

ЗАДАНИЕ ПО КУРСУ «ФИЗИЧЕСКАЯ КИНЕТИКА»

Автор заметок: Хоружий Кирилл

От: 19 мая 2023 г.

Содержание

1 Кинетическое уравнение Власова	2
1.1 Цепочка уравнений Боголюбова-Борна-Грина-Кирквуда	2
1.2 Уравнение Власова	3
1.3 Интеграл столкновений	4
2 x Колебания в плазме	4
3 Кондактанс	6
3.1 Общая идея	6
3.2 Подход Ландауэра	6
3.3 Поток тепла	7
4 Упругое рассеяние электронов на примесях	7
5 Рассеяние электронов на фононах	8
6 Электроны в магнитном поле	10
7 Модель диффузии Лоренца	12
8 Электронный газ	13
9 Уравнения Навье-Стокса	14
10 Холловская проводимость	16
12 Тяжелая частица в лёгком газе	17
14 x Броуновское движение	18
14.1 Среднеквадратичное отклонение	19
15 модель Калдейры-Леггетта	20
16 Уравнение Линдблада	21
17 Уравнение Смолуховского	22
17.1 Сведение к осцилятору	22
17.2 Забываются начальные условия	22
18 Метастабильное состояние	23
18.1 Цепочка уравнений Боголюбова-Борна-Грина-Кирквуда	23
18.2 Уравнение Власова	24
18.3 Интеграл столкновений	24
20 Упражнения	24
20.1 У1	24
20.2 У2	25

Проводимость Друде

Общезначимое 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

$$v = \frac{e\tau}{m}E, \quad j = env = \frac{ne^2}{m}\tau E, \quad \Rightarrow \quad \sigma_D = \frac{ne^2}{m}\tau.$$

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

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

Рассматривая однородную стационарную задачу приходим к уравнению, вида

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

где $\delta f = f - f_{eq}$, 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

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

и подставляя это в выражение для j , находим

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

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

$$j_i = \frac{n_{eq} e^2 \tau}{m} E_i = \sigma_D E_i, \quad \sigma_D = \frac{n_{eq} e^2}{m} \tau.$$

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

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

Переходя к линейному отклику, находим

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

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

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

тогда Фурье-образ поправки функции распределения будет равен

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

Подставляя в выражение для тока j , получим

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

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

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

1 Кинетическое уравнение Власова

1.1 Цепочка уравнений Боголюбова-Борна-Грина-Кирквуда

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

$$\dot{\mathbf{r}}_i = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}_i}, \quad \dot{\mathbf{p}}_i = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}_i},$$

где Гамильтониан запишется в виде

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

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

Закон сохранения. Закон сохранения в дифференциальном виде запишется в виде

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div } \mathbf{j} = 0,$$

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

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

при подстановке уравнений Гамильтона.

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

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

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

Работаем в приближение потенциального внешнего поля

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

Тогда сохранение переписывается в виде

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

При редуцировании в силу ограниченности в фазовом пространстве, остаётся

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

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

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

Так приходим к выражению, вида

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \sum_{i=1}^n \frac{\mathbf{p}_i}{m} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} + \sum_{i=1}^n \left[\mathbf{X}_i + \sum_{j=1}^n \mathbf{F}_{ij} \right] \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_i} \right) f^{(n)} = - \sum_{i=1}^n \int \mathbf{F}_{i,n+1} \frac{\partial f^{(n+1)}}{\partial \mathbf{p}_i} d\mathbf{r}_{n+1} d\mathbf{p}_{n+1}. \quad (1.1)$$

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

1.2 Уравнение Власова

Для $n = 1$ уравнение сведётся к

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

В силу отсутствия корреляций между столкновениями попробуем сделать приближение

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

Определяя

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

приходим к бесстолкновительному уравнению Власова

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}_1}{m} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_1} + [\mathbf{X}_1 + \tilde{\mathbf{F}}] \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1} \right) f^{(1)} = 0. \quad (1.2)$$

которое валидно при $nd^3 \gg 1$.

1.3 Интеграл столкновений

Для $n = 2$:

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

Считая $nd^3 \ll 1$, можем игнорировать¹ трёхчастичные столкновения, тогда

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

Переходя к координатам, находим

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

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

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

Возвращаемся к одночастичной функции, интегрируя находим

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

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

$$\int d\mathbf{p}_2 d^2\sigma dz \mathbf{v}_{\text{отн}} \left(f^{(2)}(t_+) - f^{(2)}(t_-) \right).$$

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

$$\int d\mathbf{p}_2 d^2\sigma \mathbf{v}_{\text{отн}} \left(f^{(1)}(\mathbf{p}'_2, \mathbf{r}, t) f^{(1)}(\mathbf{p}'_1, \mathbf{r}, t) - f^{(1)}(\mathbf{p}_2, \mathbf{r}, t) f^{(1)}(\mathbf{p}_1, \mathbf{r}, t) \right), \quad - \text{интеграл столкновений.} \quad (1.3)$$

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

2 x Колебания в плазме

Рассмотрим частицы в силе Лоренца

$$\hat{F} = q \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} [\mathbf{v} \times \mathbf{B}] \right).$$

Запишем

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} - e \left[\mathbf{E} + \frac{1}{c} [\mathbf{v} \times \mathbf{B}] \right] \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \right) f = 0.$$

Учтём, что $M \gg m$, тогда $f_i = f_{io}$ и $f = f_0 + \delta f$. В линейном отклике

$$\rho = -e \int \delta f d\Gamma, \quad \mathbf{j} = -e \int \mathbf{v} \delta f d\Gamma,$$

где уже учли отсутствие вклада равновесных слагаемых. Равновесная функция распределения $f_0 = f_0(\varepsilon(\mathbf{p}))$, подставляя, находим

$$\frac{\partial \delta f}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial \delta f}{\partial \mathbf{r}} - e \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} [\mathbf{v} \times \mathbf{B}] \right) \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{p}} = 0, \quad \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{p}} = \mathbf{v} \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}.$$

Итого остаётся

$$\frac{\partial \delta f}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial \delta f}{\partial \mathbf{r}} = e(\mathbf{v} \cdot \mathbf{E}) \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} - \frac{\delta f}{\tau},$$

где добавление $-\frac{\delta f}{\tau}$ приводит к причинности дальнейшего выражения $+i\delta = +i/\tau$.

Рассмотрим $\mathbf{E} = E_{k,\omega} e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)}$, и тогда $\delta f = \delta f_{k,\omega} e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)}$, подставляя находим

$$(\omega - \mathbf{k}\mathbf{v}) \delta f_{k\omega} = ie(\mathbf{v} \cdot \mathbf{E}_{k\omega}) \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon},$$

и выражение на Фурье образ первой поправки

$$\delta f_{k\omega}(\mathbf{p}) = \frac{ie(\mathbf{v} \cdot \mathbf{E}_{k,\omega})}{\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v} + i\delta} \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}.$$

¹Также будем считать, что \mathbf{X}_i меняются слабо.

Вспомним, что $\mathbf{D} = \mathbf{E} + 4\pi\mathbf{P}$, тогда

$$-e \int \frac{ie\mathbf{v}(\mathbf{v} \cdot \mathbf{E}_{k\omega})}{\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v} + i\delta} \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} d\Gamma = j_{k\omega} = -i\omega P_{k\omega},$$

откуда находим поляризацию

$$P_{\alpha,k\omega} = \frac{e^2}{\omega} E_{\beta} \int \frac{v_{\alpha}v_{\beta}}{\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}} \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} d\Gamma = \chi_{\alpha\beta} E_{\beta}.$$

Для трёхмерного случая итог находим

$$D_{\alpha} = E_{\alpha} + 4\pi P_{\alpha} = \varepsilon_{\alpha\beta} E_{\beta}, \quad \Rightarrow \quad \varepsilon_{\alpha\beta}(\omega, \mathbf{k}) = \delta_{\alpha\beta} + \frac{4\pi e^2}{\omega} \int \frac{v_{\alpha}v_{\beta}}{\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}} \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} d\Gamma.$$

Перейдём к переменным $\hat{\mathbf{v}} = \mathbf{v}/v$, $\hat{\mathbf{k}} = \mathbf{k}/k$, переписываем интеграл в виде

$$\varepsilon_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta} + \frac{4\pi e^2}{\omega^2} \int d\Gamma s v^2 \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \int \frac{d\Omega}{4\pi} \frac{\hat{v}_{\alpha}\hat{v}_{\beta}}{s - \hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{v}} + i\delta}$$

где $s = \omega/kv$. Итого усредняя находим²

$$\int \frac{d\Omega}{4\pi} \frac{\hat{v}_{\alpha}\hat{v}_{\beta}}{s - \hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{v}} + i\delta} = A(s)\delta_{\alpha\beta} + B(s)\hat{k}_{\alpha}\hat{k}_{\beta}f,$$

Итого находим выражение в виде

$$\varepsilon_{\alpha\beta}(\omega, \mathbf{k}) = \varepsilon_l \frac{k_{\alpha}k_{\beta}}{k^2} + \varepsilon_t \left(\delta_{\alpha\beta} - \frac{k_{\alpha}k_{\beta}}{k^2} \right).$$

Считая $\mathbf{E} = \mathbf{E}_e + \mathbf{E}_t$, где $\mathbf{E}_l = (\mathbf{E} \cdot \mathbf{k})\mathbf{k}/k^2$ и $\mathbf{E}_t = \mathbf{E} - \mathbf{E}_l$, найдём

$$D_{\alpha} = \varepsilon_{\alpha\beta} E_{\beta} = D_{l\alpha} + D_{t\alpha}, \quad D_{l\alpha} = \varepsilon_l E_{l\alpha}, \quad D_{t\alpha} = \varepsilon_t D_{t\alpha}.$$

Рассмотрим теперь только $\mathbf{E}_l \propto \mathbf{k}$, тогда

$$\text{rot } \mathbf{E} = i[\mathbf{k} \times \mathbf{E}_l] = 0 = -\frac{i\omega}{c} \mathbf{B}, \quad \Rightarrow \quad \text{rot } \mathbf{B} = 0 = \frac{i\omega}{c} \mathbf{D}, \quad \Rightarrow \quad \mathbf{D}_l = 0.$$

Таким образом $\varepsilon_l(\omega, \mathbf{k}) = 0$ задаёт дисперсию продольных плазменных колебаний. Для поперечных плазменных колебаний уравнение примет вид

$$k^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon_t(\omega, \mathbf{k}).$$

2D

Специфично для двухмерного случая

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{F} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \right) f = 0,$$

поле и поправка

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_{k\omega} e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)}, \quad \delta f_{\mathbf{k},\omega} = \frac{ie(\mathbf{v} \cdot \mathbf{E}_{k\omega}(z=0))}{\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v} + i\delta} \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}.$$

Рассмотрим выражение для ρ , которая имеет принципиально двухмерный характер

$$\rho_{\omega\mathbf{k}} = -ie^2 \int \frac{ie(\mathbf{v} \cdot \mathbf{E}_{k\omega}(z=0))}{\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v} + i\delta} \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} d\Gamma.$$

Отдельно найдём

$$I(\omega, \mathbf{k}) = \int \frac{\mathbf{v}}{\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v} + i\delta} \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} d\Gamma = \frac{\mathbf{k}}{k^2} \int \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} A(s) d\Gamma, \quad A(s) = \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{2\pi} \frac{\cos \varphi - s + s}{s - \cos \varphi + i\delta}.$$

Сделаем замену

$$x = \text{tg } \frac{\varphi}{2}, \quad d\varphi = \frac{2dx}{1+x^2}, \quad \Rightarrow \quad A(s) = \begin{cases} -1 + \frac{s}{\sqrt{s^2-1}}, & s > 1 \\ -1 - \frac{is}{\sqrt{1-s^2}}, & s < 1. \end{cases}$$

где мнимая часть связана с затуханием Ландау. Подставляя в плотность

$$\rho_{\omega\mathbf{k}} = -\frac{ie^2}{k^2} (\mathbf{k} \cdot \mathbf{E}_{\omega\mathbf{k}}) \int \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} A(s) d\Gamma.$$

Расписывая уравнения Максвелла

$$\frac{\partial E_x}{\partial x} + \frac{\partial E_y}{\partial y} + \frac{\partial E_z}{\partial z} = 4\pi\rho(x, y)\delta(z), \quad \mathbf{E} = -\nabla\varphi, \quad \varphi = \varphi_{k\omega}(z)e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)}.$$

²см. Бурмистров, считается $A(s)$, $B(s)$.

