Название

Авторы заметок: Хоружий Кирилл

От: *3 февраля 2023 г.*

Содержание

Начнём с уравнение Лиувилля, считая заданными $\boldsymbol{r}^N = (\boldsymbol{r}_1,\,\ldots,\,\boldsymbol{r}_N)$ и $\boldsymbol{p}^N = (\boldsymbol{p}_1,\,\ldots,\,\boldsymbol{p}_N)$

$$\dot{\boldsymbol{r}}_i = \frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{p}_i}, \qquad \dot{\boldsymbol{p}}_i = -\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{r}_i},$$

где Гамильтониан запишется в виде

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

Введём также функцию распределения $f^{[N]}(\boldsymbol{r}^N, \boldsymbol{p}^N, t)$ так чтобы $f^{[N]}(\boldsymbol{r}^N, \boldsymbol{p}^N, t)\,d\boldsymbol{r}^N\,d\boldsymbol{p}^N$ – вероятность находиться в данной точке фазового пространства. Нормировка единичная.

Закон сохранения. Закон сохранения в дифференциальном виде запишется в виде

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \boldsymbol{j} = 0,$$

где в нашем случае ρ – $f^{[N]}$, и $\boldsymbol{j} = \{f^{[N]}\dot{\boldsymbol{r}}_i, f^{[N]}\dot{\boldsymbol{p}}_i\}$, тогда

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

при подстановке уранений Гамильтона.

Редуцированная функция. Редуцированная функция $f^{(n)}$ определяется как

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

где $d\boldsymbol{r}^{(N-n)} = d\boldsymbol{r}_{n+1}\ldots d\boldsymbol{r}_N$ и $d\boldsymbol{p}^{(N-n)} = d\boldsymbol{p}_{n+1}\ldots d\boldsymbol{p}_N$.

Работаем приближение потенциального внешнего поля

$$\dot{\boldsymbol{p}}_i = \boldsymbol{X}_i + \sum_{j=1}^N \boldsymbol{F}_{ij}(\boldsymbol{r}_i,\,\boldsymbol{r}_j), \qquad \boldsymbol{F}_{ii} = 0.$$

Тогда сохранение перепишется в виде

$$\frac{\partial f^{[N]}}{\partial t} + \sum_{i=1}^N \frac{\boldsymbol{p}_i}{m}\frac{\partial f^{[N]}}{\partial \boldsymbol{r}_i} + \sum_{i=1}^N \boldsymbol{X}_i \frac{\partial f^{[N]}}{\partial \boldsymbol{p}_i} = -\sum_{i=1}^N\sum_{j=1}^N \boldsymbol{F}_{ij}\frac{\partial f^{[N]}}{\partial \boldsymbol{p}_i}.$$

При редуцирование в силу ограниченности в фазовом пространстве, остаётся

$$\frac{\partial f^{(n)}}{\partial t} + \sum_{i=1}^n \frac{\boldsymbol{p}_i}{m}\frac{\partial f^{(n)}}{\partial \boldsymbol{r}_i} + \sum_{i=1}^n \boldsymbol{X}_i \frac{\partial f^{(n)}}{\partial \boldsymbol{p}_i} = -\sum_{i=1}^n\sum_{j=1}^n \boldsymbol{F}_{ij}\frac{\partial f^{(n)}}{\partial \dot{\boldsymbol{p}}_i} - \frac{N!}{(N-n)!}\sum_{i=1}^n\sum_{j=n+1}^N \int \boldsymbol{F}_{ij}\frac{\partial f^{[N]}}{\partial \boldsymbol{p}_i}\,d\boldsymbol{r}^{(N-n)}\,d\boldsymbol{p}^{(N-n)}.$$

С учетом симметричности функции распределения, последнее слагаемое можем переписать в виде

$$-\frac{N!(N-n)}{(N-n)!}\sum_{i=1}^n \int F_{i,n+1}\frac{\partial f^{[N]}}{\partial \boldsymbol{p}_i}\,d\boldsymbol{r}^{(N-n-1)}\,d\boldsymbol{p}^{(N-n-1)}\,d\boldsymbol{r}_{n+1}\,d\boldsymbol{p}_{n+1},$$

Так приходим к выражению, вида

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

Эта система уравнений называется цепочкой уравнений Боголюбова-Борна-Грина Обычно интерес представляют $n = 1, 2$, кстати $\int f^{(n)}\,d\boldsymbol{r}^n\,d\boldsymbol{p}^n = \frac{N!}{(N-n)!}$.

Одночастичный случай

Для $n = 1$ уравнение сведётся к

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

В силу отсутствия корелляций между столкновениями попробуем сделать приближение

$$f^{(2)}(\xi_1, \xi_2, t) = f^{(1)}(\xi_1^t) f^{(1)}(\xi_2^t).$$

Определяя

$$\tilde{\boldsymbol{F}}(\boldsymbol{r}, t) = \int \boldsymbol{F}_{12}(\boldsymbol{r}_1,\,\boldsymbol{r}_2) f^{(1)}(\boldsymbol{r}_2,\,\boldsymbol{p}_2,\,t)\,d\boldsymbol{r}_2\,d\boldsymbol{p}_2,$$

приходим к бесстолкновительному уравнению Власова

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}+\frac{\boldsymbol{p}_1}{m}\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}_1}+\left[\boldsymbol{X}_1+\tilde{\boldsymbol{F}}\right]\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{p}_1}\right)f^{(1)}=0. \tag{0.1}$$

которое валидно при $nd^3 \gg 1$.

