Вестник
МОСКОВСКОГО УНИВЕРСИТЕТА
№ 1 — 1964

И. П. БАЗАРОВ

РЕШЕНИЕ КИНЕТИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ А. А. ВЛАСОВА ДЛЯ КРИСТАЛЛА

Дается решение линеаризованного кинетического уравнения А. А. Власова для кристалла при температуре $T=0^\circ$ К, соответствующее представлению об адиабатическом включении бесконечно малого возмущения. Устанавливается, что борновский спектр частот собственных колебаний кристаллической решетки полностью определяется уравнением Власова и является единственным у этого уравнения.

Вариация функции распределения статистической системы $\varphi(\vec{r}, \vec{p}, \vec{t})$ в приближении самосогласованного поля определяется линеаризованным кинетическим уравнением Власова [1]

$$\frac{\partial\varphi}{\partial t} + \frac{1}{m}(\vec{p}, \nabla_r\varphi) - (\nabla_r U_0, \nabla_p\varphi) = (\nabla_r U, \nabla_p f_0), \tag{1}$$

где $f_0(\vec{r}, \vec{p})$ — равновесная функция распределения,

$$U_0(\vec{r}) = \int \Phi(|\vec{r} - \vec{r}'|) f_0(\vec{r}', \vec{p}') d\vec{r}' d\vec{p}',$$

$$U(\vec{r}, t) = \int \Phi(|\vec{r} - \vec{r}'|) \rho(\vec{r}', t) d\vec{r}',$$

$\rho(\vec{r}, t) = \int \varphi(\vec{r}, \vec{p}, t) d\vec{p}$ — вариации плотности числа частиц, $\Phi(|\vec{r} - \vec{r}'|)$ — потенциальная энергия взаимодействия между частицами.

В случае кристалла равновесия функция распределения частиц при температуре $T=0^\circ$К, определяемая из минимума потенциальной энергии системы, выражается функцией

$$f_0(\vec{r}, \vec{p}) = \sum_i \delta(\vec{r} - \vec{r}_i)\,\delta(\vec{p}),$$

так, что $U_0(\vec{r}) = \sum_i \Phi(|\vec{r} - \vec{r}_i|)$ и $\nabla_r U_0(\vec{r}) = 0$ при $\vec{r} = \vec{r}_j$, где $\vec{r}_j$ определяет положение равновесия j-того атома в узле решетки.

Найдем решение уравнения (1), соответствующее представлению об адиабатическом включении бесконечно малого возмущения ($\psi=0$ при $t=-\infty$). Уравнение (1) можно записать в виде

$$\frac{\partial\varphi}{\partial t} + A\varphi = F, \tag{2}$$

где независящий от времени оператор A и функция F равны

$$A = \frac{1}{m}(\vec{p},\ \nabla_r) - (\nabla_r U_0,\ \nabla_p),$$

$$F(t, \vec{r}, \vec{p}) = (\nabla_r U, \nabla_p f_0) = \sum_{i,\alpha} U'_{r\alpha}(t, \vec{r})\, \delta(\vec{r} - \vec{r}_i)\, \delta'_{p\alpha}(\vec{p}).$$

Решение линейного уравнения (2) в символической форме имеет вид

$$\varphi(t, \vec{r}, \vec{p}) = e^{-A(t-t_0)} \varphi(t_0, \vec{r}, \vec{p}) + \int_{t_0}^{t} e^{-A(t-\tau)} F(\tau, \vec{r}, \vec{p})\, d\tau$$

или

$$\varphi(t, \vec{r}, \vec{p}) = S_{-(t-t_0)} \varphi(t_0, \vec{r}, \vec{p}) + \int_{t_0}^{t} S_{-(t-\tau)} F(\tau, \vec{r}, \vec{p})\, d\tau, \tag{3}$$

где

$$S_{-z} = e^{-Az}.$$

Для того чтобы раскрыть смысл оператора $S_{-(t-t_0)}$, рассмотрим однородное уравнение

$$\frac{\partial \varphi_1}{\partial t} + \frac{1}{m}(\vec{p},\ \nabla_r \varphi_1) - (\nabla_r U_0,\ \nabla_p \varphi_1) = 0 \tag{4}$$