3 Кондактанс

3.1 Общая идея

Рассмотрим два куска металла между которыми существует 1D идеальный провод. Химпотенциалы соответственно равны

$$\mu_L = \mu + \frac{1}{2}eV, \quad \mu_R = \mu - \frac{1}{2}eV,$$

ток можем найти как $I = I_R - I_L$:

$$I = \sum_{k>0} ev_k (f_R(\varepsilon_k) - f_L(\varepsilon_k)),$$

где $f_{R,L}(\varepsilon_k) = f(\varepsilon_k - \mu_{R,L})$ – числа заполнения. Подставляя в выражение для тока, находим

$$I = - \sum_{k>0} ev_k \frac{\partial f}{\partial \varepsilon_k} (\delta\mu_L - \delta\mu_R) = -e^2 V \int_{k>0} \frac{dk}{2\pi} \frac{\partial \varepsilon_k}{\partial \hbar k} \frac{\partial f}{\partial \varepsilon_k} = -\frac{e^2}{2\pi} V \int_0^\infty d\varepsilon \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} = \frac{e^2}{2\pi\hbar} V.$$

где сделали подстановку $v_k = \partial \varepsilon_k / \partial \hbar k$, числа заполнения равны $f(\varepsilon = 0) = 1$ и $f(\varepsilon = \infty) = 0$ соответственно. Таким образом находим квант проводимости

$$G = \frac{I}{V} = \frac{e^2}{2\pi\hbar}.$$

Если скажем, что электроны отражаются с коэффициентом $|t_i|^2$ и всего всего есть N одномерных каналов, получим *формулу Ландауэра*

$$G = \frac{e^2}{2\pi\hbar} \sum_{i=1}^N |t_i|^2.$$

3.2 Подход Ландауэра

Рассмотрим точечный контакт двух проводников. Пусть хим. потенциал резервуаров μ_1 и μ_2 , функция распределения при температуре Θ

$$f_\alpha(E) = \left(e^{(E-\mu_\alpha)/\Theta} + 1 \right)^{-1}, \quad \alpha = 1, 2.$$

Будем считать систему двухмерной, ось x вдоль течения тока, тогда уравнение Шрёдингера на стационарные волновые функции имеет вид

$$\hat{H}\psi = E\psi, \quad \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}(\partial_x^2 + \partial_y^2) + U(x, y).$$

Считаем, что расстояние между стенками меняется как $W(x)$, тогда для $W = \text{const}$ можем явно найти $\psi(x, y) = \varphi(x)\varphi(y)$ и

$$\varphi_n(y) = \sqrt{\frac{2}{W}} \sin \left(\pi n \left(\frac{y}{W} + \frac{1}{2} \right) \right),$$

для которых верно, что

$$-\left(\frac{\hbar^2}{2m} \partial_y^2 + E \right) \varphi(y) = -\tilde{E} \varphi(y), \quad \tilde{E} = E - U_n, \quad U_n = \frac{(\pi n \hbar)^2}{2mW^2}.$$

Для адиабатического приближения можем подставить $W = W(x)$. Таким образом эффективный потенциал имеет вид потенциального барьера высоты $E_n = (\pi n \hbar)^2 / (2mW_0^2)$, где $W_0 = \min W(x)$.

Введём вероятности отражения и прохождения R_{nm} и T_{nm} из канала m в канал n , тогда

$$I = 2 \sum_{n,m} \int_0^\infty \frac{dE}{2\pi\hbar v_n} ev_n (f_1(E)(\delta_{nm} - R_{nm}) - f_2(E)T_{nm}).$$

Для линейного кондактанса $G = dI/dV$ при $V \rightarrow 0$, пределе нулевой температуры $\mu_1 = E_F$, $\mu_2 = E_F - eV$ и $f(E) = \theta(\mu - E)$ найдём

$$G = 2 \sum_{n,m} \int_0^\infty \frac{e^2 dE}{2\pi\hbar} \delta(E_F - eV - E) T_{nm}(E) = \frac{e^2}{\pi\hbar} \sum_{n,m} T_{nm}(E_F).$$

Появился $G_q = e^2/(\pi\hbar)$ – квантовый кондактанс.

3.3 Поток тепла

Запишем в линейном приближение ток и поток тепла I_Q

$$I = \frac{2e}{h} \int_0^\infty (f_1(E) - f_2(E)) T(E) dE = GV + L \delta\Theta, \quad I_Q = \frac{2}{h} \int_0^\infty (f_1(E) - f_2(E)) (E - \mu) T(E) dE = L'V + K \delta\Theta, \quad \delta\Theta = \Theta_1 - \Theta_2$$

где ввели кинетические коэффициенты G , L , L' и K .

Раскладываясь по температуре, находим

$$I_Q / \delta\Theta = K \approx \frac{G}{e^2} \int_0^\infty \frac{\partial f(E)}{\partial \Theta} (E - \mu) dE = \frac{\pi^2}{3} \frac{G\Theta}{e^2}.$$

По сути это закон Видемана-Франца в применении к точечному контакту.

Аналогично находим $L' = L\Theta$, что является проявлением принципа симметрии кинетических коэффициентов Онсагера. И, наконец, для L :

$$L = G \frac{\pi^2}{3} \frac{\Theta}{e} \frac{\partial \ln T}{\partial E}.$$

4 Упругое рассеяние электронов на примесях

Рассеяние электронов на примесях

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} + \dot{\mathbf{k}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} \right) f = I_{\mathbf{k}} = -\frac{\delta f}{\tau}.$$

В данном случае для линеаризованного кинетического уравнения τ -приближение является точным, где $\delta f = f_k - f_0$.

Поработаем с самим интегралом столкновений

$$I_{\mathbf{k}} = \frac{2\pi}{h} \sum_{\mathbf{k}'} (|\langle \mathbf{k}' | U_{\text{пол}} | \mathbf{k} \rangle|^2 \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'})) [f_{\mathbf{k}'}(1 - f_{\mathbf{k}}) - f_{\mathbf{k}}(1 - f_{\mathbf{k}'})],$$

где $f_{\mathbf{k}'}(1 - f_{\mathbf{k}}) - f_{\mathbf{k}}(1 - f_{\mathbf{k}'}) = f_{\mathbf{k}'} - f_{\mathbf{k}}$. Для матричного элемента

$$U_{\text{пол}}(\mathbf{r}) = \sum_{j=1}^N U(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j), \quad \langle \mathbf{k} | = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}.$$

Тогда для матричного элемента находим

$$|\langle \mathbf{k}' | U_{\text{пол}} | \mathbf{k} \rangle|^2 = \frac{1}{V^2} |\tilde{U}(\mathbf{k} - \mathbf{k}')|^2 \cdot \left| \sum_{j=1}^N e^{i(\mathbf{k} - \mathbf{k}')\mathbf{R}_j} \right|^2, \quad \tilde{U}(\mathbf{q}) = \int e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} U(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r}.$$

Усредняя по случайному положению примесей

$$\left\langle \left| \sum_{j=1}^N e^{i(\mathbf{k} - \mathbf{k}')\mathbf{R}_j} \right|^2 \right\rangle_{\text{прим}} = N + N(N-1)\delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}.$$

Для матричного элемента получили выражение

$$|\langle \mathbf{k}' | U_{\text{пол}} | \mathbf{k} \rangle|^2 = \frac{N}{V^2} |\tilde{U}(\mathbf{q})|^2 + \frac{N(N-1)}{V^2} |\tilde{U}(0)|^2 \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}, \quad \mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}'.$$

Итого для интеграла столкновений получаем выражение после замены $\sum_{\mathbf{k}} \rightarrow \int \frac{V d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3}$

$$I_{\mathbf{k}}(f) = \frac{2\pi n}{h} \int \frac{d^3\mathbf{k}'}{(2\pi)^3} |\tilde{U}(\mathbf{q})|^2 \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'})) \cdot (\delta f_{\mathbf{k}'} - \delta f_{\mathbf{k}}),$$

где уже линеаризовали выражение. Здесь n – примесное.

Рассмотрим стационарный однородный случай, когда $\hbar \dot{\mathbf{k}} = -e\mathbf{E}$, где поле считаем малой поправкой, тогда

$$\dot{\mathbf{k}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} = -e\mathbf{E} \cdot \mathbf{v} \frac{\partial}{\partial \varepsilon}, \quad \delta f_{\mathbf{k}} \stackrel{\text{def}}{=} \tau(\varepsilon) (e\mathbf{E} \cdot \mathbf{v}_{\mathbf{k}}) \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon},$$

то есть ищем решение в τ -приближение. Получается уравнение

$$-(\mathbf{E} \cdot \mathbf{v}) \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} = I_{\mathbf{k}} = \frac{2\pi n}{h} e\mathbf{E} \int \frac{d^3\mathbf{k}'}{(2\pi)^3} |\tilde{U}(\mathbf{q})|^2 \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'}) \left(\tau(\varepsilon') \mathbf{v}' \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \Big|_{\varepsilon'} - \tau(\varepsilon) \mathbf{v} \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \Big|_{\varepsilon} \right).$$

Сокращая $\partial_{\varepsilon} f_0$ и всё лишнее, находим

$$\mathbf{v} = \frac{\hbar \mathbf{k}}{m} = \frac{n\tau(\varepsilon[\mathbf{k}])}{4\pi^2 \hbar} \int_0^\infty dk' (k')^2 \int d\Omega_{\mathbf{k}'} |\tilde{U}(\mathbf{q})|^2 \cdot \frac{\delta(k - k')}{\hbar^2 k/m} \frac{\hbar}{m} (\mathbf{k} - \mathbf{k}').$$

Остаётся выражение

$$\frac{1}{\tau(\varepsilon)} = \frac{mkn}{4\pi^2\hbar^3} \int d\Omega_k |\tilde{U}(\mathbf{q})|^2 (1 - \hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{k}}'), \quad \hat{\mathbf{k}} = \frac{\mathbf{k}}{k}. \quad (4.1)$$

Дифференциальное сечение рассеяния. Найдём выражение

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right)^2 |\tilde{U}(\mathbf{q})|^2, \quad \mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}', \quad q^2 = 4k^2 \sin^2 \left(\frac{\theta}{2} \right).$$

И интеграл столкновений перепишется в виде

$$\frac{1}{\tau(\varepsilon)} = nv \int \frac{d\sigma}{d\Omega} (1 - \cos \theta) d\Omega = nv\sigma_{\text{tr}}, \quad (4.2)$$

где возникло новое σ_{tr} с подавленным рассеянием на малых углах.

Вспоминая формулу Друде, находим

$$\mathbf{j} = \sigma_D \mathbf{E}, \quad \sigma_D = \frac{e^2 n_0 \tau_{\text{tr}}}{m},$$

где входит именно τ_{tr} .

Фурье-образ. Для экранированного кулоновского потенциала

$$U(r) = -e^{-r/\lambda} \frac{Ze^2}{r}, \quad \tilde{U}(\mathbf{q}) = \int U(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} dV = \frac{4\pi Ze^2}{q^2 + \lambda^{-2}}.$$

Для дифференциального сечения рассеяния находим

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{m^2}{4\pi^2\hbar^2} \left(\frac{4\pi Ze^2}{q^2 + \lambda^{-2}} \right)^2 = \left(\frac{Ze^2}{4E_F \sin^2 \frac{\theta}{2} + (2k_F\lambda)^{-2}} \right)^2.$$

где $q = 2k_F \sin \frac{\theta}{2}$. Полное сечение рассеяния тогда получается

$$\sigma = \int d\sigma = \int_0^\pi \left(\frac{Ze^2}{4E_F \sin^2 \frac{\theta}{2} + (2k_F\lambda)^{-2}} \right)^2 d\Omega = \frac{2\pi Z^2 e^4}{4E_F^2} \int_0^\pi \frac{du}{(u + \frac{1}{2}(k_F\lambda)^{-2})^2},$$

где $u = 1 - \cos \theta$. Итого, введя $\zeta \stackrel{\text{def}}{=} \frac{4}{\pi} (k_F\lambda)^2$, находим

$$\sigma = \frac{\pi Z^2 e^4}{2E_F^2} \frac{(\pi\zeta)^2/2}{1 + \pi\zeta}.$$

Для транспортного σ_{tr} , находим

$$\sigma_{\text{tr}} = \frac{2\pi Z^2 e^4}{4E_F^2} \int_0^2 \frac{u du}{(u + \frac{1}{2}(k_F\lambda)^{-2})^2} = \frac{\pi Z^2 e^4}{2E_F^2} \left(\ln(1 + \pi\zeta) - \frac{\pi\zeta}{1 + \pi\zeta} \right).$$

Для проводимости ρ можем найти

$$\rho = \frac{m}{ne^2\tau_{\text{tr}}} = \frac{mnv_F}{n_0 e^2} \frac{\pi Z^2 e^4}{2E_F^2} \zeta^3 F(\zeta), \quad F(\zeta) = \frac{1}{\zeta^3} \left(\ln(1 + \pi\zeta) - \frac{\pi\zeta}{1 + \pi\zeta} \right).$$

Итого, находим

$$\rho = Z^2 R_q a_B \frac{n}{n_0} F(\zeta) \cdot \left[\frac{e^2}{2\pi\hbar} \frac{me^2}{\hbar^2} \frac{p_F}{e^2} \frac{\pi e^4}{p_F^2/2m^2} \frac{64k_F^6 \lambda^6}{\pi^3} \right] = Z^2 R_q a_B \frac{n}{n_0} F(\zeta). \quad (4.3)$$

где подставили $\lambda^2 = \frac{\pi a_B}{4k_F}$.

5 Рассеяние электронов на фононах

Эффект Иоффе-Регеля. На высоких температурах $r^2 \sim T$ для ионов, тогда

$$\tau = \frac{1}{n_{\text{ion}} v \sigma} \sim \frac{1}{T}, \quad \rho = \frac{m}{ne^2 \tau} \sim T.$$

Для $\tau v_F \sim \lambda_F$, можем записать с учётом $n \sim k_F^3$

$$\rho = \frac{mv_F}{ne^2 \tau v_F} = \frac{mv_F}{ne^2 \lambda_F} \sim \frac{\hbar}{k_F e^2},$$

что называется пределом Иоффе-Регеля, которые неплохо работает для легированных полупроводников.