Двухчастичный случай

Для $n=2$:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}+\frac{\boldsymbol{p}_1}{m}\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}_1}+\frac{\boldsymbol{p}_2}{m}\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}_2}+\left[\boldsymbol{X}_1+\boldsymbol{F}_{12}\right]\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{p}_1}+\left[\boldsymbol{X}_2+\boldsymbol{F}_{21}\right]\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{p}_2}\right)f^{(2)}(\xi_1,\xi_2,t)=-\int\left(\boldsymbol{F}_{13}\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{p}_1}+\boldsymbol{F}_{23}\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{p}_2}\right)f^{(3)}\,d\boldsymbol{r}_3\,d\boldsymbol{p}_3$$

Считая $nd^3 \ll 1$, можем игнорировать[1] трёхчастичные столкновения, тогда

$$\left(\frac{\boldsymbol{p}_1}{m}\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}_1}+\frac{\boldsymbol{p}_2}{m}\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}_2}+F_{12}\left[\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{p}_1}-\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{p}_2}\right]\right)f^{(2)}=0.$$

Переходя к координатам, находим

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

Введём $\boldsymbol{r}=\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2$, $\boldsymbol{R}=\frac{1}{2}(\boldsymbol{r}_1+\boldsymbol{r}_2)$, тогда

$$\frac{\partial f^{(2)}}{\partial \boldsymbol{R}} \ll \frac{\partial f^{(2)}}{\partial \boldsymbol{r}}.$$

Возвращаемся к одночастичной функции, интегрируя находим

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

продолжая с правой частью, вводя $\boldsymbol{v}_{\text{отн}}=\frac{\boldsymbol{p}_2}{m}-\frac{\boldsymbol{p}_1}{m}$ находим

$$\int dp_2\,d^2\sigma\,dz\boldsymbol{v}_{\text{отн}}\left(f^{(2)}(t_+)-f^{(2)}(t_-)\right).$$

После столкновения меняются импульсы частиц, тогда правую часть можем переписать в виде

$$\int d\boldsymbol{p}_2\,d^2\sigma\boldsymbol{v}_{\text{отн}}\left(f^{(1)}(\boldsymbol{p}_2',\boldsymbol{r},t)f^{(1)}(\boldsymbol{p}_1',\boldsymbol{r},t)-f^{(1)}(\boldsymbol{p}_2,\boldsymbol{r},t)f^{(1)}(\boldsymbol{p}_1,\boldsymbol{r},t)\right),\quad \text{– интеграл столкновений.} \tag{0.2}$$

Формально есть частицы прилетевшие и улетевшие. К слову, $d\boldsymbol{p}_1\,d\boldsymbol{p}_2=\,d\boldsymbol{p}_1'\,d\boldsymbol{p}_2'$.

Формула 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, находим

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

[1] Также будем считать, что $\boldsymbol{X}_i$ меняются слабо.

где мы проинтегрировали по частям. Таким образом приходим к выражению для проводимости Друде
$$j_i = \frac{n_{\mathrm{eq}} e^2 \tau}{m} E_i = \sigma_{\mathrm{D}} E_i, \qquad \sigma_{\mathrm{D}} = \frac{n_{\mathrm{eq}} e^2}{m} \tau.$$

Переменное поле. Пусть теперь $E_i = E_i(t)$, тогда
$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + eE_i(t) \frac{\partial}{\partial p_i} \right) f(p,t) = -\frac{f(p,t) - f_{\mathrm{eq}}(p)}{\tau}.$$
Переходя к линейному отклику, находим
$$\frac{\partial}{\partial t} \delta f(p,t) + eE_i(t) \frac{\partial}{\partial p_i} f_{\mathrm{eq}}(p,t) = -\frac{\delta f(p,t)}{\tau},$$
или переходя к Фурье $\delta f(t) = \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} \delta f(\omega)$, находим
$$-i\omega\, \delta f(p,\omega) + eE_i(\omega) \frac{\partial}{\partial p_i} f_{\mathrm{eq}}(p) = -\frac{\delta f(p,\omega)}{\tau},$$
тогда Фурье-образ поправки функции распределения будет равен
$$\delta f(p,\omega) = -\frac{eE_i(\omega)}{1 - i\omega\tau} \frac{\partial f_{\mathrm{eq}}(p)}{\partial p_i} \tau.$$
Подставляя в выражение для тока j, получим
$$j_i(\omega) = \frac{\sigma_{\mathrm{D}}}{1 - i\omega\tau} E_i(\omega) = \sigma(\omega) E_i(\omega),$$
с полюсом в нижней полуплоскости – причинная функция Грина! Собственно, после обратного Фурье, находим
$$j_i = \int_{-\infty}^{t} \sigma(t - t') E_i(t)\, dt', \quad \Rightarrow \quad \sigma(t) = \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} \frac{\sigma_{\mathrm{D}}}{1 - i\omega\tau} = \sigma_{\mathrm{D}} \cdot \frac{1}{\tau} e^{-t/\tau} \theta(t).$$