УДК 539.1

О НЕКОТОРЫХ ТИПАХ КИНЕТИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ, СВОДЯЩИХСЯ К УРАВНЕНИЯМ В ЧАСТНЫХ ПРОИЗВОДНЫХ

С. О. Гладков, И. Г. Табакова

Московский государственный областной университет, 105005 Москва
E-mail: Sglad@newmail.ru

Математически строго доказана возможность перехода от кинетического уравнения к уравнению в частных производных в случае, когда процессы рассеяния являются почти упругими. Рассмотрены некоторые примеры.

Ключевые слова: диффузия, квазиупругое рассеяние, уравнение Больцмана, функция Грина, законы сохранения энергии и импульса, фотон, электрон, фонон.

При моделировании неравновесных явлений в твердых телах появляется интегро-дифференциальное кинетическое уравнение Больцмана, описывающее пространственно-временную динамику функции распределения [1, 2]. Соответствующие кинетические процессы хорошо изучены, тем не менее существует один не рассматривавшийся ранее вопрос (см. ниже), которому посвящена данная работа.

Рассмотрим процесс рассеяния, в котором участвуют две быстрые частицы и одна медленная, в частности: 1) два фотона и один фонон; 2) два электрона и один фонон; 3) два фотона и один нерелятивистский (движущийся, например, по поверхности Ферми) электрон и т. д. Большое количество подобных процессов объединяет то, что все они являются квазиупругими.

Рассмотрим процесс первого типа. В силу того что фазовая скорость света в веществе $v = c/\sqrt{\varepsilon\mu}$ (ε, μ — диэлектрическая и магнитная проницаемости соответственно) значительно превышает скорость звука c_s, можно считать, что в законе сохранения энергии $v(k_1 - k_2) - c_s k_3 = 0$ последнее слагаемое $c_s k_3$ всегда мало и, следовательно, $k_1 \approx k_2$ (k_1, k_2 — волновые векторы фотона до и после рассеяния соответственно; k_3 — волновой вектор фонона). То же относится к процессам второго и третьего типов.

Может возникнуть вопрос: с какой целью следует вводить в рассмотрение нелокальную и эволюционирующую концентрации фотонов и электронов? Согласно определению коэффициента экстинкции (ослабление), приведенному в [3], его можно представить в виде

$$h = \frac{\langle \delta\varepsilon^2 \rangle}{18\pi c}\, V q^4,$$

где V — объем макрочастицы, на которой происходит рассеяние фотона с длиной волны $\lambda = 2\pi/q \gg V^{1/3}$; $\langle \delta\varepsilon^2 \rangle$ — флуктуации диэлектрической проницаемости, обусловленные воздействием падающей на тело электромагнитной волны; q — волновой вектор падающего фотона. Поскольку флуктуацию можно представить в виде

$$\delta\varepsilon = \frac{\partial\varepsilon}{\partial\rho}\, \delta\rho,$$

где $\delta\rho$ — флуктуация плотности, получаем

$$h = \langle \delta\rho^2 \rangle \Big(\frac{\partial\varepsilon}{\partial\rho}\Big)^2 q^4 V.$$

Однако

$$\langle \delta\rho^2 \rangle = \Big(\frac{\partial\rho}{\partial V}\Big)^2 \langle \delta V^2 \rangle = \frac{M^2}{V^2 C_V} = \frac{\rho^2}{C_V}$$

(C_V — изохорическая теплоемкость; M — масса), поэтому

$$h \sim \frac{M^2}{V C_V}\Big(\frac{\partial\varepsilon}{\partial\rho}\Big)^2 q^4.$$

В силу того что концентрация фотонов определяется как $n = 1/V$, коэффициент экстинкции

$$h \sim n\,\frac{M^2}{C_V}\Big(\frac{\partial\varepsilon}{\partial\rho}\Big)^2 q^4,$$

и, следовательно, он существенно зависит от концентрации фотонов.

В приведенном определении концентрация n является стационарной однородной функцией координат и времени, но ее распределение $n(\boldsymbol{r}, t)$ должно находиться из диффузионного приближения, которое обсуждается в данной работе.

Что касается электронов, то для них проводимость по определению [4] есть $\sigma = e^2 n\tau/m$ (e — заряд электрона; m — его масса; τ — время релаксации; n — концентрация электронов), поэтому все заключения об однородности и стационарности функции $n(\boldsymbol{r}, t)$ те же, что и для фотонов.