Испускание фононов. И снова запишем столкновительный интеграл в терминах приход-уход:

$$I_p = \sum_{\mathbf{p}'} w_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} n_{\mathbf{p}'} (1 - n_{\mathbf{p}}) - \sum_{\mathbf{p}'} w_{\mathbf{p}'\mathbf{p}} n_{\mathbf{p}} (1 - n_{\mathbf{p}'}).$$

Рассматриваем однородную ситуацию, тогда

$$\dot{\mathbf{p}} \frac{\partial n}{\partial \mathbf{p}} = -e(\mathbf{E} \cdot \mathbf{v}) \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} = I_{\text{ст}}.$$

Учитывая что $w_q \sim q$, можем расписать

$$I_{\text{ст}} = \frac{2\pi}{\hbar V} \sum_q (w_q(1 + N_q)n_{\mathbf{p}+\hbar\mathbf{q}}(1 - n_{\mathbf{p}})\delta(\varepsilon_p - \varepsilon_{\mathbf{p}+\hbar\mathbf{q}} + \hbar\omega_q) + w_q N_q n_{\mathbf{p}-\hbar\mathbf{q}}(1 - n_{\mathbf{p}})\delta(\varepsilon_p - \varepsilon_{\mathbf{p}-\hbar\mathbf{q}} - \hbar\omega_q)) - \\ - \frac{2\pi}{\hbar V} \sum_q (w_q(1 + N_q)n_q(1 - n_{\mathbf{p}-\hbar\mathbf{q}})\delta(\varepsilon_p - \varepsilon_{\mathbf{p}-\hbar\mathbf{q}} - \hbar\omega_q) + w_q N_q(1 - n_{\mathbf{p}+\hbar\mathbf{q}})\delta(\varepsilon_p - \varepsilon_{\mathbf{p}+\hbar\mathbf{q}} + \hbar\omega_q)).$$

Будем считать, что фононы равновесные

$$N_q = N_q^0 = \frac{1}{e^{\hbar\omega_q/T} - 1}, \quad \Rightarrow \quad \frac{1 + N_q}{N_q} = e^{\hbar\omega_q/T}.$$

Для электронов

$$n_p^0 = \frac{1}{e^{(\varepsilon_p - \mu)/T} + 1}, \quad \Rightarrow \quad \frac{1 - n_p^0}{n_p^0} = e^{(\varepsilon_p - \mu)/T}.$$

Преобразуем выражение из квадратных скобок *

$$(1 + N_q)(1 - n_p)(1 - n_{\mathbf{p}+\hbar\mathbf{q}}) \left(\frac{n_{\mathbf{p}+\hbar\mathbf{q}}}{1 - n_{\mathbf{p}+\hbar\mathbf{q}}} - \frac{N_q}{1 + N_q} \frac{n_p}{1 - n_p} \right), \quad (5.1)$$

которое очевидно зануляется для равновесных функций.

Решение будем искать в виде

$$n_p = n_p^0 + \delta n_p = n_p^0 - \frac{\partial n_p^0}{\partial \varepsilon_p} \Phi_p = n_p^0 + \frac{n^0(\varepsilon_p)(1 - n^0(\varepsilon_p))}{T} \Phi_p.$$

Возвращаясь к (5.1), получаем линеаризуя

$$(1 + N_q)(1 - n_p^0)(1 - n_{\mathbf{p}+\hbar\mathbf{q}}^0) \left[\frac{\delta n_{\mathbf{p}+\hbar\mathbf{q}}}{(1 - n_{\mathbf{p}+\hbar\mathbf{q}}^0)^2} - \frac{N_q}{1 + N_q} \frac{\delta n_p}{(1 - n_p^0)^2} \right] = \\ = + \frac{1}{T} (1 + N_q)(1 - n_p^0)n_{\mathbf{p}+\hbar\mathbf{q}}^0 [\Phi_{\mathbf{p}+\hbar\mathbf{q}} - \Phi_p] = \\ = - \frac{1}{T} (1 + N_q)N_q(n_{\mathbf{p}+\hbar\mathbf{q}}^0 - n_p^0) [\Phi_{\mathbf{p}+\hbar\mathbf{q}} - \Phi_p].$$

Аналогично преобразуется второе слагаемое в *, откуда находим линеаризованный интеграл столкновений:

$$I_{\text{ст}}(\Phi_p) = - \frac{2\pi}{\hbar V} \sum_q w_q \frac{(1 + N_q)N_q(n_{\mathbf{p}+\hbar\mathbf{q}}^0 - n_p^0)}{T} [\Phi_{\mathbf{p}+\hbar\mathbf{q}} - \Phi_p] \times [\delta(\varepsilon_p - \varepsilon_{\mathbf{p}+\hbar\mathbf{q}} + \hbar\omega_q) - \delta(\varepsilon_p - \varepsilon_{\mathbf{p}+\hbar\mathbf{q}} - \hbar\omega_q)]$$

Выделим физ. смысл в слагаемых

$$I_{\text{ст}}(\Phi_p) = - \frac{2\pi}{\hbar V} \sum_q w_q \frac{(1 + N_q)N_q}{T} \left([n^0(\varepsilon_p + \hbar\omega_q) - n^0(\varepsilon_p)] \delta(\varepsilon_p - \varepsilon_{\mathbf{p}+\hbar\mathbf{q}} + \hbar\omega_q) - \right. \\ \left. - [n^0(\varepsilon_p - \hbar\omega_q) - n^0(\varepsilon_p)] \delta(\varepsilon_p - \varepsilon_{\mathbf{p}+\hbar\mathbf{q}} - \hbar\omega_q) \right) [\Phi_{\mathbf{p}+\hbar\mathbf{q}} - \Phi_p].$$

Учтём, что мы живём вблизи поверхности Ферми, тогда $\hbar\omega_q$ мало по сравнению с ε_p , приходим к выражению

$$I_{\text{ст}}(\Phi_p) = - \frac{\partial n^0}{\partial \varepsilon} \frac{2\pi}{\hbar V} \sum_q w_q \frac{2\hbar\omega_q(1 + N_q)N_q}{T} \delta(\varepsilon_{\mathbf{p}+\hbar\mathbf{q}} - \varepsilon_p) [\Phi_{\mathbf{p}+\hbar\mathbf{q}} - \Phi_p].$$

Аргумент δ -функции можем расписать в виде

$$\varepsilon_p - \varepsilon_{\mathbf{p}+\hbar\mathbf{q}} \pm \hbar\omega_q = \frac{2p\hbar q \cos \theta}{2m} + \frac{\hbar^2 q^2}{2m} \pm \hbar c_L q = \frac{\hbar p q}{m} \left(\cos \theta + \frac{\hbar q}{2p} \pm \frac{m c_L}{p} \right),$$

где $c_L \ll v_F$, поэтому можем опустить последнее слагаемое.

Кинетическое уравнение. Итого, будем решать кинетическое уравнение на Φ_p вида

$$-e(\mathbf{E} \cdot \mathbf{v}) \frac{\partial n^0}{\partial \varepsilon} = I_{\text{ст}}(\Phi_p) = - \frac{\partial n^0}{\partial \varepsilon} \frac{2\pi}{\hbar V} \sum_q w_q \frac{2\hbar\omega_q(1 + N_q)N_q}{T} \delta(\varepsilon_{\mathbf{p}+\hbar\mathbf{q}} - \varepsilon_p) [\Phi_{\mathbf{p}+\hbar\mathbf{q}} - \Phi_p]. \quad (5.2)$$

Решение аналогично будем искать в виде $\Phi_p = -e(\mathbf{E} \cdot \mathbf{v})\tau_{\text{tr}}(\varepsilon_p)$, что соответствует τ -приближению: $I_{\text{ст}} = -\delta n_p/\tau$. Таким образом остаётся найти τ_{tr} , и найти остальные величины по формуле Друде. Выражая из двух уравнений

$(\mathbf{E} \cdot \mathbf{v})$, находим

$$(\mathbf{E} \cdot \mathbf{v}) = -\frac{4\pi}{\hbar V} \sum_{\mathbf{q}} w_{\mathbf{q}} \frac{\hbar \omega_{\mathbf{q}} (1 + N_{\mathbf{q}}) N_{\mathbf{q}}}{T} \delta(\varepsilon_{\mathbf{p}+\hbar \mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{p}}) \frac{\hbar(\mathbf{q} \cdot \mathbf{E})}{m} \tau_{\text{tr}}(\varepsilon_p).$$

Переходя к интегрированию, нахоим

$$(\mathbf{E} \cdot \mathbf{v}) = -\frac{4\pi}{\hbar} \int \frac{q^2 dq d\Omega_{\mathbf{q}}}{(2\pi)^3} w_{\mathbf{q}} \frac{\hbar \omega_{\mathbf{q}} (1 + N_{\mathbf{q}}) N_{\mathbf{q}}}{T} \delta(\varepsilon_{\mathbf{p}+\hbar \mathbf{q}} - \varepsilon_p) \frac{\hbar(\mathbf{q} \cdot \mathbf{E})}{m} \tau_{\text{tr}}(\varepsilon_p).$$

Проведём интегрирование, введя полярную ось и расписав

$$\begin{aligned} \mathbf{q} &= (q \sin \theta \cos \varphi, q \sin \theta \sin \varphi, q \cos \theta), \\ \mathbf{E} &= (E \sin \theta_E \cos \varphi_E, E \sin \theta_E \sin \varphi_E, E \cos \theta_E). \end{aligned}$$

Тогда скалярное произведение перепишется в виде

$$(\mathbf{q} \cdot \mathbf{E}) = qE (\cos \theta \cos \theta_E + \sin \theta \sin \theta_E \cos(\varphi - \varphi_E)),$$

где после интегрирование второе слагаемое зануляется. Также подставляя $(\mathbf{E} \cdot \mathbf{v}) = Ev \cos \theta_E$, тогда

$$\frac{p}{m \tau_{\text{tr}}(\varepsilon_p)} = -\frac{4\pi}{T} \int_0^{q_D} \frac{q^2 dq \sin \theta d\theta}{(2\pi)^2} w_{\mathbf{q}} \omega_{\mathbf{q}} (1 + N_{\mathbf{q}}) N_{\mathbf{q}} \times \delta\left(\frac{\hbar q p}{m} \left(\cos \theta + \frac{\hbar q}{2p}\right)\right) \times \frac{\hbar q}{m} \cos \theta,$$

где q_D – максимальный дебаевский импульс. Таким образом

$$\frac{1}{\tau_{\text{tr}}(\varepsilon_p)} = \frac{4\pi m}{T p^2} \int_0^{q_D} \frac{q^2 dq}{(2\pi)^2} w_{\mathbf{q}} \omega_{\mathbf{q}} (1 + N_{\mathbf{q}}) N_{\mathbf{q}} \int_{-1}^1 dx x \times \delta\left(x + \frac{\hbar q}{2p}\right),$$

где ввели $x = \cos \theta$.

Вообще $q_D = \sqrt[3]{6\pi^2 n}$, $p_F = \sqrt[3]{3\pi^2 n}$, тогда $\frac{\hbar q_D}{2p_F} < 1$. Учитывая, что $w_{\mathbf{q}} \propto \omega_{\mathbf{q}} \propto q$, находим

$$\frac{1}{\tau_{\text{tr}}(\varepsilon_p)} \propto \frac{1}{T} \int_0^{q_D} q^5 dq \frac{e^{\hbar \omega_{\mathbf{q}}/T}}{(e^{\hbar \omega_{\mathbf{q}}/T} - 1)^2}.$$

Введём $z = \frac{\hbar \omega_{\mathbf{q}}}{T} = \frac{T_D}{T} \frac{q}{q_D}$, где $T_D = \hbar c_L q_D$. Таким образом

$$\frac{1}{\tau_{\text{tr}}(\varepsilon_p)} \propto \frac{1}{T} \left(\frac{T}{T_D}\right)^6 \int_0^{T_D/T} \frac{e^z z^5 dz}{(e^z - 1)^2},$$

где из-за разности скоростей возникла пятая степень вместо четвертой. Итого, искомое выражение

$$\frac{1}{\tau_{\text{tr}}(\varepsilon_p)} \propto \left(\frac{T}{T_D}\right)^5 \int_0^{T_D/T} \frac{z^5 dz}{\text{sh}^2 \frac{z}{2}}. \quad (5.3)$$

Формула Друде. Вспоминая, что

$$\sigma = \sigma_D = \frac{e^2 n \tau_{\text{tr}}}{m},$$

находим

$$\frac{\rho_{\text{e-ph}}(T)}{\rho_{\text{e-ph}}(T_D)} = \frac{\sigma_{\text{e-ph}}(T)}{\sigma_{\text{e-ph}}(T_D)} = \left(\frac{T}{T_D}\right)^5 \int_0^{T_D/T} \frac{z^5 dz}{\text{sh}^2 \frac{z}{2}} \bigg/ \int_0^1 \frac{z^5 dz}{\text{sh}^2 \frac{z}{2}}.$$

Для $T \ll T_D$ получится

$$\frac{\rho_{\text{e-ph}}(T)}{\rho_{\text{e-ph}}(T_D)} = 526 \left(\frac{T}{T_D}\right)^5.$$

И в обратную сторону, для $T \gg T_D$, раскладываясь в ряд, находим

$$\frac{\rho_{\text{e-ph}}(T)}{\rho_{\text{e-ph}}(T_D)} = 1.06 \left(\frac{T}{T_D}\right).$$

6 Электроны в магнитном поле

Запишем энергию в виде

$$\varepsilon(\mathbf{p}) = m_{\alpha\beta}^{-1} \frac{p_{\alpha} p_{\beta}}{2}, \quad m_{\alpha\beta} = m_{\beta\alpha}.$$

Рассмотрим анзац, вида

$$\delta f(\mathbf{p}, t) = \mathbf{p} \cdot \mathbf{A}(\varepsilon) e^{-i\omega t},$$

подставляя в уравнение Больцмана, найдём

$$(\tau^{-1} + i\omega)(p_\mu A_\mu) - \frac{e}{c} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} v_\alpha B_\beta \frac{\partial}{\partial p_\gamma} (p_\mu A_\mu) = e(\mathbf{v} \cdot \mathbf{E}) \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}.$$

Свёртка симметричного тензора с антисимметричным даст 0, тогда

$$(\tau^{-1} - i\omega)m_{\alpha\beta}v_\alpha A_\beta - \frac{e}{c} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} v_\alpha B_\beta A_\gamma = ev_\alpha E_\alpha \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}.$$

Вынося v_α , можем получить выражение

$$\left((\tau^{-1} - i\omega)m_{\alpha\beta} + \frac{e}{c} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} B_\gamma \right) A_\beta - eE_\alpha \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} = 0,$$

что составляет уравнение на величину \mathbf{A} .

