

Kraus Y.
graduate student
Bar-Ilan University
Sokolovsky S.

candidate of physical and mathematical sciences,
Associate Professor Department of Physics
Pridniprovska State Academy of Architecture and Engineering

RELAXATION PHENOMENA FOR ELECTRON IN CRYSTAL AND A GENERALIZATION OF CHAPMAN-ENSKOG METHOD

Краус Яир
аспирант
Университет имени Бар-Илана
Соколовский Сергей

кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физики
Приднепровская государственная академия строительства и архитектуры

РЕЛАКСАЦИОННЫЕ ЯВЛЕНИЯ ДЛЯ ЭЛЕКТРОНА В КРИСТАЛЛЕ И ОБОЩЕНИЕ МЕТОДА ЧЕПМЕНА-ЭНСКОГА

Summary. Relaxation of velocity and temperature of electron in crystal has been investigated. The problem was analyzed on the basis of kinetic equation for electron in equilibrium phonon bath with the help of the reduced description method that lead to a generalization of standard Chapman-Enskog method. It was shown that proposed by Landau method of investigation of relaxation phenomena in plasma corresponds to the simplest approximation in the framework of theory developed in the present paper.

Аннотация. Изучена релаксация скорости и температуры электрона в кристалле. Задача проанализирована на основе кинетического уравнения для электрона в равновесном фоновом термостате с помощью метода сокращенного описания, что ведет к обобщению стандартного метода Чепмена-Энскога. Показано, что предложенный Ландау метод изучения релаксационных явлений в плазме соответствует простейшей аппроксимации в рамках теории, развитой в настоящей работе.

Key words: relaxation phenomena in two component systems, generalized Chapman-Enskog method, Landau approximation.

Ключевые слова: релаксационные явления в двухкомпонентной системе, обобщенный метод Чепмена-Энскога, приближение Ландау.

Настоящая работа посвящена кинетике однородных состояний электрона в кристалле. В качестве параметров сокращенного описания использованы его температура T и скорость u_n . В рассматриваемой модели электрон взаимодействует с равновесной системой фононов, имеющей температуру T_0 и нулевую среднюю скорость (покоящаяся кристаллическая решетка). Таким образом, речь идет о релаксации температур и скоростей в двухкомпонентной системе.

Впервые задачу о выравнивании температур компонент рассмотрел Ландау [1]. В основу рассмотрения было положено кинетическое уравнение для двухкомпонентной плазмы, называемое теперь уравнением Ландау. Фактически это есть уравнение приближения слабого взаимодействия с дополнительным обрезанием в интеграле по передаваемому при столкновениях импульсу [2]. При вычислении времени релаксации было предположено, что в компонентах плазмы быстро устанавливается равновесие с некоторыми температурами, которые затем медленно выравниваются. Медленность процесса релаксации связывалась с большим

различием масс частиц компонент, что учитывалось в вычислениях как наличие дополнительного малого параметра [1].

Ландау при решении описанной задачи использовал распределения Максвелла. Однако это не означает, что они представляют собой неравновесную функцию распределения системы. Настоящая работа возникла из попытки понять, как выглядит в этой ситуации неравновесная функция распределения. Для упрощения рассмотрена задача о кинетике однородных состояний частицы, слабо взаимодействующей с равновесным термостатом. При этом влиянием частицы на термостат в термодинамическом пределе можно пренебречь. Для большей определенности нами изучаются релаксационные явления для электрона в кристалле, где роль второй равновесной компоненты играет равновесный фононный газ.

В основу работы положено обобщение метода Чепмена-Энскога, которое вытекает из его понимания как метода сокращенного описания, примененного для решения кинетических уравнений (см. стандартное изложение метода в [2 с. 32-37, 3 с. 124-138]). Идея такого отношения к

методу Чепмена-Энскога фактически заложена в

Кинетическое уравнение для описания
однородных состояний электрона в кристалле
можно записать в виде [5]

ИСХОДНЫЕ УРАВНЕНИЯ

$$\begin{aligned} \partial_t f_p(t) = \mathbf{L}f_p(t) &\equiv \int d^3p M(p, p') f_{p'}(t) \\ M(p, p') &\equiv \frac{1}{(2\pi)^2 \hbar} \int d^3k g_k^2 \{ n_k \delta(p' - [p - k\hbar]) - (1 + n_k) \delta(p' - p) \} \times \\ &\quad \times \delta(\varepsilon_{p-k\hbar} + \hbar\omega_k - \varepsilon_p) + \\ &\quad + \frac{1}{(2\pi)^2 \hbar} \int d^3p g_k^2 \{ (1 + n_k) \delta(p' - [p + k\hbar]) - n_k \delta(p' - p) \} \times \\ &\quad \times \delta(\varepsilon_p + \hbar\omega_k - \varepsilon_{p+k\hbar}). \end{aligned} \quad (1)$$