или

$$\frac{\partial \varphi_1}{\partial t} + A\varphi_1 = 0. \tag{4a}$$

Решение этого уравнения имеет вид

$$\varphi_1(t, \vec{r}, \vec{p}) = S_{-(t-t_0)} \varphi_1(t_0, \vec{r}, \vec{p}). \tag{5}$$

С другой стороны, уравнение (4) определяет изменение $\varphi_1(t, \vec{r}, \vec{p})$ за счет свободного движения частиц и действия внешних сил $-\nabla_r U_0$. Так что

$$\varphi_1(t, \vec{r}, \vec{p}) = \varphi_1(t_0, \vec{r}_0, \vec{p}_0), \tag{6}$$

а изменение $\vec{r}$ и $\vec{p}$ определяется уравнениями

$$m\frac{d\vec{r}}{dt} = \vec{p}, \quad \frac{d\vec{p}}{dt} = -\nabla_r U_0. \tag{7}$$

Решение этих уравнений дает для $\vec{r}(t)$ и $\vec{p}(t)$ выражения, являющиеся функциями начальных ($t = 0$) координат и импульсов

$$\vec{r}(t) = \vec{R}(t, \vec{r}_0, \vec{p}_0),$$
$$\vec{p}(t) = \vec{N}(t, \vec{r}_0, \vec{p}_0),$$

откуда

$$\vec{r}_0 = \vec{R}(-t, \vec{r}, \vec{p}),$$
$$\vec{p}_0 = \vec{N}(-t, \vec{r}, \vec{p}).$$

Следовательно, согласно (6)

$$\varphi_1(t, \vec{r}, \vec{p}) = \varphi_1(t_0, \vec{R}[-(t-t_0), \vec{r}, \vec{p}]), \vec{N}[-(t-t_0), \vec{r}, \vec{p}]). \tag{8}$$

Сравнивая (5) и (8), находим, что действие оператора $S_{-(t-t_0)}$ на функцию $\varphi_1(t_0, \vec{r}, \vec{p})$ сводится к замене в этой функции аргументов $\vec{r}$ и $\vec{p}$ на $\vec{R}[-(t-t_0), \vec{r}, \vec{p}]$ и $\vec{N}[-(t-t_0), \vec{r}, \vec{p}]$ соответственно.

Таким образом, уравнение (3) можно записать в виде

$$\varphi(t, \vec{r}, \vec{p}) = \varphi(t_0, \vec{R}_{-z_0}, \vec{N}_{-z_0}) + \int_{t_0}^{t} F(\tau, \vec{R}_{-z}, \vec{N}_{-z})\, d\tau,$$

где (9)

$$z_0 = t - t_0, \quad z = t - \tau, \quad \vec{R}_{-z}(t, \vec{r}, \vec{p}) = \vec{R}(-z, \vec{r}, \vec{p}).$$

В соответствии с условием ($\varphi = 0$ при $t_0 = -\infty$) имеем

$$\varphi(t, \vec{r}, \vec{p}) = \int_{-\infty}^{t} F(\tau, \vec{R}_{-z}, \vec{N}_{-z})\, d\tau$$

или

$$\varphi(t, \vec{r}, \vec{p}) = \int_{-\infty}^{t} \sum_{i,\alpha} U'_{r^\alpha}(\tau, \vec{R}_{-z})\, \delta(\vec{R}_{-z} - \vec{r}_i)\, \delta'_{p^\alpha}(\vec{N}_{-z})\, d\tau \tag{10}$$

и

$$\rho(t, \vec{r}) = \int d\vec{p} \int_{-\infty}^{t} \sum_{i,\alpha} U'_{r^\alpha}(\tau, \vec{R}_{-z})\, \delta(\vec{R}_{-z} - \vec{r}_i)\, \delta'_{p^\alpha}(\vec{N}_{-z})\, d\tau. \tag{11}$$

Помножим это уравнение на произвольную функцию координат $h(\vec{r})$ и проинтегрируем его по всему объему.

