

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

A GENERALIZED CHAPMAN-ENSKOG METHOD IN THEORY OF ELECTRON DIFFUSION IN CRYSTAL

Краус Яир
аспирант
Университет имени Бар-Илана
Соколовский Сергей

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

ОБОБЩЕННЫЙ МЕТОД ЧЕПМЕНА-ЭНСКОГА В ТЕОРИИ ДИФФУЗИИ ЭЛЕКТРОНА В КРИСТАЛЛЕ

Summary. Diffusion of an electron in crystal was studied on the base of a kinetic equation obtained without assumption about a weak non-uniformity of state of the system. A generalized Navier-Stokes approximation was developed and a correction for diffusion coefficient was calculated. It was emphasized that weak consistency of the Burnett approximation results in standard approaches with experiment can be related with neglecting by influence of non-uniformity of the system on interaction of its particles. For enough small gradients of parameters, which describe state of the system, contributions of the generalized Navier-Stokes approximation can have a bigger order then the Burnett terms.

Аннотация. Изучена диффузия электрона в кристалле на основе кинетического уравнения, выведенного без предположения о слабой неоднородности состояния системы. Развито обобщенное приближение Навье-Стокса и вычислена поправка к коэффициенту диффузии. Отмечено, что слабая согласованность результатов анализа приближения Барнетта с экспериментом может быть связана с пренебрежением в стандартных подходах влиянием неоднородности системы на взаимодействия ее частиц. При достаточно малых градиентах параметров, описывающих состояние системы, вклады обобщенного приближения Навье-Стокса могут иметь больший порядок, чем барнеттовские члены.

Key words: *strong non-uniform states, generalized Chapman-Enskog method, non-classical polynomials.*

Ключевые слова: *сильно неоднородные состояния, обобщенный метод Чепмена-Энскаго, неклассические полиномы.*

Настоящая работа посвящена кинетике сильно неоднородных состояний электрона в кристалле. При этом в первую очередь имеется в виду учет влияния неоднородности состояния системы на элементарные процессы взаимодействия частиц системы. Исследование этой проблемы осложняется тем, что отсутствуют качественные соображения, которые можно положить в основу рассмотрения. Оно может быть выполнено только в рамках последовательной теории неравновесных процессов, какой является метод сокращенного описания неравновесных процессов Боголюбова (см., например, [1, 2 с.175-196]). В работе рассматривается кинетическое уравнение для электрона в кристалле, взаимодействующего с равновесным фоновым полем. Это уравнение было выведено в работе авторов [3] методом сокращенного описания без предположения о слабой неоднородности состояния электрона, описываемого вигнеровской функцией распределения. Поэтому оно может служить

основой для изучения влияния сильной неоднородности на диффузию электрона в кристалле.

Задача настоящей работы возникла в результате анализа причин малой полезности в приложениях приближения Барнетта в кинетической теории. В литературе отмечалось несколько причин этой ситуации: рассматриваемые в гидродинамике разложения по градиентам являются асимптотическими и учет новых членов разложения скорее всего не улучшит результат [4 с.155]; теория взаимодействующих мод предсказывает наличие в уравнениях гидродинамики членов меньших вкладов Навье-Стокса, но больших вкладов Барнетта [5]. Нами замечено, что имеется еще одна причина, связанная с возможной зависимостью интеграла столкновений от градиентов функции распределения. Впервые такая зависимость фактически была найдена Боголюбовым при выводе им кинетических уравнений Ландау и

Большмана [1]. Однако ее влияние на явления переноса до сих пор не обсуждалась. Более того, продолжают исследования барнеттовских вкладов в уравнения гидродинамики на основе интеграла столкновения пространственно-однородного случая (см., например, [6]).

ИСХОДНЫЕ УРАВНЕНИЯ

$$I_p(x, f) = \frac{1}{4\pi^3 \hbar^2} \int_{-\infty}^0 d\tau \int d^3k g_k^2 \left\{ n_k f_{p-k\hbar} \left(x + \frac{k\hbar}{2m} \tau \right) - (1 + n_k) f_p \left(x - \frac{k\hbar}{2m} \tau \right) \right\} \times \cos \frac{\tau}{\hbar} (\varepsilon_{p-k\hbar} + \hbar\omega_k - \varepsilon_p) + \frac{1}{4\pi^3 \hbar^2} \int_{-\infty}^0 d\tau \int d^3k g_k^2 \left\{ (1 + n_k) f_{p+k\hbar} \left(x - \frac{k\hbar}{2m} \tau \right) - n_k f_p \left(x + \frac{k\hbar}{2m} \tau \right) \right\} \times \cos \frac{\tau}{\hbar} (\varepsilon_p + \hbar\omega_k - \varepsilon_{p+k\hbar}) \quad (2)$$