(см. также [6]). Здесь n_k – равновесные числа заполнения фононов при температуре T_0 , p_n – импульс электрона, k_n – волновой вектор фонона, ε_p – энергия электрона, $\hbar\omega_k$ – энергия фонона

$$\begin{aligned} n_k &= \frac{1}{e^{T_0} - 1}, \\ \varepsilon_p &= \frac{p^2}{2m} \end{aligned} \quad (3)$$

(m – масса электрона). В модели Фрелиха, пригодной для описания полярона, функции ω_k и g_k выбираются в виде

$$\omega_k = \omega, \quad g_k = 2 \frac{\hbar\omega}{k} \sqrt{\frac{\pi\alpha}{k_0}}, \quad (k_0 = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}), \quad (4)$$

где α – безразмерная малая постоянная Фрелиха [5, 7 с. 259], k_0 – характерное значение волнового вектора.

В основу рассмотрения положим функциональную гипотезу

$$f_p(t) \xrightarrow{t \gg \tau_0} f_p(T(t, f_0), u(t, f_0)) \quad (f_{0p} \equiv f_p(t = 0)), \quad (5)$$

где температура $T(t, f_0)$ и средняя скорость $u_n(t, f_0)$ электрона определены формулами

$$\begin{aligned} \int d^3p f_p(t) p_l &\xrightarrow{t \gg \tau_0} m n u_l(t, f_0), \\ \int d^3p f_p(t) \varepsilon_p &\xrightarrow{t \gg \tau_0} n \left[\frac{3}{2} T(t, f_0) + \frac{m u(t, f_0)^2}{2} \right] \end{aligned} \quad (6)$$

в которых n – постоянная “плотность электронов”

$$\int d^3p f_p(t) = n. \quad (7)$$

Соотношение (5) означает, что сокращенное описание наступает при временах t , значительно больших характерного времени τ_0 , и указывает на независимость $f_p(T, u)$ от f_{0p} .

Функциональная гипотеза (5) ведет к замкнутым уравнениям для величин $T(t, f_0)$, $u_n(t, f_0)$

$$\begin{aligned} \partial_t T(t, f_0) &= L_0(T(t, f_0), u(t, f_0)), \\ \partial_t u_l(t, f_0) &= L_l(T(t, f_0), u(t, f_0)), \end{aligned} \quad (8)$$

где обозначено

$$L_0(T, u) = \frac{2}{3n} \int d^3p (\varepsilon_p - p_l u_l) \mathbf{L}f_p(T, u) \quad L_l(T, u) = \frac{1}{mn} \int d^3p p_l \mathbf{L}f_p(T, u). \quad (9)$$

В свою очередь, функция распределения $f_p(T, u)$ удовлетворяет кинетическому уравнению (1) при сокращенном описании

$$\frac{\partial f_p(T, u)}{\partial T} L_0(T, u) + \frac{\partial f_p(T, u)}{\partial u_l} L_l(T, u) = \mathbf{L} f_p(T, u), \quad (10)$$

а также дополнительным условиям

$$\int d^3 p f_p(T, u) p_l = m n u_l$$

$$\int d^3 p f_p(T, u) \varepsilon_p = n \left(\frac{3}{2} T + \frac{m u^2}{2} \right) \quad (11)$$

Приведенные уравнения являются основными уравнениями метода сокращенного описания применительно к рассматриваемой проблеме.

ОБОБЩЕННЫЙ МЕТОД ЧЕПМЕНА-ЭНСКОГА

В своей стандартной формулировке метод Чепмена-Энскога [2 с. 32-37, 3 с. 124-138] ориентирован на исследование гидродинамической эволюции. Обобщения этого метода возможны на основе его понимания как частного случая метода сокращенного описания, примененного к решению кинетического уравнения.