Введём тензор

$$\Gamma_{\alpha\beta} = (\tau^{-1} - i\omega)m_{\alpha\beta} + \frac{e}{c} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} B_\gamma, \quad \Rightarrow \quad A_\beta = e\Gamma_{\beta\gamma}^{-1} E_\gamma \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}.$$

Таким образом нашли поправку к функции распределения

$$\delta f(\mathbf{p}) = ev_\alpha m_{\alpha\beta} \Gamma_{\beta\gamma}^{-1} E_\gamma \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon},$$

и, соответственно, можем найти ток

$$j_\alpha = -e \int \frac{2d^3p}{(2\pi\hbar)^3} v_\alpha \delta f = e^2 E_\gamma \int \frac{2(d^3p)}{(2\pi\hbar)^3} v_\alpha v_\nu m_{\nu\beta} \Gamma_{\beta\gamma}^{-1} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right),$$

откуда можем найти тензор проводимости $j_\alpha = \sigma_{\alpha\beta} E_\beta$:

$$\sigma_{\alpha\beta}(\omega, \mathbf{B}) = e^2 \int \frac{2d^3p}{(2\pi\hbar)^3} v_\alpha v_\nu m_{\nu\mu} \Gamma_{\mu\beta}^{-1} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) = e^2 \int \frac{2d^3p}{(2\pi\hbar)^3} m_{\alpha\gamma}^{-1} p_\gamma m_{\nu\delta}^{-1} P_\delta m_{\nu\mu} \Gamma_{\mu\beta}^{-1} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right).$$

Свернув тензоры, находим

$$\sigma_{\alpha\beta}(\omega, \mathbf{B}) = e^2 m_{\alpha\gamma}^{-1} \int \frac{2d^3p}{(2\pi\hbar)^3} p_\gamma p_\mu \Gamma_{\mu\beta}^{-1}(\varepsilon) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) = \frac{2}{3} e^2 \int d\varepsilon g(\varepsilon) \varepsilon \cdot \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \Gamma_{\alpha\beta}^{-1}(\varepsilon).$$

где $g(\varepsilon) \sim \sqrt{\varepsilon}$ – плотность состояний. Переходя к плотности электронов, находим

$$\sigma_{\alpha\beta}(\omega, \mathbf{B}) = \frac{2}{3} e^2 n \int d\varepsilon g(\varepsilon) \varepsilon \Gamma_{\alpha\beta}^{-1}(\varepsilon) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) = ne^2 \left\langle \Gamma_{\alpha\beta}^{-1}(\varepsilon) \right\rangle.$$

Для металла усреднение тривиально и с учётом δ -образной производной $\partial_\varepsilon f_0$ при низких температурах просто берём $\tau(\varepsilon_F)$:

$$\rho_{\alpha\beta} = \frac{1}{ne^2} \left[(\tau^{-1} - i\omega)m_{\alpha\beta} + \frac{e}{c} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} B_\gamma \right].$$

Далее считая $m_{\alpha\beta} = m\delta_{\alpha\beta}$, получим

$$\rho_{\alpha\beta} = \frac{m}{ne^2\tau} \begin{pmatrix} 1 - i\omega\tau & \omega_c\tau & 0 \\ -i\omega_c\tau & 1 - i\omega\tau & 0 \\ 0 & 0 & 1 - i\omega\tau \end{pmatrix},$$

и для обратной матрицы $\sigma_{\alpha\beta}$, находим

$$\sigma_{\alpha\beta}(\omega, \mathbf{B}) = \frac{\sigma_D}{(1 - i\omega\tau)^2 + (\omega_c\tau)^2} \begin{pmatrix} 1 - i\omega\tau & -\omega_c\tau & 0 \\ \omega_c\tau & 1 - i\omega\tau & 0 \\ 0 & 0 & \frac{(1 - i\omega\tau)^2 + (\omega_c\tau)^2}{1 - i\omega\tau} \end{pmatrix}, \quad \omega_c = \frac{eB}{mc}.$$

где $\sigma_D = \frac{ne^2\tau}{m}$.

Для тока можем записать

$$j_\alpha(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} j_\alpha(\omega) e^{-i\omega t} \frac{d\omega}{2\pi} = \int_{-\infty}^{+\infty} \sigma_{\alpha\beta}(\omega, \mathbf{B}) E_\beta(\omega) e^{-i\omega t} \frac{d\omega}{2\pi}.$$

Переходя к обратному Фурье-образу для поля, находим

$$j_\alpha(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \sigma_{\alpha\beta}(t - t', \mathbf{B}) E_\beta(t') dt', \quad \sigma_{\alpha\beta}(t - t', \mathbf{B}) = \int_{-\infty}^{+\infty} \sigma_{\alpha\beta}(\omega, \mathbf{B}) e^{-i\omega(t-t')} \frac{d\omega}{2\pi}.$$

Теперь можем явно найти

$$\sigma_{zz}(t, \mathbf{B}) = \theta(t) \sigma_D \frac{e^{-t/\tau}}{\tau}, \quad \sigma_{xx} = \sigma_{yy} = \sigma_D \theta(t) \frac{e^{-t/\tau}}{\tau} \cos(\omega_c t), \quad \sigma_{yx} = -\sigma_{xy} = \sigma_D \theta(t) \frac{e^{-t/\tau}}{\tau} \sin(\omega_c t),$$

где учли, что полюса подинтегрального выражения находятся в нижней полуплоскости:

$$\omega = -\frac{i}{\tau}, \quad \omega = -\frac{i}{\tau} \pm \omega_c.$$

7 Модель диффузии Лоренца

Несохранение числа частиц. В τ -приближении:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} = -\frac{f - f_0}{\tau}, \quad \delta n = \int \delta f d^3 \mathbf{r}, \quad F(\mathbf{v}, t) \stackrel{\text{def}}{=} \int d^3 \mathbf{r} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t).$$

Проинтегрируем уравнение Больцмана по координатам:

$$\frac{\partial F}{\partial t} = -\frac{F - F_0}{\tau},$$

Введя $\delta F(\mathbf{v}, t) = F(\mathbf{v}, t) - F_0(\mathbf{v})$, найдём

$$\delta F(\mathbf{v}, t) = \delta F(\mathbf{v}, 0) e^{-t/\tau},$$

таким образом τ -приближение не сохраняет число частиц, релаксируя к равновесному.

Модификация. Исправим эту проблему следующим образом

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} = \frac{1}{\tau} \left[-f + \int \frac{d\Omega_v}{4\pi} f \right] = \frac{1}{\tau} (Pf - f), \quad Pf = \int \frac{d\Omega_v}{4\pi} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t).$$

что называется моделью Лоренца, случай легкой примеси в тяжелом газе, а именно слабо-ионизированный газ. Здесь Pf – члены прихода. Электроны рассеиваются³ на тяжелых частицах. Забавный факт – тут возникает диффузия, а ещё эта модель имеет точное решение.

Проверка. Аналогично перейдём к функции F , тогда

$$\frac{\partial F}{\partial t} = \frac{1}{t} (PF(v, t) - F(v, t)),$$

тогда, после применения проекции P , находим

$$\frac{\partial(PF)}{\partial t} = \frac{1}{\tau} [P^2 F - PF] = 0, \quad \Rightarrow \quad PF(v, t) = \Phi(v).$$

Так находим, что

$$F(\mathbf{v}, t) = \Phi(v) + [F_0(\mathbf{v}) - \Phi(v)] e^{-t/\tau}.$$

Лаплас. Рассмотрим уравнение

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \nabla \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} = -\frac{1}{\tau} (f - \langle f \rangle).$$

Сделаем преобразование Фурье в пространстве и преобразование Лапласа по времени:

$$\hat{f}(\mathbf{k}, \mathbf{v}, s) = \int_0^\infty e^{-st} dt \int d^3 r e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t).$$

вставить из фото.

Приходим к интегралу

$$\frac{1}{2} \int_{-1}^1 dx \frac{(1 + s\tau) - ivk\tau x}{(i + s\tau)^2 + (vk\tau x)^2} = \frac{1}{vk\tau} \arctg \frac{vk\tau}{1 + s\tau}.$$

Подставляем всё в $P\hat{f}$

$$P\hat{f}(\mathbf{k}, \mathbf{v}, s) = \left[1 - \frac{1}{vk\tau} \arctg \frac{vk\tau}{1 + s\tau} \right] \int \frac{d\Omega_v}{4\pi} \frac{f(\mathbf{k}, \mathbf{v}, t=0)}{s + i\mathbf{k} \cdot \mathbf{v} + \tau^{-1}},$$

находим

$$\hat{f}(\mathbf{k}, \mathbf{v}, s) = \frac{\tau^{-1}}{s + i\mathbf{v} \cdot \mathbf{k} + \tau^{-1}} \left[1 - \frac{1}{vk\tau} \arctg \frac{vk\tau}{1 + s\tau} \right] \int \frac{d\Omega_v}{4\pi} \frac{f(\mathbf{k}, \mathbf{v}, t=0)}{s + i\mathbf{k} \cdot \mathbf{v} + \tau^{-1}} + \frac{f(\mathbf{k}, \mathbf{v}, t=0)}{s + i\mathbf{k} \cdot \mathbf{v} + \tau^{-1}}.$$

Конкретизируем начальные условия:

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t=0) = \delta(\mathbf{r})\delta(\mathbf{v} - \mathbf{v}_0), \quad \Rightarrow \quad f(\mathbf{k}, t=0) = \delta(\mathbf{v} - \mathbf{v}_0).$$

Подставляя в интеграл по телесному углу, находим

$$\int \frac{d\Omega_v}{4\pi} \frac{f(\mathbf{k}, \mathbf{v}, t=0)}{s + i\mathbf{k} \cdot \mathbf{v} + \tau^{-1}} = \int \frac{d\Omega_v}{4\pi} \frac{\delta(\mathbf{v} - \mathbf{v}_0)}{s + i\mathbf{k} \cdot \mathbf{v} + \tau^{-1}} = \frac{1}{s + i\mathbf{k} \cdot \mathbf{v} + \tau^{-1}} \frac{\delta(v - v_0)}{4\pi v_0^2}.$$

³См. ЛЛХ.

Диффузия. Рассматриваем время $t \gg \tau$, тогда малые $s\tau \ll 1$, и можем разложиться

$$1 - \frac{1}{vk\tau} \operatorname{arctg} \frac{vk\tau}{1+s\tau} = 1 - \frac{1}{1+s\tau} + \frac{1}{3} \frac{(vk\tau)^2}{(1+s\tau)^3} \approx s\tau + \frac{1}{3} v^2 k^2 \tau^2 + \dots$$

Подставляя в выражение для \hat{f} , находим

$$\hat{f}(\mathbf{k}, \mathbf{v}, s) = \left(\frac{\tau^{-1}}{s + i\mathbf{v} \cdot \mathbf{k} + \tau^{-1}} \right)^2 \frac{1}{s + \frac{1}{3} v^2 k^2 \tau^2} \frac{\delta(v - v_0)}{4\pi v_0^2} + \frac{\delta(\mathbf{v} - \mathbf{v}_0)}{s + i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_0) + \tau^{-1}}.$$

Смотрим большие времена и большие расстояния, тогда самое большое это τ^{-1} , и можем переписать функцию распределения \hat{f} в виде

$$\hat{f}(\mathbf{k}, \mathbf{v}, s) \approx \frac{1}{s + Dk^2} \frac{\delta(v - v_0)}{4\pi v_0^2}, \quad D = \frac{1}{3} v_0^2 \tau.$$

Возвращаясь к обратному Фурье-образу, находим

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = \int_{s^* - i\infty}^{s^* + i\infty} \frac{e^{st} ds}{2\pi i} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \hat{f}(\mathbf{k}, \mathbf{v}, s).$$

Считая по вычетам, находим

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = \frac{\delta(v - v_0)}{4\pi v_0^2} \left[\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk_x}{2\pi} \exp \left(-Dt \left(k_x - \frac{ix}{2Dt} \right)^2 - \frac{x^2}{4Dt} \right) \right] \left[\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk_y}{2\pi} \dots \right] \left[\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk_z}{2\pi} \dots \right],$$

так приходим к явной диффузии

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = \frac{1}{(4\pi Dt)^{3/2}} \frac{\delta(v - v_0)}{4\pi v_0^2} e^{-r^2/4Dt}, \quad D = \frac{1}{3} v_0^2 \tau. \quad (7.1)$$