Здесь n_k – равновесные числа заполнения фононов, p_n – импульс электрона, k – волновой вектор фонона, ε_p – энергия электрона, $\hbar\omega_k$ – энергия фонона, g_k – функция, определяющая интенсивность электрон-фононного взаимодействия

$$n_k = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega_k}{T_0}} - 1}, \varepsilon_p = \frac{p^2}{2m}, g_k \equiv \alpha_k \left(\frac{\hbar}{2\omega_k} \right)^{\frac{1}{2}}$$

(в модели Фрелиха полагают $\omega_k = \omega, \alpha_k = \frac{\lambda}{k}, T_0$ – температура фононного термостата, m – масса электрона). Для того, чтобы сосредоточиться на основной проблеме, полностью пренебрегаем поляризационными и спиновыми эффектами. Кинетическое уравнение (1) справедливо с точностью до членов третьего порядка по константе взаимодействия λ включительно. Оно

$$\partial_t n(x, t) = - \frac{\partial j_i(x, n(t))}{\partial x_i}, j_i(x, n) \equiv \int d^3p \frac{p_i}{m} f_p(x, n). \quad (4)$$

Временное уравнение для $n(x, t)$ (4) и описывает диффузию электрона. Задача заключается в вычислении потока “числа частиц” $j_i(x, n)$ в теории возмущений по градиентам плотности

$$- \int d^3x' \frac{\delta f_p(x, n)}{\delta n(x')} \frac{\partial j_i(x', n)}{\partial x'_i} + \frac{p_i}{m} \frac{\partial f_p(x, n)}{\partial x_i} = I_p(x, f(n)), \quad (6)$$

которое следует решать совместно с соотношением (3). При этом согласно (3) можно считать, что

$$\frac{\partial^s f_p(x, n)}{\partial x_{i_1} \dots \partial x_{i_s}} \sim g^s. \quad (7)$$

Отметим, что эта теория эквивалентна методу Чепмена-Энскога решения кинетического уравнения (1), (2), на что было указано еще Боголюбовым [1].

Кинетическое уравнение для вигнеровской функции распределения электрона $f_p(x, t)$, полученное в работе [3], имеет вид

$$\partial_t f_p(x, t) = - \frac{p_n}{m} \frac{\partial f_p(x, t)}{\partial x_n} + I_p(x, f(t)), \quad (1)$$

где интеграл столкновений $I_p(x, f)$ дается формулой

является обобщением уравнения, полученного в работе [7] для пространственно однородного случая, где изучалась та же самая модель.

Изучим на основе уравнения (1) диффузию электрона в кристалле, при которой его состояние описывается плотностью $n(x, t)$. Согласно функциональной гипотезе Боголюбова (см., например, [1, 2 с.33]), функция распределения электрона имеет при этом структуру $f_p(x, n(t))$, где $f_p(x, n) \equiv f_p(x, n(x'))$ – некоторый функционал от $n(x)$, обладающий свойством

$$n(x) = \int dp f_p(x, n). \quad (3)$$

Интеграл столкновений $I_p(x, f)$, очевидно, приводит к закону сохранения “числа частиц”

$$\frac{\partial^s n(x)}{\partial x_{i_1} \dots \partial x_{i_s}} \sim g^s, g \ll 1. \quad (5)$$

Функционал $f_p(x, n)$ удовлетворяет согласно (1), (4) следующему уравнению

ОБОБЩЕННЫЙ МЕТОД ЧЕПМЕНА-ЭНСКОГА

Будем искать решение уравнения (6) для $f_p(x, n)$ в виде ряда по степеням g

$$f_p(x, n) = f_p^{(0)} + f_p^{(1)} + f_p^{(2)} + O(g^3). \quad (8)$$

Учтем, что интеграл столкновений $I_p(x, f)$ также следует разложить по градиентам

$$I_p(x, f) = I_p^{(0)}(x, f) + I_p^{(1)}(x, f) + I_p^{(2)}(x, f) + O(g^3), \quad (9)$$

представив члены разложения в виде

$$I_p^{(s)}(x, f) = \int d^3p' M_{l_1 \dots l_s}(p, p') \frac{\partial^s f_{p'}(x)}{\partial x_{l_1} \dots \partial x_{l_s}}. \quad (10)$$