Изучим явления в системе вблизи равновесия, когда $T - T_0$ и u_l являются малыми величинами одного порядка μ . Ищем функцию распределения $f_p(T, u)$ в виде разложения по μ

$$f_p(T, u) = f_p^{(0)} + f_p^{(1)} + O(\mu^2). \quad (12)$$

Простой анализ на основе (1), (2), (10), (11) и соображений вращательной инвариантности показывает, что

$$f_p^{(1)} = A_p p_l u_l + B_p (T - T_0) \quad (13)$$

где A_p, B_p – некоторые функции от модуля импульса, удовлетворяющие уравнениям

$$\mathbf{L} A_p p_l = -\lambda_u A_p p_l,$$

$$\int d^3 p \varepsilon_p A_p = \frac{3}{2} n;$$

$$\mathbf{L} B_p = -\lambda_T B_p,$$

$$\int d^3 p \varepsilon_p B_p = \frac{3}{2} n. \quad (14)$$

Сюда входят коэффициенты λ_u, λ_T , которые определяют эволюцию параметров T, u_l

$$L_0^{(1)} = -\lambda_T (T - T_0),$$

$$L_l^{(1)} = -\lambda_u u_l, \quad (15)$$

то есть $\tau_T \equiv \lambda_T^{-1}$, $\tau_u \equiv \lambda_u^{-1}$ являются временами релаксации для температуры T и скорости u_l .

Функции $A_p p_l, B_p$ являются собственными функциями оператора \mathbf{L} , отвечающими собственным значениям λ_u, λ_T . Спектральную задачу для \mathbf{L} можно обсуждать в терминах матрицы $M(p, p')$ из (2). Поскольку она вещественна, но не симметрична, должны быть введены ее правые и левые собственные функции $\psi_n(p), \chi_n(p)$

$$\int d^3 p M(p, p') \psi_n(p') = -\lambda_n \psi_n(p),$$

$$\int d^3 p \chi_n(p) M(p, p') = -\lambda_n \chi_n(p')$$

$$\int d^3 p \chi_n(p) \psi_{n'}(p) = \delta_{n'n},$$

$$\sum_n \chi_n(p) \psi_n(p') = \delta(p' - p) \quad (16)$$

Матрица $M(p, p')$ обладает свойствами, которые удобно описывать в терминах матрицы $K(p, p')$, определяемой формулой

$$M(p, p') \varphi_{p'} = -\varphi_p K(p, p'). \quad (17)$$

Согласно (2), (16) это дает

$$\varphi_{p'} K(p, p') = \frac{1}{(2\pi)^2 \hbar} \int d^3 k g_k^2 n_k \int d^3 p \varphi_p \{ \delta(p - p') - \delta(p + k\hbar - p') \} \times$$

$$\times \{ \delta(p - p'') - \delta(p + k\hbar - p'') \} \delta(\varepsilon_p + \hbar \omega_k - \varepsilon_{p+k\hbar})$$

$$\varphi_p K(p, p') = \varphi_{p'} K(p', p); \quad (18)$$

$$\int d^3 p' K(p, p') \chi_n(p') = \lambda_n \chi_n(p), \psi_n(p) = \varphi_p \chi_n(p) \quad (19)$$

При определении скалярного произведения формулой

$$(C_p, D_p) \equiv \int d^3 p \varphi_p C_p D_p \quad (20)$$

оператор, отвечающий матрице $K(p, p')$, является симметричным, а система векторов $\chi_n(p)$ -

ортонормированной и полной. При этом квадратичная форма

$$\{C_p, D_p\} = \int d^3 p d^3 p' \varphi_p K(p, p') C_p D_{p'} \quad (21)$$

обладает свойствами

$$\{C_p, D_p\} = \{D_p, C_p\}, \quad \{C_p, C_p\} \geq 0 \quad (22)$$

и очень полезна при решении кинетического уравнения. Из (22) следует положительность собственных значений λ_n (исключение: собственному вектору $\chi_0 = 1$ отвечает $\lambda_0=0$).

Заметим, что изложенное обобщение метода Чепмена-Энскога позволяет в следующем порядке теории возмущений по μ выйти за рамки простой линеаризации и получить нелинейные уравнения для T, u_l .

Приближенное решение полученных уравнений

Перейдем к приближенному решению уравнений (14). Согласно (1), (2), (14), (17) после замены

$$\begin{aligned} A_p &\equiv n\varphi_p \tilde{A}_p, \\ B_p &\equiv n\varphi_p \tilde{B}_p, \end{aligned} \quad (23)$$

для функций \tilde{A}_p, \tilde{B}_p получим следующие уравнения

$$\begin{aligned} \int d^3 p' K(p, p') p'_l \tilde{A}_{p'} &= \lambda_u p_l \tilde{A}_p, \\ (\tilde{A}_p, \varepsilon_p) &= \frac{3}{2}; \\ \int d^3 p' K(p, p') \tilde{B}_{p'} &= \lambda_T \tilde{B}_p, \\ (\tilde{B}_p, \varepsilon_p) &= \frac{3}{2}. \end{aligned} \quad (24)$$