Итак, если время диффузии в $\boldsymbol{r}$-пространстве составляет $\Delta t = L^2/D$ ($L \sim V^{1/3}$ — характерный размер; D — коэффициент диффузии), которое значительно больше времени диффузии электронов в импульсном $\boldsymbol{p}$-пространстве ($\Delta t^* = p_{\mathrm{F}}^2/D_p = (p_{\mathrm{F}}/\delta p)^2\tau \sim p_{\mathrm{F}}^2\tau/(mT)$, где p_{F} — импульс Ферми; T — температура; постоянная Больцмана положена равной единице), то установление равновесной концентрации электронов определяется временем $\Delta t = L^2/D$. Если эксперимент прекратить раньше этого времени, то электроны будут представлять собой неравновесную систему, а значит, любой эксперимент по измерению проводимости металлов может быть поставлен под сомнение. То же относится и к коэффициенту экстинкции h.

Покажем, что в приближении квазиупругого рассеяния частиц (квазичастиц) правая часть кинетического уравнения Больцмана для функции распределения $f(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p}, t)$: $\dot f = L\{f\}$ ($L\{f\}$ — интеграл столкновений) после интегрирования по всем импульсам $\boldsymbol{p}$ всегда может быть представлена в виде

$$\int L\{f\}\,\frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} = D_1\,\Delta n - D_2\,\Delta^2 n + D_3\,\Delta^3 n - \ldots = \sum_{i=1}^{k}(-1)^{i+1} D_i\,\Delta^i n, \qquad (1)$$

где Δ — оператор Лапласа; D_i — коэффициенты диффузии соответствующей размерности (для фотонов $D_1 = D_3 = \ldots = 0$, $D_2 \neq 0$, для электронов $D_1 \neq 0$, $D_2 = D_3 = \ldots = 0$); $\hbar$ — постоянная Планка.

Левая часть кинетического уравнения Больцмана становится равной

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \int \frac{\partial f}{\partial t}\,\frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}.$$

Докажем формулу (1). Запишем интеграл фотон-фононных столкновений в виде

$$L\{f\} = \frac{2\pi V^3}{\hbar(2\pi\hbar)^3}\int d^3p' \int |\psi_1|^2 \{[(1+f_p) f_{p'} \bar N_k - f_p(1+f_{p'})(1+\bar N_k)]\delta(\varepsilon_p - \varepsilon_{p'} - \hbar\omega_k)\delta(\boldsymbol{q}-\boldsymbol{q}'-\boldsymbol{k}) +$$
$$+ [(1+f_p) f_{p'}(1+\bar N_k) - f_p(1+f_{p'})\bar N_k]\delta(\varepsilon_p - \varepsilon_{p'} + \hbar\omega_k)\delta(\boldsymbol{q}-\boldsymbol{q}'+\boldsymbol{k})\}\, d^3k, \qquad (2)$$

где $\bar{N}_k$ — равновесная функция распределения фононов, которые считаются термостатом; δ — дельта-функции, учитывающие законы сохранения энергии и импульса участвующих в процессах рассеяния частиц (квазичастиц). Остальные обозначения такие же, как в [2].

Как известно, амплитуда рассеяния для фотон-фононного механизма определяется по формуле

$$\psi_1 = i\,\frac{8\pi\hbar g}{V}\Big(\frac{\hbar k\omega_q\omega_{q'}}{2\rho V c_s}\Big)^{1/2}, \tag{3}$$

где $\omega_q = cq/\sqrt{\varepsilon\mu}$ — частота колебаний фотона; g — константа фотон-фононной связи [5].

В силу того что температура окружающей среды считается достаточно высокой: $T \gg \hbar\omega_k$, можно считать, что $1 + N_k \approx N_k \approx T/(\hbar\omega_k)$. Тогда нелинейный интеграл столкновений (2) становится линейным по фотонной функции распределения:

$$L\{f\} = \frac{(2\pi)^2V^3T}{\hbar^2(2\pi\hbar)^3}\int d^3p'\int|\psi_1|^2\{(f_{p'}-f_p)[\delta(\varepsilon_p-\varepsilon_{p'}-\hbar\omega_k)\delta(\boldsymbol{q}-\boldsymbol{q}'-\boldsymbol{k})+$$
$$+\,\delta(\varepsilon_p-\varepsilon_{p'}+\hbar\omega_k)\delta(\boldsymbol{q}-\boldsymbol{q}'+\boldsymbol{k})]\}\,\frac{d^3k}{\omega_k}. \tag{4}$$