В использовании разложения интеграла столкновений по градиентам и состоит наше

$$I_p^{(0)}(x, f) = \frac{1}{4\pi^2 \hbar} \int d^3k g_k^2 \{n_k f_{p-k\hbar}(x) - (1+n_k) f_p(x)\} \delta(\varepsilon_{p-k\hbar} + \hbar\omega_k - \varepsilon_p) + \frac{1}{4\pi^2 \hbar} \int d^3k g_k^2 \{(1+n_k) f_{p+k\hbar}(x) - n_k f_p(x)\} \delta(\varepsilon_p + \hbar\omega_k - \varepsilon_{p+k\hbar}) \quad (11)$$

и обладает обычной бoльцмановской структурой (см. [2 с.233]).

Согласно (3), (6), (8), (9) $f_p^{(0)}(x, n)$ удовлетворяет уравнениям

$$0 = I_p^{(0)}(x, f^{(0)}(n)), \quad n(x) = \int d^3p f_p^{(0)}(x, n). \quad (12)$$

Обычные соображения показывают, что функция $f_p^{(0)}(x, n)$ пропорциональна распределению Максвелла

$$f_p^{(0)}(x, n) = n(x) \phi_p, \quad \phi_p \equiv \frac{1}{(2\pi m T_0)^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{\varepsilon_p}{T}}; \quad \int d^3p' M(p, p') \phi_{p'} = 0. \quad (13)$$

Формула (4) теперь показывает, что соответствующий вклад в поток отсутствует $j_l^{(0)}(x, n) = 0$.

Вклад первого порядка по градиентам $f_p^{(1)}$ в функцию распределения электрона определяется согласно (3), (6), (8), (9) уравнениями

$$\frac{p_l}{m} \frac{\partial f_p^{(0)}}{\partial x_l} = I_p^{(0)}(x, f^{(1)}) + I_p^{(1)}(x, f^{(0)}), \quad 0 = \int d^3p f_p^{(1)}. \quad (14)$$

Соображения вращательной инвариантности показывают, что функция $f_p^{(1)}$ имеет структуру

$$f_p^{(1)} = \phi_p p_l \frac{\partial n}{\partial x_l} A_p, \quad (15)$$

обобщение метода Чепмена - Энскога (см. стандартное изложение метода в [2 с.32-37, 4 с.124-138]). Основной вклад в интеграл столкновений $I_p^{(0)}(x, f)$ дается при этом формулой

где величина A_p является скаляром. Учитывая соотношения (10), (13), приходим к следующим уравнениям для функции A_p

$$\frac{1}{m} \phi_p p_l (1 - \alpha_p) = \int d^3p' M(p, p') \phi_{p'} p'_l A_{p'}, \quad 0 = \int d^3p \phi_p p_l A_p. \quad (16)$$

Сюда входит скалярная величина α_p , которую можно вычислить по формуле

$$\int d^3p' M_l(p, p') \phi_{p'} \equiv \phi_p \alpha_p \frac{p_l}{m}. \quad (17)$$

Функция α_p учитывает в рассматриваемом приближении влияние неоднородности состояния системы на процессы электрон-фононного взаимодействия. При этом второе уравнение в (16) (дополнительное условие) выполняется тождественно. Функция $f_p^{(1)}$ позволяет найти соответствующий вклад в поток "числа частиц" (4)

$$j_l^{(1)} = -D_0 \frac{\partial n}{\partial x_l}, \quad D_0 = - \int d^3p \frac{p^2}{3m} \phi_p A_p. \quad (18)$$

Это выражение имеет вид обычного закона Фика с коэффициентом диффузии D_0 . Функция $f_p^{(1)}$ отвечает обобщенному приближению Навье - Стокса в теории явлений переноса на основе кинетического уравнения (см. [2 с.36, 4 с.149]). Стандартному подходу соответствует пренебрежение в уравнении (16) вкладом функции $\alpha_p \sim \lambda^2$. Поэтому формулы (16), (18) дают поправку к обычному выражению для коэффициента диффузии.