Будем искать их решение в виде ряда по полиномам Сонина $S_\alpha^n(x)$ [8 с.49]

$$\begin{aligned} A_{nn'} &= \frac{1}{\sqrt{x_n x_{n'}}} \left\{ p_l S_{\frac{3}{2}}^n \left(\frac{\varepsilon_p}{T_0} \right), p_l S_{\frac{3}{2}}^{n'} \left(\frac{\varepsilon_p}{T_0} \right) \right\}, \\ B_{nn'} &= \frac{1}{\sqrt{y_n y_{n'}}} \left\{ S_{\frac{1}{2}}^n \left(\frac{\varepsilon_p}{T_0} \right), S_{\frac{1}{2}}^{n'} \left(\frac{\varepsilon_p}{T_0} \right) \right\}. \end{aligned} \quad (28)$$

Вычисление a_n в приближении одного полинома, а b_n в приближении двух полиномов (т.е. самое простое приближение) дает

$$\begin{aligned} a_0 &= \frac{1}{T_0}, \\ \lambda_u &= \frac{1}{3mT_0} \{p_l, p_l\}; \\ b_0 &= 0, \\ b_1 &= -\frac{1}{T_0}, \\ \lambda_T &= \frac{2}{3T^2} \{\varepsilon_p, \varepsilon_p\}; \end{aligned}$$

$$f_p(T, u) = \frac{n}{(2\pi m T)^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{\varepsilon_p - mu}{T}} + O(\mu^2). \quad (29)$$

Это приближение может быть названо приближением Ландау поскольку в известной работе [1] он использовал при анализе релаксации

$$\tilde{A}_p = \sum_{n=0}^{\infty} a_n S_{\frac{3}{2}}^n \left(\frac{\varepsilon_p}{T_0} \right),$$

$$\tilde{B}_p = \sum_{n=0}^{\infty} b_n S_{\frac{1}{2}}^n \left(\frac{\varepsilon_p}{T_0} \right)$$

$$(S_\alpha^0 = 1, S_\alpha^1 = \alpha + 1 - x), \quad (25)$$

которые нормированы условиями

$$\int d^3 p \varphi_p p^2 S_{\frac{3}{2}}^n \left(\frac{\varepsilon_p}{T_0} \right) S_{\frac{3}{2}}^{n'} \left(\frac{\varepsilon_p}{T_0} \right) = x_n \delta_{n'n},$$

$$x_n \equiv \frac{4mT_0}{\sqrt{\pi}} \frac{\Gamma(n+5/2)}{n!},$$

$$\int d^3 p \varphi_p S_{\frac{1}{2}}^n \left(\frac{\varepsilon_p}{T_0} \right) S_{\frac{1}{2}}^{n'} \left(\frac{\varepsilon_p}{T_0} \right) = y_n \delta_{n'n},$$

$$y_n \equiv \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{\Gamma(n+3/2)}{n!} \quad (26)$$

Тогда уравнения (24) дают

$$\sum_{n'=0}^{\infty} A_{nn'} a_{n'} \sqrt{x_{n'}} = \lambda_u a_n \sqrt{x_n},$$

$$a_0 = \frac{1}{T_0};$$

$$\sum_{n'=0}^{\infty} B_{nn'} b_{n'} \sqrt{y_{n'}} = \lambda_T b_n \sqrt{y_n},$$

$$b_0 - b_1 = \frac{1}{T_0}, \quad (27)$$

где введены симметричные, положительно определенные матрицы

температур в качестве неравновесной функции распределения $f_p(T, u)$ распределение Максвелла с $T \neq T_0$ (релаксация скоростей рассмотрена в [9]).

В заключение настоящей работы вычислим собственные значения λ_u, λ_T по формулам (29). Учитывая выражение (18) для матрицы $K(p, p')$, получим

$$\begin{aligned} \lambda_u &= \frac{\hbar}{(2\pi)^2} \int d^3 k g_k^2 n_k \frac{k^2}{3mT_0} \delta(k), \\ \lambda_T &= \frac{\hbar}{(2\pi)^2} \int d^3 k g_k^2 n_k \frac{2\omega_k^2}{3T_0^2} \delta(k), \end{aligned} \quad (30)$$

где введена скалярная функция

$$\delta(k) = \int d^3 p \varphi_p \delta(\varepsilon_p + \hbar\omega_k - \varepsilon_{p+k\hbar}). \quad (31)$$