Поскольку $p' = p + \delta p$, где $\delta p = \hbar k$ и $\delta p \ll p$, в (4) согласно (3) можно положить

$$|\psi_1|^2 = g^2\,\frac{(8\pi)^2}{2}\,\frac{\hbar^3qq'kc^2}{V^3c_s\varepsilon\mu} \approx 32\pi^2g^2\,\frac{\hbar^3q^2kc^2}{V^3c_s\varepsilon\mu}. \tag{5}$$

Проинтегрируем интеграл столкновений (4) по всем $\boldsymbol{q}$. После перехода в сферическую систему координат с учетом (5) имеем

$$\int L\{f_p\}\,\frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} = \int L\{f_q\}\,\frac{q^2\,dq}{(2\pi)^3}\,4\pi. \tag{6}$$

Разложим функцию распределения фотонов в интеграл Фурье, используя известное представление

$$f_q = \int f_x\,\mathrm{e}^{i\boldsymbol{qx}}\,d^3x.$$

В силу линейности выражения (6) по f_q имеем

$$\int q^4\,dq(\,\cdot\,)\,\mathrm{e}^{i\boldsymbol{qx}}\,d^3x = -\Delta^2\int dq\,d^3x(\,\cdot\,)\,\mathrm{e}^{i\boldsymbol{qR}}, \tag{7}$$

где $\boldsymbol{R} = \boldsymbol{x} - \boldsymbol{r}$ и дифференцирование ведется по $\boldsymbol{R}$.

В результате несложных математических выкладок получаем следующее диффузионное уравнение для концентрации фотонов $n(\boldsymbol{r}, t)$:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -D_2\,\Delta^2 n. \tag{8}$$

Можно показать, что коэффициент диффузии определяется соотношением

$$D_2 = 1024\pi^3Tcg^2\xi/(\rho c_s^2\varepsilon\mu), \tag{9}$$

где

$$\xi = \int_{-1}^{1} dx \int_{-1}^{1} dy \Big[\frac{x^2y^2 + (1-x^2)(1-y^2)}{|x|}\Big(\frac{1}{\sqrt{4(1-x^2)(1-y^2)-1}} -$$

$$- \frac{1}{4\sqrt{1-x^2-y^2+xy}} - \frac{1}{4\sqrt{1-x^2-y^2+xy}}\Big) +$$

$$+ \frac{1}{4|x|}\Big(\sqrt{4(1-x^2)(1-y^2)-1} - \sqrt{1-x^2-y^2+xy} - \sqrt{1-x^2-y^2-xy}\Big)\Big]. \qquad (10)$$

Главное значение по Коши интеграла (10) приблизительно равно 6,34.

Уравнение (8) можно решать, задавая конкретные граничные и начальные условия. Действительно, пусть в начальный момент времени концентрация фотонов равна $n(\boldsymbol{r}, t)\big|_{t=0} = \varphi(\boldsymbol{r})$. Функцию $\varphi(\boldsymbol{r})$ можно измерить, например, с помощью датчиков, внедренных в структуру на некотором расстоянии от границы в глубь вещества и отстоящих друг от друга на определенных интервалах по направлению вектора Пойнтинга. Это позволяет определить пространственное поведение $n(\boldsymbol{r}, 0)$. Второе условие можно получить, измерив скорость уменьшения концентрации, точнее, ее производной:

$$\frac{\partial n(\boldsymbol{r}, t)}{\partial t}\Big|_{t=0} = \psi(\boldsymbol{r}).$$

Что касается граничных условий, то значение концентрации на поверхности структуры можно задавать, например, в виде $n(\boldsymbol{r}, t)\big|_{\Sigma_V} = n_0(t)$, где Σ_V — граница твердого рассеивателя. Поскольку концентрация может быть убывающей функцией, еще одно граничное условие можно задать, потребовав, чтобы концентрация $n(\boldsymbol{r}, t)$ с увеличением расстояния d в глубь вещества также убывала. Это условие можно дополнить требованием отрицательности производной функции $n(\boldsymbol{r}, t)$ по направлению, перпендикулярному границе твердого тела. Кроме того, градиент концентрации должен быть ориентирован строго по вектору Пойнтинга.