Вклад второго порядка по градиентам $f_p^{(2)}$ в функцию распределения электрона определяется согласно (3), (6), (8), (9) уравнениями

$$-\phi_p \frac{\partial j_l^{(1)}}{\partial x_l} + \frac{p_l}{m} \frac{\partial f_p^{(1)}}{\partial x_l} = I_p^{(0)}(x, f^{(2)}) + I_p^{(1)}(x, f^{(1)}) + I_p^{(2)}(x, f^{(0)}), \quad 0 = \int d^3p f_p^{(2)}. \quad (19)$$

Соображения вращательной инвариантности показывают, что функция $f_p^{(2)}$ имеет структуру

$$f_p^{(2)} = \phi_p (B_p \delta_{ll'} + C_p \Delta_{p,ll'}) \frac{\partial^2 n}{\partial x_l \partial x_{l'}}$$

$$\Delta_{p,ll'} \equiv p_l p_{l'} - \frac{1}{3} p^2 \delta_{ll'}. \quad (20)$$

Здесь B_p, C_p – некоторые скалярные функции, которые являются решениями следующих уравнений

$$\begin{aligned} \phi_p \left(\frac{1}{3m} A_p p^2 - \beta_p + D_0 \right) &= \int d^3 p' M(p, p') \phi_{p'} B_{p'}, \quad 0 = \int d^3 p \phi_p B_p; \\ \phi_p \Delta_{p,ll'} \left(\frac{1}{m} A_p - \gamma_p \right) &= \int d^3 p' M(p, p') \phi_{p'} \Delta_{p',ll'} C_{p'}, \quad 0 = \int d^3 p \phi_p C_p \Delta_{p,ll'}. \end{aligned} \quad (21)$$

Сюда входят коэффициенты, определяемые при анализе предыдущего приближения

$$\frac{1}{2} \int d^3 p' \{ M_l(p, p') p'_{l'} + M_{l'}(p, p') p_l \} \phi_{p'} A_{p'} + \int d^3 p' M_{ll'}(p, p') \phi_{p'} = \phi_p (\beta_p \delta_{ll'} + \gamma_p \Delta_{p,ll'}) \quad (22)$$

Дополнительное условие на функцию C_p в (22) в силу соображений вращательной инвариантности выполнено тождественно. Дополнительное условие на функцию B_p в (22) можно выполнить, выбирая подходящее решение интегрального уравнения (22) для этой функции (согласно (13) B_p определена с точностью до аддитивной постоянной).

Функция $f_p^{(2)}$ отвечает приближению Барнетта в теории явлений переноса на основе кинетического уравнения (см., например, [4 с.149, 6 с.67]). От стандартного подхода наше рассмотрение отличается наличием функций, которые описывают влияние неоднородности состояния электрона на процессы его взаимодействия с фононами. Соображения вращательной инвариантности показывают, что барнеттовские вклады в поток “числа частиц” отсутствуют $j_l^{(2)} = 0$. Следует однако отметить, что при рассмотрении явлений переноса в других системах барнеттовские вклады в общем случае отличны от нуля. При достаточно малых градиентах гидродинамических переменных наши дополнительные вклады в приближение Навье-Стокса могут быть больше обычных барнеттовских вкладов в потоки. Это может быть причиной плохого согласия обычного приближения Барнетта с экспериментом, отмечавшегося в литературе [4 с.155].

НЕКЛАССИЧЕСКИЕ ОРТОГОНАЛЬНЫЕ ПОЛИНОМЫ В РЕШЕНИИ ИНТЕГРАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ МЕТОДА ЧЕПМЕНА-ЭСКОГА

Обобщенный метод Чепмена-Энскога приводит к интегральным уравнениям типа (16), (22), которые не могут быть точно решены. Для их приближенного решения можно использовать метод разложения решения по некоторой системе ортогональных полиномов, широко применяемый в обычной теории [5 с.138-141, 6 с.48-53, 7]. В рамках этого подхода конечно учитываются и дополнительные условия на искомые функции, приведенные в (16), (23). Обсудим здесь только решение интегрального уравнения (16) для A_p , которое можно искать в виде разложения

$$\begin{aligned} A_p &= \sum_{n=0}^{\infty} c_n \phi_n(\alpha p^2) \\ (\alpha &\equiv \frac{1}{2mT_0}), \end{aligned} \quad (23)$$

где $\phi_n(x)$ – полином n -ой степени. Полиномы $\phi_n(x)$ строятся с помощью схемы ортогонализации Грамма-Шмидта, основанной на следующем определении скалярного произведения

$$(\phi_n, \phi_{n'}) \equiv \frac{\alpha^{\frac{3}{2}}}{2\pi} \int d^3 p h(\alpha p^2) \phi_n(\alpha p^2) \phi_{n'}(\alpha p^2) = \int_0^{+\infty} dx x^{\frac{1}{2}} h(x) \phi_n(x) \phi_{n'}(x) = \delta_{nn'} \quad (24)$$