Поскольку $\delta(k)$ зависит только от модуля k , направим k_l вдоль оси p_z в импульсном пространстве и введем в нем сферические координаты. Это даст

$$\delta(k) = \frac{m}{\hbar k} \int d\Omega \int_0^\infty dp p \varphi_p \delta\left(\cos \theta - \frac{1}{p} \left[\frac{m\omega_k}{k} - \frac{k\hbar}{2} \right]\right) =$$

$$= \frac{2\pi m}{\hbar k} \int_{R_k}^{+\infty} dp p \varphi_p = \frac{m}{\hbar \sqrt{2\pi m T_0}} e^{-\frac{R_k^2}{2mT_0}},$$

где

$$R_k = \left| \frac{m\omega_k}{k} - \frac{k\hbar}{2} \right|.$$

Ограничиваясь далее случаем полярона Фрелиха (4), получим

$$\delta(xk_0) = \frac{m}{k_0 \hbar \sqrt{2\pi m T_0}} \frac{1}{x} e^{-vy(x)},$$

$$v \equiv \frac{\hbar\omega}{T_0},$$

$$y(x) \equiv \frac{(2-x^2)^2}{8x^2}.$$

Возвращаясь теперь к выражениям (30) для λ_u, λ_T , получим

$$\lambda_u = \frac{4\omega\alpha}{3\sqrt{2\pi}} \frac{v^{\frac{3}{2}}}{sh\frac{v}{2}} K_1\left(\frac{v}{2}\right),$$

$$\lambda_T = \frac{4\omega\alpha}{3\sqrt{2\pi}} \frac{v^{\frac{5}{2}}}{sh\frac{v}{2}} K_0\left(\frac{v}{2}\right), \quad (32)$$

где $K_\alpha(x)$ – функции Макдональда, определяемые интегралом

$$\int_0^\infty dx x^{\alpha-1} e^{-px} e^{-q/x} = 2 \left(\frac{q}{p}\right)^{\alpha/2} K_\alpha(2\sqrt{pq}). \quad (33)$$

(см. [10], формула 3.471.9). В случае высоких температур $T_0 \gg \hbar\omega$ эти выражения можно упростить с учетом разложений функций $K_\alpha(x)$ при $x \rightarrow 0$

$$K_0(x) = \ln x + O(x^0),$$

$$K_1(x) = \frac{1}{x} + O(x \ln x) \quad (34)$$

(см. [10], формулы 8.446, 8.447.3). В результате соотношения (32) дают

$$\lambda_u \approx \frac{16\omega\alpha}{3\sqrt{2\pi}} v^{-\frac{1}{2}},$$

$$\lambda_T \approx \frac{8\omega\alpha}{3\sqrt{2\pi}} v^{\frac{3}{2}} \ln v \quad (T_0 \gg \hbar\omega). \quad (35)$$

Отсюда видно, что при $T_0 \gg \hbar\omega$ скорость электрона u_1 быстро затухает, а его температура T медленно приближается к фоновой T_0 .

Выводы

На основе обобщения метода Чепмена-Энскога в духе метода сокращенного описания удалось понять пределы применимости приближения Ландау в его теории релаксации в двухкомпонентных системах. Вычислено время релаксации скорости и температуры электрона в кристалле. Предложенный метод позволяет изучить нелинейные эффекты в релаксационных явлениях.

Настоящая работа выполнена при поддержке Государственного фонда фундаментальных исследований Украины (грант 2.7 / 418).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

Ландау Л.Д. Кинетическое уравнение в случае кулоновского взаимодействия // ЖЭТФ.-1936.- Т.7 - С.203.

Ахиєзер А. И., Пелетминский С. В. Методы статистической физики. - М.: Наука, 1977, 368 с.

Ферцигер Дж., Капер Г. Математическая теория процессов переноса в газах. - М.: Мир, 1976. - 554 с.

Боголюбов Н.Н. Проблемы динамической теории в статистической физике. - М.-Л.: Гостехиздат, 1946. - 119 с.

Vogolyubov N.N. Kinetic equations for the electron-phonon system // Preprint JINR. - 1978, E17-11822. - 70 p.

Соколовский С.А., Черненко И.М. Кинетическое уравнение для сильно неоднородных состояний электрона в кристалле // Вісник Дніпропетровського університету. Фізика, радіоелектроніка. - 2003, Вип.10. - С.152-159.

Давыдов А.С. Теория твердого тела.- М.: Наука, 1976, 640 с.

Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П. Физическая кинетика. - М.: Наука, 1979. - 528 с.

Александров А.Ф., Богданкевич Л.С., Рухадзе А.А. Основы электродинамики плазмы.- М.: Высшая школа, 1988.- 424 с.

Градштейн И.С., Рыжик И.М. Таблицы интегралов сумм, рядов и произведений,- М.: Наука, 1971.- 1108 с.