8 Электронный газ

И снова смотрим на уравнение Больцмана, ищем решение в виде $f = f_0 + \delta f$, смотрим на τ -приближение, равновесным будет распределение Ферми:

$$f_0 = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon - \mu}{T}} + 1}, \quad \mu = \mu(t, \mathbf{r}), \quad T = T(t, \mathbf{r}).$$

Будем решать уравнение рассматривая стационарный случай

$$\mathbf{v} \cdot \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{r}} - e\mathbf{E} \cdot \mathbf{v} \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} = -\frac{\delta f}{\tau}.$$

Можем переписать

$$\frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{r}} = \frac{\partial f_0}{\partial T} \nabla T + \frac{\partial f_0}{\partial \mu} \nabla \mu = -\frac{\varepsilon - \mu}{T} \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \nabla T - \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \nabla \mu.$$

Тогда, после подстановки, левая часть уравнения может быть найдена в виде

$$\delta f = \tau \left(\frac{\varepsilon - \mu}{T} (\mathbf{v} \cdot \nabla T) + \mathbf{v} \cdot (\nabla \mu + e\mathbf{E}) \right) \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}.$$

Металл. Достаточно рассмотреть $-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \approx \delta(\varepsilon - \varepsilon_F)$. Для тока \mathbf{j} находим

$$\mathbf{j} = -e \int \mathbf{v} (f_0 + \delta f) \frac{2 d^3 p}{(2\pi \hbar)^3} = \frac{e}{3} (\nabla \mu + e\mathbf{E}) \int \tau v^2 \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \frac{2 d^3 p}{(2\pi \hbar)^3} + \frac{e}{3} \frac{\nabla T}{T} \int \tau v^2 (\varepsilon - \mu) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \frac{2 d^3 p}{(2\pi \hbar)^3}.$$

Для плотности потока энергии \mathbf{q}

$$\mathbf{q} = \int \mathbf{v} (\varepsilon - e\varphi) (f_0 + \delta f) \frac{2 d^3 p}{(2\pi \hbar)^3} = -\frac{\mathbf{j}}{e} (\mu - e\varphi) - \dots$$

Введём диссипативную часть \mathbf{q}'

$$\mathbf{q}' = \mathbf{q} + \frac{\mathbf{j}}{e} (\mu - e\varphi).$$

Также определим усреднение в виде

$$\langle F(\varepsilon) \rangle = \frac{m}{3n} \int \frac{2 d^3 p}{(2\pi \hbar)^3} v^2 \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) F(\varepsilon) = \frac{2}{3n} \int_0^\infty \varepsilon \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) F(\varepsilon) g(\varepsilon) d\varepsilon, \quad n = \int_0^\infty \varepsilon \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) g(\varepsilon) d\varepsilon.$$

Тогда уравнение переписывается в виде

$$\mathbf{E} + \frac{\nabla \mu}{e} = \frac{m\mathbf{j}}{ne^2 \langle \tau \rangle} - \frac{\nabla T}{eT} \frac{\langle (\varepsilon - \mu) \tau \rangle}{\langle \tau \rangle} = \frac{\mathbf{j}}{\sigma} + \alpha \nabla T.$$

Тогда для потока энергии

$$\mathbf{q}' = -\frac{\langle(\varepsilon - \mu)\tau\rangle}{e\langle\tau\rangle}\mathbf{j} + \frac{\nabla T}{mT} \frac{n\langle(\varepsilon - \mu)\tau\rangle^2}{\langle\tau\rangle} - \frac{\nabla T}{mT} n\langle(\varepsilon - \mu)^2\tau\rangle = \alpha T\mathbf{j} - \varkappa \nabla T.$$

Где коэффициенты соответственно равны

$$\alpha = -\frac{\langle(\varepsilon - \mu)\tau\rangle}{eT\langle\tau\rangle}, \quad \varkappa = \frac{n\langle\tau\rangle}{mT} \left[\frac{\langle(\varepsilon - \mu)^2\tau\rangle}{\langle\tau\rangle} - \frac{\langle(\varepsilon - \mu)\tau\rangle^2}{\langle\tau\rangle^2} \right], \quad \sigma = \frac{ne^2\langle\tau\rangle}{m}. \quad (8.1)$$

где \varkappa – коэффициент теплопроводности, α – термоэлектрический коэффициент, σ – проводимость.

Полупроводник. Здесь можем написать, что $\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} = -\frac{\partial f_0}{\partial T}$, так как $f_0 \approx e^{(\mu - \varepsilon)/T}$. Тогда усреднение можем переписать в виде

$$\langle F(\varepsilon) \rangle = \frac{m}{3nT} \frac{2d^3p}{(2\pi\hbar)^3} f_0 v^2 F(\varepsilon).$$

Считая, что $\tau(\varepsilon) \propto v^k \propto \varepsilon^{k/2}$ и что $f_0 \propto e^{-\frac{mv^2}{2T}}$, находим

$$\langle v^k \rangle \propto \left(\frac{2T}{m} \right)^{k/2} \Gamma\left(\frac{3+k}{2} \right).$$

Так, например, для α получится

$$\alpha = \frac{1}{e} \left(\frac{\mu}{T} - \frac{\langle \tau v^2 \varepsilon \rangle}{\langle \tau v^2 \rangle} \right) = \frac{1}{e} \left(\frac{\mu}{T} - \frac{\Gamma\left(\frac{1+k}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{3+k}{2}\right)} \right) = \frac{1}{e} \left(\frac{\mu}{T} - \frac{5+k}{2} \right).$$

9 Уравнения Навье-Стокса

Пишем уравнение Больцмана для двухчастичных столкновений

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{F} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = \int d^3p_1 v_{\text{отн}} d\sigma_{pp_1} (f' f'_1 - f f_1).$$

Столкновения упругие: $\mathbf{p} + \mathbf{p}_1 = \mathbf{p}' + \mathbf{p}'_1$. Умножим уравнение на некоторую $\varphi(\mathbf{p})$ и проинтегрируем по импульсам:

$$\int d^3\mathbf{p} \varphi(\mathbf{p}) \dots = \frac{1}{4} \iint d^3\mathbf{p} d^3\mathbf{p}_1 v_{\text{отн}} d\sigma_{pp_1} (f' f'_1 - f f_1) \times (\varphi(\mathbf{p}) + \varphi(\mathbf{p}_1) - \varphi(\mathbf{p}') - \varphi(\mathbf{p}'_1)).$$

Частицы. Можем вспомнить законы сохранения и подставить $\varphi(\mathbf{p}) = \left[1, p_\alpha, \frac{p^2}{2m} \right]$, получим следующее выражение для $\varphi(p) = 1$

$$\frac{1}{n} \int d^3\mathbf{p} \mathbf{v} f = \langle \mathbf{v} \rangle = \mathbf{u}(t, \mathbf{r}), \quad \int d^3\mathbf{p} f = n(t, \mathbf{r}), \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial n}{\partial t} + \text{div}(\mathbf{n}\mathbf{u}) = 0. \quad (9.1)$$

Импульс. Теперь рассмотрим $\varphi(\mathbf{p}) = mv_\alpha$:

$$\frac{\partial}{\partial t} (mn u_\alpha) + \frac{\partial \Pi_{\alpha\beta}}{\partial x_\beta} = n F_\alpha,$$

где ввели тензор потока импульса

$$\begin{aligned} \Pi_{\alpha\beta} &\stackrel{\text{def}}{=} \int d^3\mathbf{p} m v_\alpha v_\beta f = nm \langle v_\alpha v_\beta \rangle = mn u_\alpha u_\beta + mn \langle (v_\alpha - u_\alpha)(v_\beta - u_\beta) \rangle = \\ &= mn u_\alpha u_\beta + mn \langle (v_\alpha - u_\alpha)(v_\beta - u_\beta) - \frac{1}{3} \delta_{\alpha\beta} (\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 \rangle + \frac{1}{3} \delta_{\alpha\beta} mn \langle (\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 \rangle = \\ &= mn u_\alpha u_\beta + P \delta_{\alpha\beta} - \sigma'_{\alpha\beta}, \end{aligned}$$

где ввели для удобства величины тензора вязких напряжений и давления

$$\sigma'_{\alpha\beta} = -mn \langle (v_\alpha - u_\alpha)(v_\beta - u_\beta) - \frac{1}{3} \delta_{\alpha\beta} (\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 \rangle, \quad P = \frac{1}{3} mn \langle (\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 \rangle.$$

Тогда уравнение перепишется в виде

$$\frac{\partial (mn u_\alpha)}{\partial t} + \frac{\partial P}{\partial x_\alpha} + \frac{\partial (mn u_\alpha u_\beta)}{\partial x_\beta} = \frac{\partial \sigma'_{\alpha\beta}}{\partial x_\beta} + n F_\alpha.$$

В силу уравнения непрерывности часть слагаемых сократится, тогда

$$mn \left(\frac{\partial u_\alpha}{\partial t} + u_\beta \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} \right) + \frac{\partial p}{\partial x_\alpha} = \frac{\partial \sigma'_{\alpha\beta}}{\partial x_\beta} + n F_\alpha.$$

Введем плотность $\rho \stackrel{\text{def}}{=} mn$, тогда

$$\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla), \quad \rho \frac{d\mathbf{u}_\alpha}{dt} = \rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right)_\alpha = -\frac{\partial P}{\partial x_\alpha} + \frac{\partial \sigma'_{\alpha\beta}}{\partial x_\beta} + n F_\alpha. \quad (9.2)$$

Энергия. Подставим $\varphi(\mathbf{p}) = \frac{p^2}{2m}$, тогда

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{q} = n(\mathbf{F} \cdot \mathbf{u}), \quad \varepsilon = n \left\langle \frac{m\mathbf{v}^2}{2} \right\rangle, \quad \mathbf{q} = n \left\langle \mathbf{v} \frac{m\mathbf{v}^2}{2} \right\rangle. \quad (9.3)$$

Вообще малостью будем считать $\mathbf{v} - \mathbf{u}$, тогда

$$\varepsilon = \frac{mn}{2} \left(\left\langle (\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 \right\rangle + \mathbf{u}^2 \right) = \frac{3}{2}P + \frac{1}{2}mn\mathbf{u}^2, \quad (9.4)$$

$$q_\alpha = u_\alpha \left(\frac{5}{2}P + \frac{1}{2}nm\mathbf{u}^2 \right) + q'_\alpha - \sigma'_{\alpha\beta}u_\beta, \quad (9.5)$$

где диссипативная часть плотности потока энергии \mathbf{q}' имеет вид

$$q'_\alpha = \frac{mn}{2} \langle (v - u)_\alpha (\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 \rangle.$$

Подставляя и сокращая, находим

$$\frac{3}{2} \frac{\partial P}{\partial t} + \frac{5}{2} P \operatorname{div} \mathbf{u} + \frac{3}{2} u_\alpha \frac{\partial P}{\partial x_\alpha} = \sigma'_{\alpha\beta} \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} - \operatorname{div} \mathbf{q}'.$$

Объединяя в $\frac{d}{dt}$, можем переписать в виде

$$\frac{3}{2} \frac{\partial P}{\partial t} + \frac{5}{2} P \operatorname{div} \mathbf{u} = \sigma'_{\alpha\beta} \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} - \operatorname{div} \mathbf{q}'. \quad (9.6)$$

Температура. Введём для одноатомного газа

$$\frac{3}{2}T = \left\langle \frac{m(\mathbf{v} - \mathbf{u})^2}{2} \right\rangle, \quad \Rightarrow \quad P(t, \mathbf{r}) = n(t, \mathbf{r})T(t, \mathbf{r}).$$

Снова учитывая уравнение непрерывности можем переписать выражение в виде

$$\frac{3n}{2} \frac{dT}{dt} + nT \operatorname{div} \mathbf{u} = \sigma'_{\alpha\beta} \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\alpha} - \operatorname{div} \mathbf{q}', \quad (9.7)$$

что является уравнением на температуру. Три основные уравнения – (9.1), (9.3), (9.7), которые мы получили из уравнения Больцмана. Осталось замкнуть эти уравнения.

τ -приближение. Будем решать систему уравнение в τ -приближение, когда $I_{\text{ст}} = -\frac{f-f_0}{\tau}$. Выбираем функцию f_0 в виде локально равновесного распределения

$$f_0 = \frac{n(t, \mathbf{r})}{(2\pi mT(t, \mathbf{r}))^{3/2}} \exp \left(-\frac{(\mathbf{p} - m\mathbf{u}(t, \mathbf{r}))^2}{2mT(t, \mathbf{r})} \right), \quad \int f_0 d^3\mathbf{p} = n(t, \mathbf{r}).$$

Мы учли, что длина пробега $l \ll L$, характерных размеров системы. Число $\text{Kn} = \frac{l}{L}$ – число Кнудсена, которое и характеризует то что достаточно часто происходят столкновения.