где $h(x)$ – некоторая положительная весовая функция. Таким путем, например, находим первые два полинома

$$\begin{aligned} \phi_0(x) &= \frac{1}{\sqrt{e_0}}, \\ \phi_1(x) &= \frac{x e_0 - e_1}{\sqrt{e_0(e_2 e_0 - e_1^2)}}; \end{aligned}$$

$$e_s \equiv \int_0^{+\infty} dx h(x) x^{s+\frac{1}{2}}. \quad (25)$$

При исследовании интегральных уравнений типа (16), (22) удобно использовать квадратичную форму, связанную с ядром $M(p, p')$, и определяемую формулой

$$\{A, B\} \equiv \{A_p, B_p\} = - \int d^3 p d^3 p' A_p M(p, p') \phi_{p'} B_{p'} \quad (26)$$

(см. [4 с.104, 8 с.49, 9]). Она является положительно определенной формой, так как ее можно привести к виду

$$\{A, B\} = \frac{1}{4\pi^2\hbar} \int d^3 p d^3 k g_k^2 n_k \phi_p (A_p - A_{p+k\hbar})(B_p - B_{p+k\hbar}) \times \delta(\varepsilon_p + \hbar\omega_k - \varepsilon_{p+k\hbar}) \quad (27)$$

Для решения уравнения (16) целесообразно выбрать весовую функцию $h(x)$ в виде

$$h(\alpha p^2) = \phi_p p^2 (1 - \alpha_p), \quad (28)$$

так как после этого из (16), (25), (26) вытекает соотношение

$$\{p_i \phi_n, p_i A_p\} = -\delta_{n,0} \frac{\sqrt{e_0}}{m}. \quad (29)$$

С учетом определения (23) оно дает следующую систему уравнений для коэффициентов c_n

$$\sum_{n'=0}^{\infty} a_{nn'} c_{n'} = \delta_{n,0}, \quad (30)$$

где обозначено

$$a_{nn'} = -\{p_i \phi_n, p_i \phi_{n'}\} \frac{m}{\sqrt{e_0}}. \quad (31)$$

Таким образом, выбор весовой функции $h(x)$ в виде (28) упрощает систему уравнений для коэффициентов разложения (23) искомой функции A_p по построенной системе полиномов.

Разложение (23) позволяет выразить коэффициент диффузии D_0 через решение системы уравнений (30). Например, с точностью до первых двух полиномов получим

$$D_0 = \frac{1}{4m\sqrt{e_0}} \left(c_0 + c_1 \frac{5e_0 - 2e_1}{2\sqrt{e_2 e_0 - e_1^2}} \right), \quad (32)$$

где согласно (30)

$$c_0 = \frac{a_{11}}{a_{00}a_{11} - a_{01}a_{10}}, \quad c_1 = \frac{a_{10}}{a_{01}a_{10} - a_{00}a_{11}}. \quad (33)$$

Таким образом, приближенное решение интегрального уравнения (16) в методе ортогональных полиномов найдено.

Выводы

Учет влияния неоднородности состояния системы на столкновения частиц приводит к естественному обобщению метода Чемпен-Энскога. При достаточно малых градиентах гидродинамических переменных обобщенное приближение Навье-Стокса дает в потоки вклад, превышающий вклад стандартного барнеттовского приближения. Без учета этого нового вклада трудно надеяться на согласие теории и эксперимента.

Настоящая работа выполнена при частичной поддержке фонда INTAS в рамках проекта № 00-577.

Список литературы

1. Боголюбов Н.Н. Проблемы динамической теории в статистической физике. – М.-Л.: Гостехиздат, 1946. – 119 с.
2. Ахиезер А. И., Пелетминский С. В. Методы статистической физики. - М.: Наука, 1977, 368 с.
3. 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.

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

5. Ernst M.H., Dorfman J.R. Nonanalytic dispersion relations for classical fluids. II. The general fluid // Journal of Statistical Physics. – 1974, V.12, No.4. – P.311-359.

6. Sela N., Goldhirsch I. Hydrodynamic equations for rapid flows of smooth inelastic spheres // Journal of Fluid Mechanics- 1998, V.361. - P.41-74.

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

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

9. Беляев Н.Р., Ходусов В.Д. Гидродинамическая теория бозе-квазичастиц. – Харьков: ХНУ, 2003. – 95 с.