)P - \frac{D}{2}\frac{\partial}{\partial p^2} P = 0. \tag{6.1}$$