Подставляя в левую часть f_0 , находим поправку

$$\frac{\partial f_0}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{F} \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{p}} = -\frac{\delta f}{\tau}.$$

Верно, что $\sigma'_{\alpha\beta}$ будет зануляться для локально равновесного распределения. После выражения временных производных из бездиссипативных уравнений, получается

$$\delta f = -\tau \frac{f_0}{T} \left((\mathbf{v} \cdot \nabla T) \left(\frac{m(v')^2}{2T} - \frac{5}{2} \right) + \frac{m}{2} v'_\alpha v'_\beta U_{\alpha\beta} \right),$$

где ввели переменные

$$\mathbf{v}' = \mathbf{v} - \mathbf{u}, \quad U_{\alpha\beta} = \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} - \frac{2}{3} \delta_{\alpha\beta} \operatorname{div} \mathbf{u}.$$

Кинетические коэффициенты

Теплопроводность. Главное здесь найти

$$q'_\alpha = \int d^3\mathbf{p} \delta f v'_\alpha \frac{m(v')^2}{2}.$$

Подставляя поправку δf , находим

$$q'_\alpha = -\nabla_\alpha T \int d^3\mathbf{p} \frac{f_0 \tau m}{6T} \left(\frac{m(v')^6}{2T} - \frac{5(v')^4}{2} \right) = -\kappa n_\alpha T,$$

где коэффициент теплопроводности κ равен

$$\kappa = \frac{nm}{6T} \left\langle \tau(v') \left(\frac{m(v')^6}{2T} - \frac{5(v')^4}{2} \right) \right\rangle.$$

Нам понадобятся интегралы, вида

$$\langle (v')^{2n} \rangle = \frac{(T/m)^n}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3\mathbf{x} x^{2n} e^{-x^2/2} = (2n+1)!! \left(\frac{T}{m}\right)^n.$$

Собирая всё вместе, находим

$$\varkappa = \frac{5nT}{2m}\tau, \quad (9.8)$$

где мы считали $\tau = \text{const}$.

Тензор вязких напряжений. Для тензора вязких напряжений

$$\sigma'_{\alpha\beta} = -m \int d^3\mathbf{p} \delta f \left(v'_\alpha v'_\beta - \frac{\delta_{\alpha\beta}}{3} (v')^2 \right) = \frac{nm^2}{2T} U_{\mu\nu} \left\langle \tau(v') v'_\mu v'_\nu \left(v'_\alpha v'_\beta - \frac{\delta_{\alpha\beta}}{3} (v')^2 \right) \right\rangle.$$

Вспоминаем теорию поля

$$\langle v'_\alpha v'_\beta v'_\mu v'_\nu \rangle = \frac{1}{15} (\delta_{\alpha\beta} \delta_{\mu\nu} + \delta_{\alpha\mu} \delta_{\beta\nu} + \delta_{\alpha\nu} \delta_{\beta\mu}).$$

Получается тензор, вида

$$\sigma'_{\alpha\beta} = \frac{nm^2}{2T} \cdot \frac{\langle \tau(v')^4 \rangle_0}{15} 2U_{\alpha\beta} = \eta \left(\frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} - \frac{2}{3} \delta_{\alpha\beta} \text{div } \mathbf{u} \right),$$

где коэффициент вязкости η равен

$$\eta = \frac{nm^2}{T} \cdot \frac{\langle \tau(v')^4 \rangle_0}{15} = n\tau T. \quad (9.9)$$

Заметим, что

$$\eta = \frac{m\varkappa}{c_p}, \quad c_p = \frac{5}{2}.$$

Уравнения Навье-Стокса. Для $\sigma'_{\alpha\beta}$ обычно можем переписать её в виде

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

где в нашем случае для малой плотности $\zeta = 0$, в отличие от сдвиговой вязкости η . Считая $\zeta, \eta = \text{const}$

$$\frac{\partial \sigma'_{\alpha\beta}}{\partial x_\beta} = \eta \left(\nabla^2 u_\alpha + \nabla_\alpha \text{div } \mathbf{u} - \frac{2}{3} \nabla_\alpha \text{div } \mathbf{u} \right) + \zeta \nabla_\alpha \text{div } \mathbf{u},$$

и подставляя в исходное уравнение, находим уравнение Навье-Стокса

$$\rho \frac{d\mathbf{u}}{dt} = -\nabla P + \eta \nabla^2 \mathbf{u} + \left(\zeta + \frac{\eta}{3} \right) \text{grad div } \mathbf{u} + n\mathbf{F}. \quad (9.10)$$

Беспорядок. Для наличия замороженного беспорядка получим дополнительное слагаемое

$$\rho \frac{d\mathbf{u}}{dt} = \dots - \rho \frac{\mathbf{u}}{\tau}.$$

Для получения формулы Друде, можем увидеть что почти всё в стационарном случае занулится, и получится

$$\mathbf{u} = \frac{n\tau}{\rho} \mathbf{F}, \quad \mathbf{j} = -ne\mathbf{u} = -ne \frac{n\tau}{\rho} (-e\mathbf{E}) = \frac{e^2 n\tau}{m} \mathbf{E}.$$

10 Холловская проводимость

Рассмотрим систему

$$\begin{aligned} \dot{x}_\alpha + \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \dot{k}_\beta \Omega_n^\gamma &= v_n^\alpha \\ \dot{k}_\alpha + \frac{e}{\hbar c} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \dot{x}_\beta B_\gamma &= -\frac{e}{\hbar} E_\alpha. \end{aligned}$$

Решение можем найти, переписав в виде

$$\begin{pmatrix} \delta_{\alpha\beta} & \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \Omega_n^\gamma \\ \frac{e}{\hbar c} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} B_\gamma & \delta_{\alpha\beta} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \dot{x}_\alpha \\ \dot{k}_\beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v_n^\alpha \\ -\frac{e}{\hbar} E^\alpha \end{pmatrix},$$

для координаты и импульса

$$\begin{aligned} \dot{x}_\alpha &= (1 + \frac{e}{\hbar c} \mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\Omega}_n)^{-1} \left(v_n^\alpha + \frac{e}{\hbar c} (\mathbf{v}_n \cdot \boldsymbol{\Omega}_n) B^\alpha + \frac{e}{\hbar} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} E^\beta \Omega_n^\gamma \right) \\ \dot{k}_\alpha &= -\frac{e}{\hbar} \left(1 + \frac{e}{\hbar c} \mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\Omega}_n \right)^{-1} \left(E^\alpha + \frac{e}{\hbar c} (\mathbf{E} \cdot \mathbf{B}) \Omega_n^\alpha + \frac{1}{c} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} v_n^\beta B^\gamma \right). \end{aligned}$$

Несохранение фазового объема. Заметим, что

$$\frac{\partial \dot{x}_\alpha}{\partial x_\alpha} + \frac{\partial \dot{k}_\alpha}{\partial k_\alpha} = -\frac{d \ln D_n}{dt}, \quad D_n(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) = 1 + \frac{e}{\hbar c} \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) \cdot \boldsymbol{\Omega}_n(\mathbf{k}).$$

Таким образом фазовый объем увеличивается в соответствии с

$$\frac{d \ln \Delta V}{dt} = \nabla_{\mathbf{r}} \cdot \dot{\mathbf{r}} + \nabla_{\mathbf{k}} \cdot \dot{\mathbf{k}} = -\frac{d}{dt} \ln D_n(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t),$$

где $\Delta V = \Delta \mathbf{r} \Delta \mathbf{k}$, и тогда $\Delta V(t) = \Delta V(0)/D_n(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)$. Это можно исправить заменой

$$d\mu = \frac{d^3 r d^3 k}{(2\pi)^3} \rightarrow d\tilde{\mu} \stackrel{\text{def}}{=} D_n(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) \frac{d^3 r d^3 k}{(2\pi)^3}.$$

и в дальнейшем интегрировать уже в новой метрике.

Проводимость. Среднее для любой локальной наблюдаемой может быть получено в виде

$$\langle \mathcal{O} \rangle(\mathbf{r}, t) = \sum_n \int d\tilde{\mu} f_n(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) \langle u_{n\mathbf{k}} | \mathcal{O} | u_{n\mathbf{k}} \rangle \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}').$$

В равновесном случае $f_n(\mathbf{k})$ – функция Ферми $f(E_n(\mathbf{k}) - \mu)$. Для тока тогда

$$j_n^\alpha(\mathbf{r}, t) = -e \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \left(v_n^\alpha + \frac{e}{\hbar c} (\mathbf{v}_n \cdot \boldsymbol{\Omega}_n) B^\alpha + \frac{e}{\hbar} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} E^\beta \Omega_n^\gamma \right) f_n(\mathbf{k}).$$

Для случая $\mathbf{B} = 0$ явно можем найти

$$\mathbf{j}_n = -\frac{e^2}{\hbar} \mathbf{E} \times \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \boldsymbol{\Omega}_n(\mathbf{k}).$$

12 Тяжелая частица в лёгком газе

Уравнение Фоккера-Планка. Заметим, что

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

раскладываясь до второго порядка малости по \mathbf{q} , находим

$$\frac{\partial f(t, \mathbf{p})}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial p_\alpha} \left(\tilde{A}_\alpha f + \frac{\partial}{\partial p_\beta} (B_{\alpha\beta} f) \right),$$

где ввели

$$\tilde{A}_\alpha = \int q_\alpha w(\mathbf{p}, \mathbf{q}) d^3 \mathbf{q} = \frac{\sum_{\delta t} q_\alpha}{\delta t}, \quad B_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} \int q_\alpha q_\beta w(\mathbf{p}, \mathbf{q}) d^3 \mathbf{q} = \frac{\sum_{\delta t} q_\alpha q_\beta}{2\delta t}.$$

Перепишем уравнение в виде

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{\partial s_\alpha}{\partial p_\alpha}, \quad \Leftrightarrow \quad \frac{\partial f}{\partial t} + \text{div}_{\mathbf{p}} \mathbf{s} = 0,$$

где величина \mathbf{s} – плотность потока в импульсном пространстве

$$s_\alpha = -\tilde{A}_\alpha f - \frac{\partial}{\partial p_\beta} (B_{\alpha\beta} f) = -A_\alpha f - B_{\alpha\beta} - B_{\alpha\beta} \frac{\partial f}{\partial p_\beta}, \quad A_\alpha = \tilde{A}_\alpha + \frac{\partial B_{\alpha\beta}}{\partial p_\beta}.$$

Итого в общем виде уравнение Фоккера-Планка можем иметь вид

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{F} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} + \text{div}_{\mathbf{p}} \mathbf{s} = 0. \quad (12.1)$$

Считать обычно проще $B_{\alpha\beta}$, а потом они друг через друга выражаются с учётом того, что в равновесии поток $\mathbf{s}^{(0)}$ зануляется.

Тяжелые частицы. Будем считать, что

$$f^{(0)} \sim \exp\left(-\frac{p^2}{2MT}\right).$$

Начнём с вычисления коэффициентов $B_{\alpha\beta}$:

$$B_{\alpha\beta} = B \delta_{\alpha\beta}, \quad B = \frac{\sum_{\delta t} q^2}{6\delta t},$$

и кинетическое уравнение переписывается в виде

$$\frac{\partial f(t, \mathbf{p})}{\partial t} = B \text{div}_{\mathbf{p}} \left(\frac{\mathbf{p} f}{MT} + \nabla_{\mathbf{p}} f \right).$$

Таким образом B имеет смысл коэффициента диффузии в импульсном пространстве.

Для определения величины B выразим

$$\mathbf{q} = \Delta \mathbf{p}_b = \mathbf{p}_b - \mathbf{p}'_b = \mathbf{p}'_a - \mathbf{p}_a.$$

Считая, что $p_a = p'_a$, находим

$$q^2 = 2p_a^2 - 2p_a^2 \cos \theta = 2p_a^2(1 - \cos \theta).$$

И тогда можем посчитать интеграл вида

$$B = \frac{1}{6} \frac{\sum_{\delta t} q^2}{\delta t} = \frac{1}{6} \int 2p_a^2(1 - \cos \theta) f_a^{(0)}(\mathbf{p}_a) v_a d\sigma d^3 \mathbf{p}_a.$$

Вводя $n = \int f^{(0)}(\mathbf{p}_a) d^3 \mathbf{p}_a$, находим

$$B = \frac{n_a}{3m} \langle p_a^3 \sigma_t(v_a) \rangle = \frac{m^2 n_a}{3} \langle v_a^3 \sigma_t \rangle,$$

где m – масса легкой частицы, σ_t – транспортное сечение рассеяния легких частиц на тяжелых.

Диффузия. Добавив силу \mathbf{F} можем найти

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \left(\left(\mathbf{F} - \frac{B\mathbf{p}}{MT} \right) f - B \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} \right) = 0.$$

На больших \mathbf{p} функция распределения обращается в ноль. Для стационарного случая

$$\left(\mathbf{F} - \frac{B\mathbf{p}}{MT} \right) f - B \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = \text{const} = 0.$$

Функция распределения при внешней силе модифицируется к виду

$$f \sim \exp \left(-\frac{(\mathbf{p} - \mathbf{F}MT/B)^2}{2MT} \right) = \exp \left(-\frac{(\mathbf{p} - M\mathbf{u})^2}{2MT} \right), \quad \mathbf{u} = \frac{T}{B} \mathbf{F},$$

где \mathbf{u} – средняя потоковая скорость. Вообще подвижность b определяется из $\mathbf{u} = b\mathbf{F}$, откуда находим $b = T/B$ и $D = bT = T^2/B$.