Следует отметить, что граничные (и начальные) условия должны задаваться на основе конкретного эксперимента.

В общем случае можно лишь утверждать, что для начального распределения концентрации имеется две возможности: либо уменьшение концентрации по мере увеличения глубины (т. е. при $\boldsymbol{r} \to \infty$), либо слабая зависимость от расстояния $n(\boldsymbol{r}, t)$. Слабая зависимость $n(\boldsymbol{r}, t)$ следует из решения уравнения (8) и легко проверяется в одномерном случае при радиальном распределении концентрации.

Сказанное выше относится к случаю почти упругого рассеяния фотонов на фононах.

Рассмотрим почти упругое рассеяние электронов проводимости в металле на флуктуациях плотности. В этом случае

$$\psi_2 = -ig\Big(\frac{\hbar k}{2\rho V c_s}\Big)^{1/2}\frac{1}{V} \qquad (11)$$

и аналогично (4) (считая фононы термостатом) имеем

$$L\{f\} = \frac{(2\pi)^2 V^3 T}{\hbar^2 (2\pi\hbar)^3}\int d^3p' \int |\psi_2|^2 \{(f_{p'} - f_p)[\delta(\varepsilon_p - \varepsilon_{p'} - \hbar\omega_k)\delta(\boldsymbol{q} - \boldsymbol{q}' - \boldsymbol{k}) +$$

$$+ \delta(\varepsilon_p - \varepsilon_{p'} + \hbar\omega_k)\delta(\boldsymbol{q} - \boldsymbol{q}' + \boldsymbol{k})]\}\,\frac{d^3k}{\omega_k}.$$

В выражении для амплитуды рассеяния (11) отсутствует множитель $qq' \approx q^2$, поэтому по аналогии с (7)–(10) получаем уравнение

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D_1 \, \Delta n,$$

где D_1 — коэффициент диффузии электронов:

$$D_1 \approx 512\pi^3 T v_{\rm F} g^2/(\rho c_s^2 a^2), \tag{12}$$

a — межатомное расстояние.

Сложность оценки по формуле (12) обусловлена некоторым произволом в определении константы электрон-фононной связи g. Но для оценки достаточно положить, например, $g = 10^{-4}$.

Для комнатной температуры (плотность $\rho = 7{,}8$ г/см^3, скорость Ферми $v_{\rm F} = 10^8$ см/с, скорость звука $c_s = 10^5$ см/с, межатомное расстояние $a = 3 \cdot 10^{-8}$ см) из (12) получаем коэффициент диффузии электронов в координатном пространстве $D \approx 10^{-6}$ см^2/с. Поэтому время диффузии (если считать, что сам процесс происходит на интервале $L = 10^{-6}$ см) составляет $\delta t = L^2/D_1 \approx 10^{-6}$ с. Так как время релаксации электрона τ значительно меньше δt, приведенная численная оценка оказывается достаточно точной.

Итак, формулу (1) можно считать доказанной.

Таким образом, в работе показано, что в приближении почти упругих актов рассеяния частиц или квазичастиц интегродифференциальное кинетическое уравнение всегда сводится к диффузионному, в правой части которого присутствует оператор Δ^m, $m = 1, 2, 3, \ldots$.

В зависимости от типа участвующих в процессе рассеяния частиц уравнение в частных производных существенно изменяется: в его правой части содержится либо слагаемое $D_1 \, \Delta n$, либо слагаемое $-D_2 \, \Delta^2 n$, $D_3 \, \Delta^3 n$, ... (см. примеры решения подобных задач в [5]).

Решение уравнения диффузии (8) с соответствующими начальными и граничными условиями позволяет описать нетривиальное пространственно-временное распределение концентрации фотонов по объему вещества.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Ахиезер А. И.** Спиновые волны / А. И. Ахиезер, В. Г. Барьяхтар, С. В. Пелетминский. М.: Наука, 1967.
2. **Гладков С. О.** Физика композитов: термодинамические и диссипативные свойства. М.: Наука, 1999.
3. **Ландау Л. Д.** Электродинамика сплошных сред / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. М.: Наука, 1982. Т. 8.
4. **Лифшиц И. М.** Электронная теория металлов / И. М. Лифшиц, М. Я. Азбель, М. И. Каганов. М.: Наука, 1971.
5. **Гладков С. О.** Сборник задач по теоретической и математической физике. М.: Физматлит, 2006.

Поступила в редакцию 3/X 2006 г.