14 x Броуновское движение

Добавим случайную силу к уравнению движения

$$m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = F^{(\text{сл})}(t) + \mathbf{F}(t), \quad \Rightarrow \quad m \frac{d\langle \mathbf{v} \rangle}{dt} = \langle F^{(\text{сл})}(t) \rangle + \mathbf{F}(t).$$

Вообще $\langle \mathbf{v} \rangle = b\mathbf{F}$, при этом $\langle F^{(\text{сл})}(t) \rangle + \mathbf{F} = 0$, тогда

$$F^{(\text{сл})}(t) = -\frac{\mathbf{v}(t)}{b} + f^{(\text{сл})}(t), \quad \langle f^{(\text{сл})}(t) \rangle = 0.$$

Тогда уравнение движения переписывается в виде

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\gamma \mathbf{v} + \frac{1}{M} \left(f^{(\text{сл})}(t) + \mathbf{F}(t) \right), \quad \gamma = \frac{1}{bM}.$$

Уже можем сказать, что

$$\langle f_i^{(\text{сл})}(t) f_k^{(\text{сл})}(t') \rangle = \kappa \delta_{ik} \delta(t - t').$$

Введём также $f^{(\text{полн})} = f^{(\text{сл})} + \mathbf{F}(t)$. Теперь перейдём к Фурье-образу

$$\mathbf{v}(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} v_{\omega} e^{-i\omega t} \frac{d\omega}{2\pi}, \quad f^{(\text{полн})}(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} f_{\omega}^{(\text{полн})} e^{-i\omega t} \frac{d\omega}{2\pi}.$$

Тогда уравнение переписывается в виде

$$-i\omega \mathbf{v}_{\omega} = -\gamma \mathbf{v}_{\omega} + \frac{1}{M} f_{\omega}^{(\text{полн})}, \quad \Rightarrow \quad \mathbf{v}_{\omega} = \frac{f_{\omega}^{(\text{полн})}}{M(\gamma - i\omega)}.$$

Полезно ввести отклик системы \mathbf{r}_{ω}

$$\mathbf{r}_{\omega} = \frac{\mathbf{v}_{\omega}}{-i\omega} = \chi(\omega) f_{\omega}^{(\text{полн})}, \quad \chi(\omega) = \frac{i\gamma/\omega - 1}{M(\gamma^2 + \omega^2)}, \quad |\chi|^2 = \frac{1}{M^2 \omega^2 (\gamma^2 + \omega^2)} = \frac{\text{Im } \chi}{M\omega\gamma}.$$

Диссипативная теорема. Рассмотрим

$$x(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} x_{\omega} e^{-i\omega t} \frac{d\omega}{2\pi},$$

тогда коррелятор

$$\langle x(t)x(t') \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \langle x_{\omega} x_{\omega'} \rangle e^{-i\omega t - i\omega' t'} \frac{d\omega d\omega'}{(2\pi)^2}.$$

Учитывая, что $\langle x_{\omega} x_{\omega'} \rangle = 2\pi (x^2)_{\omega} \delta(\omega + \omega')$, где $(x^2)_{\omega}$ – спектральная плотность, находим

$$\langle x(t)x(t') \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} (x^2)_{\omega} e^{-i\omega(t-t')} \frac{d\omega}{2\pi}.$$

Для $t = t'$ просто

$$\langle x^2(t) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} (x^2)_{\omega} \frac{d\omega}{2\pi}.$$

Но мы знаем, что $\mathbf{v} = d\mathbf{r}/dt$, и тогда

$$(v_i v_k)_{\omega} = -i\omega \chi(\omega) \cdot i\omega \chi(-\omega) \cdot \left(f_i^{(\text{сн})} f_k^{(\text{сл})} \right)_{\omega} = \omega^2 |\chi(\omega)|^2 (f_i^{(\text{сн})} f_k^{(\text{сл})})_{\omega}.$$

Для нахождения константы удобно посмотреть на одновременной коррелятор

$$\langle v_i(t) v_k(t) \rangle = \delta_{ik} \frac{T}{M} = \int_{-\infty}^{+\infty} (v_i v_k)_{\omega} \frac{d\omega}{2\pi} = \int_{-\infty}^{+\infty} \omega^2 |\chi(\omega)|^2 (f_i^{(\text{сн})} f_k^{(\text{сл})})_{\omega} \frac{d\omega}{2\pi}.$$

Итак, получаем уравнение

$$\delta_{ik} \frac{T}{M} = \delta_{ik} \kappa \int_{-\infty}^{+\infty} \omega^2 \frac{1 + \gamma^2/\omega^2}{M^2(\gamma^2 + \omega^2)^2} \frac{d\omega}{2\pi}.$$

Интеграл равен π/γ и тогда

$$\kappa = 2\gamma MT. \quad (14.1)$$

Искомый коррелятор тогда равен

$$\langle f_i^{(\text{сн})}(t) f_k^{(\text{сл})}(t') \rangle = 2\gamma MT \delta_{ik} \delta(t - t').$$

Аналогично можем найти

$$\langle v_i v_k \rangle_{\omega} = \omega^2 |\chi(\omega)|^2 \cdot 2\gamma MT \delta_{ik}, \quad \langle x_i x_k \rangle_{\omega} = |\chi(\omega)|^2 \cdot 2\gamma MT \delta_{ik}.$$

Подставляя через мнимую часть отклика, находим

$$\langle v_i v_k \rangle_{\omega} = 2\delta_{ik} T \omega \operatorname{Im} \chi, \quad \langle x_i x_k \rangle_{\omega} = 2\delta_{ik} \frac{T}{\omega} \operatorname{Im} \chi.$$

Более явно можем найти

$$\langle v_i(t) v_k(t') \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} (v_i v_k)_{\omega} e^{-i\omega(t-t')} \frac{d\omega}{2\pi} = \delta_{ik} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{2T\gamma e^{-i\omega(t-t')}}{M(\gamma^2 + \omega^2)} \frac{d\omega}{2\pi} = \delta_{ik} \frac{T}{M} e^{-\gamma|t-t'|}.$$

Интегрируя полученное выражение по t , получим

$$\int_{t'}^{\infty} \langle v_i(t) v_k(t') \rangle dt = \delta_{ik} \frac{T}{\gamma M} = \delta_{ik} \cdot \frac{T}{M} \cdot bM = \delta_{ik} bT = D\delta_{ik}.$$

14.1 Среднеквадратичное отклонение

Частица движется случайным образом и хотим найти $\Delta \mathbf{r}(t) = \mathbf{r}(t + t_0) - \mathbf{r}(t_0)$. Умеем выражать коррелятор через спектральную плотность:

$$\langle (\Delta \mathbf{r}(t))^2 \rangle = 2 \int_{-\infty}^{+\infty} (1 - e^{-i\omega t}) (\mathbf{r}^2)_{\omega} \frac{d\omega}{2\pi} = 2 \int_{-\infty}^{+\infty} (1 - e^{-i\omega t}) \frac{6T}{\omega} \operatorname{Im} \chi \frac{d\omega}{2\pi}.$$

Подставляя $\operatorname{Im} \chi$, находим

$$\langle (\Delta \mathbf{r}(t))^2 \rangle = \frac{6Tt}{M\gamma} \left(1 - \frac{1 - e^{-\gamma t}}{\gamma t} \right).$$

Таким образом есть два предела: при $\gamma t \gg 1$:

$$\langle (\Delta \mathbf{r}(t))^2 \rangle = 6Dt,$$

где $\gamma = 1/bM$, $Tb = D$. И для $\gamma t \ll 1$ получается

$$\langle (\Delta \mathbf{r}(t))^2 \rangle = \frac{3T}{M} t^2 = \langle \mathbf{v}^2 \rangle t^2,$$

то есть просто свободное движение со средней тепловой скоростью.

15 модель Калдейры-Леггетта

Запишем функцию Лагранжа

$$L(\dot{q}, q, \{\dot{x}_\alpha, x_\alpha\}) = \frac{M\dot{q}^2}{2} - U_0(q) + \sum_\alpha \left(\frac{m\dot{x}_\alpha^2}{2} - \frac{m\omega_\alpha^2 x_\alpha^2}{2} \right) - q \sum_\alpha C_\alpha x_\alpha.$$

Теперь уравнения движения – уравнения Лагранжа

$$M\ddot{q} + U'_0(q) = - \sum_\alpha C_\alpha x_\alpha, \quad m\ddot{x}_\alpha + m\omega_\alpha^2 x_\alpha = -qC_\alpha.$$

Решение для фононов можем записать в виде

$$x_\alpha(t) = -C_\alpha \int_{-\infty}^t \frac{\sin(\omega_\alpha(t-s))}{m\omega_\alpha} q(s) ds + x_\alpha(0) \cos \omega_\alpha t + \frac{\dot{x}_\alpha(0)}{\omega_\alpha} \sin(\omega_\alpha t).$$

Введем также функцию запаздывающего отклика

$$K_\alpha(t) = -\theta(t) \frac{C_\alpha \sin(\omega_\alpha t)}{m\omega_\alpha}, \quad K_\alpha(\omega) = -\frac{C_\alpha}{m(\omega_\alpha^2 - (\omega + i\delta)^2)},$$

с полюсами $\omega = \pm\omega_\alpha - i\delta$, $\delta \rightarrow +0$.

Можем ввести силу со стороны термостата на частицу

$$F(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} K(t-s)q(s) ds + f(t), \quad f(t) = - \sum_\alpha C_\alpha \left(x_\alpha(0) \cos \omega_\alpha t + \frac{\dot{x}_\alpha(0)}{\omega_\alpha} \sin \omega_\alpha t \right),$$

где $K(t) = - \sum_\alpha C_\alpha K_\alpha(t) = \theta(t) \sum_\alpha C_\alpha^2 \frac{\sin(\omega_\alpha t)}{m\omega_\alpha}$. Для Фурье-образа:

$$K(\omega) = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \frac{\Omega^2}{\Omega^2 - (\omega + i\delta)^2} \frac{J(\Omega)}{\Omega} d\Omega, \quad J(\Omega) = \frac{\pi}{2} \sum_\alpha \frac{C_\alpha^2}{m\omega_\alpha} \delta(\Omega - \omega_\alpha).$$

Итого, для движения частицы

$$M\ddot{q} + U'_0(q) = \int_{-\infty}^{+\infty} K(t-s)q(s) ds + f(t).$$

Можем представить $K(\omega) = K_0 + i\eta\omega$ или

$$K(t) = K_0\delta(t) - \eta\delta'(t), \quad J(\Omega) = \eta\Omega, \quad K_0 = \sum_\alpha \frac{C_\alpha^2}{m\omega_\alpha^2},$$

что приведёт для уравнений движения

$$\boxed{M\ddot{q} + U'_0(q) = K_0q(t) - \eta\dot{q}(t) + f(t)} \quad (15.1)$$

что формально соответствует трению η , перенормировке потенциала $U(q) = U_0(q) - K_0q^2/2$ и добавлению случайной силы $f(t)$.

Коррелятор. Найдём корреляционную функцию случайной силы

$$\langle f(t)f(t') \rangle = \sum_{\alpha,\beta} C_\alpha C_\beta \left\langle \left(x_\alpha(0) \cos \omega_\alpha t + \frac{\dot{x}_\alpha(0)}{\omega_\alpha} \sin \omega_\alpha t \right) \left(x_\beta(0) \cos \omega_\beta t' + \frac{\dot{x}_\beta(0)}{\omega_\beta} \sin \omega_\beta t' \right) \right\rangle.$$

Так как фононы независимы друг от друга, то можем переписать в виде

$$\langle f(t)f(t') \rangle = \sum_{\alpha,\beta} C_\alpha^2 \left(\langle x_\alpha(0)^2 \rangle \cos(\omega_\alpha t) \cos(\omega_\alpha t') + \frac{\langle \dot{x}_\alpha(0)^2 \rangle}{\omega_\alpha^2} \sin(\omega_\alpha t) \sin(\omega_\alpha t') \right).$$

Здесь учли, что среднее от полной производной по времени равно нулю. Для скоростей

$$\langle \dot{x}_\alpha^2(0) \rangle = \omega_\alpha^2 \langle x_\alpha^2(0) \rangle = \frac{2}{m} \frac{1}{2} \left(\bar{n}_\alpha + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_\alpha = \frac{\hbar \omega_\alpha}{2m} \coth \frac{\hbar \omega_\alpha}{2T}.$$

И для временного коррелятора

$$\begin{aligned} \langle f(t)f(t') \rangle &= \sum_\alpha C_\alpha^2 \frac{\hbar}{2m\omega_\alpha} \left(\coth \left(\frac{\hbar \omega_\alpha}{2T} \right) \cos(\omega_\alpha(t-t')) - i \sin(\omega_\alpha(t-t')) \right) \\ &= \eta \int_{-\infty}^{+\infty} \hbar \Omega \coth \left(\frac{\hbar \Omega}{2T} \right) e^{-i\Omega(t-t')} \frac{d\Omega}{2\pi} \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \langle f(t)f(t') \rangle_\Omega e^{-i\Omega(t-t')} \frac{d\Omega}{2\pi}. \end{aligned}$$

Для Фурье-компоненты

$$\langle f(t)f(t') \rangle_\Omega = \hbar \hbar \Omega \operatorname{cth} \left(\frac{\hbar \Omega}{2T} \right) = \begin{cases} 2\eta T, & \hbar = 0 \\ \eta \hbar |\Omega|, & T = 0. \end{cases}$$

Во временном представлении

$$\langle f(t)f(t') \rangle = \{2\eta T \delta(t-t'), \hbar = 0, -\eta \hbar (t-t')^{-2}/\pi, \quad T = 0.$$

Это согласуется с ФДТ в виде

$$\langle f(t)f(t') \rangle_\Omega = -\operatorname{Im} \left(\frac{1}{\alpha(\omega)} \right) \hbar \operatorname{cth} \left(\frac{\hbar \omega}{2T} \right) = \frac{\hbar \alpha''(\omega)}{|\alpha(\omega)|^2} \operatorname{cth} \frac{\hbar \omega}{2T},$$

где $\alpha(\omega)f(\omega) = q(\omega)$, и тогда

$$\alpha(\omega) = (-M\omega^2 + M\omega_0^2 - i\eta\omega)^{-1},$$

где $U'(q) = \frac{m\omega_0^2}{2}q^2$, и значит

$$\operatorname{Im}(\alpha(\omega))^{-1} = -\eta\omega, \quad \langle f(t)f(t') \rangle_\Omega = \hbar \Omega \hbar \operatorname{cth} \left(\frac{\hbar \Omega}{2T} \right).$$

16 Уравнение Линдблада

Полный гамильтониан системы

$$\hat{H} = \hat{H}_s + \hat{H}_r + \hat{H}_{sr}.$$

Знаем уравнение на полную матрицу плотности

$$\frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} [\hat{\rho}, \hat{H}],$$

далее будем искать уравнение на $\hat{\rho}_s = \operatorname{tr}_r \hat{\rho}$. Будем работать в впредставление взаимодействия

$$\hat{\rho} = \exp \left(\frac{it}{\hbar} (\hat{H}_s + \hat{H}_r) \right) \hat{\rho} \exp \left(\frac{-it}{\hbar} (\hat{H}_s + \hat{H}_r) \right).$$

Можем переписать тогда в виде

$$\frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} [\hat{\rho}(t_0), \hat{H}_{sr}(t)] + \left(\frac{i}{\hbar} \right)^2 \int_{t_0}^t \left[[\hat{\rho}(t'), \hat{H}_{sr}(t')], \hat{H}_{sr}(t) \right] dt'.$$

Будем считать, что взаимодействие адиабатически включалось, тогда можно забыть про первое слагаемое. Также считаем, что

$$\hat{\rho}(t) \approx \hat{\rho}_s(t) \otimes \hat{\rho}_r(t), \quad \hat{\rho}(t) = \hat{\rho}_s(t) \otimes \hat{\rho}_r(-\infty),$$

то есть резервуар в термодинамическом равновесии и слабо взаимодействует с системой. В итоге

$$\frac{\partial \hat{\rho}_s(t)}{\partial t} \approx \left(\frac{i}{\hbar} \right)^2 \int_{-\infty}^t dt' \operatorname{tr} \left(\left[[\hat{\rho}_s(t') \otimes \hat{\rho}_r(-\infty), \hat{H}_{sr}(t')], \hat{H}_{sr}(t) \right] \right).$$

Явно учитывая вид \hat{H} , можем найти коммутаторы. Введя

$$\hat{F}(t) = \sum_{\alpha} \gamma_{\alpha} \hat{b}_{\alpha} e^{i(\omega_s - \omega_{\alpha})t}, \quad \hat{H}_{sr}(t) = \hbar \left(\hat{F}^{\dagger}(t) \hat{a} + \hat{F}(t) \hat{a}^{\dagger} \right),$$

посчитав корреляторы вида $\langle \hat{F}^{\dagger}(t) \hat{F}(t') \rangle_r$, интегралы от них, и вернувшись к представлению Шрёдингера, получаем выражение

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{\rho}_s(t)}{\partial t} &= \frac{i}{\hbar} \left[\hat{\rho}_s, \hat{H}_s + \hbar \Delta_1 \hat{a} \hat{a}^{\dagger} - \hbar (\Delta_1 + \Delta_2) \hat{a}^{\dagger} \hat{a} \right] \\ &+ \gamma_s (n(\omega_s) + 1) (2\hat{a} \hat{\rho}_s(t) \hat{a}^{\dagger} - \{\hat{\rho}_s(t), \hat{a}^{\dagger} \hat{a}\}) + \gamma_s n(\omega_s) (2\hat{a}^{\dagger} \hat{\rho}_s(t) \hat{a} - \{\hat{\rho}_s(t), \hat{a} \hat{a}^{\dagger}\}). \end{aligned}$$

где введены обозначения

$$\gamma_s = \pi D(\omega_s) |\gamma(\omega_s)|^2, \quad D(\omega) = \sum_{\alpha} \delta(\omega - \omega_{\alpha}),$$

а также

$$\Delta_1 = P \int_0^{\infty} D(\omega) |\gamma(\omega)|^2 n(\omega) \frac{1}{\omega - \omega_s} d\omega, \quad \Delta_2 = P \int_0^{\infty} D(\omega) |\gamma(\omega)|^2 \frac{1}{\omega - \omega_s} d\omega.$$

Таким образом добавление резервуара привело к перенормировки гамильтониана

$$\hat{H}_S = \hbar \Delta_1 + \hbar (\omega_s - \Delta_2) \hat{a}^{\dagger} \hat{a},$$

и возникновения диссипативного члена:

$$\frac{\partial \hat{\rho}_s(t)}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{H}_S, \hat{\rho}_s] + \gamma_s (n(\omega_s) + 1) (2\hat{a}\hat{\rho}_s(t)\hat{a}^\dagger - \{\hat{\rho}_s(t), \hat{a}^\dagger\hat{a}\}) + \gamma_s n(\omega_s) (2\hat{a}^\dagger\hat{\rho}_s(t)\hat{a} - \{\hat{\rho}_s(t), \hat{a}\hat{a}^\dagger\}).$$

Общий вид уравнения Линдблада:

$$\frac{\partial \hat{\rho}(t)}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}] + \frac{1}{2} \sum_k \left([\hat{L}_k \hat{\rho}, \hat{L}_k^\dagger] + [\hat{L}_k, \hat{\rho} \hat{L}_k^\dagger] \right),$$

сводится к полученному для $\hat{L}_1 \approx \hat{a}^\dagger$ и $\hat{L}_2 \approx \hat{a}$.

17 Уравнение Смолуховского

17.1 Сведение к осциллятору

Работаем примерно с уравнением

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D\Delta n + \text{div}(bn\nabla U),$$

точнее с уравнением вида

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \frac{D}{T} kP + \frac{D}{T} kx \frac{\partial P}{\partial x} + D \frac{\partial^2 P}{\partial x^2},$$

где подставили потенциал $U = kx^2/2$.

Введём $g = 2\gamma T$ и $\tau = bt$, тогда можем сделать подстановку

$$P(x, \tau) = e^{-\gamma kx^2/2g} \psi(x, \tau),$$

получаем уравнение вида

$$\frac{1}{k} \frac{\partial \psi}{\partial \tau} = \left(\frac{1}{2} - \frac{x^2}{4A} \right) \psi + A \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}, \quad A = \frac{g}{2k\gamma} = \frac{T}{k}.$$

Таким образом пришли к гамильтониану гармонического осциллятора, с собственными функциями в виде полиномов эрмита

$$\varphi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{2\pi A}}} H_n \left(\frac{x}{\sqrt{2A}} \right) e^{-x^2/4A}.$$

Итого, искомая вероятность

$$P(x, \tau) = e^{-\gamma kx^2/2g} \psi(x, \tau) = e^{-x^2/4A} \psi(x, \tau) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n e^{-nk\tau} \varphi_0(x) \varphi_n(x).$$

17.2 Забываются начальные условия

Забавный факт:

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(x) H_n(y)}{n!} \left(\frac{U}{2} \right)^n = \frac{1}{\sqrt{1-U^2}} \exp \left(\frac{2uxy}{1+u} - \frac{u^2(x-y)^2}{1-u^2} \right),$$

и воспользуемся соотношением ортогональности, что найти эволюцию от $P(x, 0) = \delta(x - x_0)$:

$$a_n = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n \left(\frac{x_0}{\sqrt{2A}} \right) = \frac{\varphi_n(x_0)}{\varphi_0(x_0)}.$$

Итого, эволюция запишется в виде

$$\begin{aligned} P(x, \tau) &= \sum_{n=0}^{\infty} e^{-nk\tau} \frac{\varphi_0(x)}{\varphi_0(x_0)} \varphi_n(x) \varphi_n(x_0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi A}} e^{-x^2/2A} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{2^n n!} e^{-nk\tau} H_n \left(\frac{x_0}{\sqrt{2A}} \right) H_n \left(\frac{x}{\sqrt{2A}} \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi A(1 - e^{-2k\tau})}} \exp \left(-\frac{(x - x_0 e^{-k\tau})^2}{2A(1 - e^{-2k\tau})} \right), \end{aligned}$$

где подставили ту сумму с $u = e^{-k\tau}$. Таким образом начальные условия забываются!

Состояние с заданной x -компонентой спина – собственное для $\hat{\sigma}_x$: $\psi \sim (\pm 1, 1)$, а значит

$$\psi(t) \sim \begin{pmatrix} \pm e^{\mp i\Omega t/2} \\ e^{\mp i\Omega t/2} \end{pmatrix}, |\psi(t)|^2 = \text{const},$$

то есть система будет равновероятно наблюдаться в состоянии $|0\rangle$ или $|1\rangle$.

Для постоянных измерений будем работать с системой, вида

$$\dot{\rho}_x = -2\gamma\rho_x, \quad \dot{\rho}_y = -\Omega\rho_z - 2\gamma\rho_y, \quad \dot{\rho}_z = \Omega\rho_y,$$

которая очевидно для $\rho_x = 1$ будет иметь решение, вида

$$\rho_x(t) = e^{-2\gamma t}.$$

18 Метастабильное состояние

18.1 Цепочка уравнений Боголюбова-Борна-Грина-Кирквуда

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

$$\dot{\mathbf{r}}_i = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}_i}, \quad \dot{\mathbf{p}}_i = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}_i},$$

где Гамильтониан запишется в виде

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

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

Закон сохранения. Закон сохранения в дифференциальном виде запишется в виде

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div } \mathbf{j} = 0,$$

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

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

при подстановке уравнений Гамильтона.

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

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

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

Работаем в приближение потенциального внешнего поля

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

Тогда сохранение переписывается в виде

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

При редуцирование в силу ограниченности в фазовом пространстве, остаётся

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

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

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

Так приходим к выражению, вида

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \sum_{i=1}^n \frac{\mathbf{p}_i}{m} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} + \sum_{i=1}^n \left[\mathbf{X}_i + \sum_{j=1}^n \mathbf{F}_{ij} \right] \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_i} \right) f^{(n)} = - \sum_{i=1}^n \int \mathbf{F}_{i,n+1} \frac{\partial f^{(n+1)}}{\partial \mathbf{p}_i} d\mathbf{r}_{n+1} d\mathbf{p}_{n+1}. \quad (18.1)$$

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

18.2 Уравнение Власова

Для $n = 1$ уравнение сводётся к

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

В силу отсутствия корреляций между столкновениями попробуем сделать приближение

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

Определяя

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

приходим к бесстолкновительному уравнению Власова

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}_1}{m} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_1} + [\mathbf{X}_1 + \tilde{\mathbf{F}}] \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1} \right) f^{(1)} = 0. \quad (18.2)$$

которое валидно при $nd^3 \gg 1$.

18.3 Интеграл столкновений

Для $n = 2$:

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

Считая $nd^3 \ll 1$, можем игнорировать⁴ трёхчастичные столкновения, тогда

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

Переходя к координатам, находим

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

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

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

Возвращаемся к одночастичной функции, интегрируя находим

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

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

$$\int d\mathbf{p}_2 d^2\sigma dz \mathbf{v}_{\text{отн}} \left(f^{(2)}(t_+) - f^{(2)}(t_-) \right).$$

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

$$\int d\mathbf{p}_2 d^2\sigma \mathbf{v}_{\text{отн}} \left(f^{(1)}(\mathbf{p}'_2, \mathbf{r}, t) f^{(1)}(\mathbf{p}'_1, \mathbf{r}, t) - f^{(1)}(\mathbf{p}_2, \mathbf{r}, t) f^{(1)}(\mathbf{p}_1, \mathbf{r}, t) \right), \quad - \text{интеграл столкновений.} \quad (18.3)$$

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

20 Упражнения

20.1 У1

Матрица перехода

$$T = \begin{pmatrix} a & b \\ 1-a & 1-b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.85 & 0.5 \\ 0.15 & 0.5 \end{pmatrix}.$$

Собственный вектор с $\lambda = 1$:

$$\mathbf{q} = \left(\frac{b}{1-a+b}, \frac{a-1}{a-1-b} \right) \approx \begin{pmatrix} 0.77 \\ 0.23 \end{pmatrix}.$$

Для него выполняется детальный баланс $T_{j \neq i} q_i = T_{i \neq j} q_j$. Таким образом данный процесс обратимый.

⁴Также будем считать, что \mathbf{X}_i меняются слабо.

20.2 У2

Рассмотрим одномерное случайное блуждание с для разных p . Матрица перехода имеет вид

$$T = \begin{pmatrix} q & q & 0 & 0 & \dots \\ p & 0 & q & 0 & \dots \\ 0 & p & 0 & q & \dots \\ 0 & 0 & p & 0 & \dots \\ \dots & & & & \end{pmatrix}$$

И снова ищем $T\mathbf{x} = \mathbf{x}$, что значит

$$x_0p = x_1q, \quad x_1p = x_2q, \quad \dots$$

откуда находим

$$\frac{1}{x_0} = 1 + \sum_{i=0}^{N-1} \left(\frac{p}{1-p} \right)^i = 1 + \frac{1 - (p/q)^N}{1 - p/q} = \begin{cases} \infty, & p \geq 0.5 \\ \frac{2-3p}{1-2p}, & p < 0.5 \end{cases}$$

Видно, что при $p \geq 0.5$ сумма расходится и $x_0 \rightarrow 0$, а при $x_0(p < 0.5)$ конечна, гарантировано возвращаемся.