Мы получим тогда

$$\int \rho(t, \vec{r})\, h(\vec{r})\, d\vec{r} = \int d\vec{r}\, d\vec{p} \int_{-\infty}^{t} d\tau \sum_{i,\alpha} U'_{r^\alpha}(\tau, \vec{R}_{-z})\, \delta(\vec{R}_{-z} - \vec{r}_i)\, \delta'_{p^\alpha}(\vec{N}_{-z})\, h(\vec{r}).$$

Если в правой части этого равенства сделать замену переменных

$$\vec{R}_{-z} \to \vec{r}, \quad \vec{N}_{-z} \to \vec{p} \tag{12}$$

и учесть, что при этом

$$d\vec{R}_{-z}\, d\vec{N}_{-z} = d\vec{r}\, d\vec{p} \quad \text{и} \quad \vec{r} \to \vec{R}_z(t, \vec{r}, \vec{p}),$$

то

$$\int U'_{r^\alpha}(\tau, \vec{R}_{-z})\, \delta(\vec{R}_{-z} - \vec{r}_i)\, \delta'_{p^\alpha}(\vec{N}_{-z})\, h(\vec{r})\, d\vec{r}\, d\vec{p} =$$

$$= \int U'_{r^\alpha}(\tau, \vec{r})\, \delta(\vec{r} - \vec{r}_i)\, \delta'_{p^\alpha}(\vec{p})\, h(\vec{R}_z)\, d\vec{r}\, d\vec{p} = -U'_{r^\alpha}(\tau, \vec{r}_i) \left(\frac{\partial h(\vec{R}_z)}{\partial p^\alpha} \right)_{\substack{\vec{r} = \vec{r}_i \\ \vec{p} = 0}}$$

и

$$\int \rho(t, \vec{r})\, h(\vec{r})\, d\vec{r} = -\int_{-\infty}^{t} \sum_{i,\alpha} U'_{r^\alpha}(\tau, \vec{r}_i) \left(\frac{\partial h(\vec{R}_z)}{\partial p^\alpha} \right)_{\substack{\vec{r} = \vec{r}_i \\ \vec{p} = 0}} d\tau. \tag{13}$$

Для движения частиц под действием силы $-\nabla_r U_0$ при адиабатическом включении бесконечно малого возмущения из (7) получаем уравнения:

$$m\frac{dq^\alpha}{dt} = p^\alpha, \quad \frac{dp^\alpha}{dt} = -\sum_\beta B_{\alpha\beta} q^\beta, \tag{14}$$

где

$$\vec{q} = \vec{r} - \vec{r}_l, \quad B_{\alpha\beta} = \sum_l \frac{\partial^2 \Phi(|\vec{r}_l - \vec{r}_l|)}{\partial r_l^\alpha \, \partial r_l^\beta}.$$

Отсюда видно, что самосогласованная сила $-\nabla_r U_0$ не приводит к малым колебаниям частиц кристалла около положений равновесия. Решение линейной системы (14) может быть записано в виде

$$q^\alpha(t, \vec{q}_0, \vec{p}_0) = \sum_\beta U_{\alpha\beta}(t)\, q_0^\beta + \sum_\beta V_{\alpha\beta}(t)\, p_0^\beta,$$

где

$$U_{\alpha\beta}(0) = \delta_{\alpha\beta}, \quad \frac{dU_{\alpha\beta}(0)}{dt} = 0,$$

$$V_{\alpha\beta}(0) = 0, \quad \frac{dV_{\alpha\beta}(0)}{dt} = \frac{1}{m}\delta_{\alpha\beta}, \tag{15}$$

так что

$$m\frac{d^2 V_{\alpha\beta}(t)}{dt^2} = -\sum_\gamma B_{\alpha\gamma} V_{\gamma\beta}(t), \tag{16}$$

$$\begin{aligned} R_z^\alpha &= r_l^\alpha + q_z^\alpha = r_l^\alpha + \sum_\beta U_{\alpha\beta}(t-\tau)(r^\beta - r_l^\beta) + \sum_\beta V_{\alpha\beta}(t-\tau)\, p^\beta, \\ N_z^\alpha &= p_z^\alpha = \sum_\beta \dot{U}_{\alpha\beta}(t-\tau)(r^\beta - r_l^\beta) + \sum_\beta \dot{V}_{\alpha\beta}(t-\tau)\, p^\beta \end{aligned} \tag{17}$$

и

$$\left(\frac{\partial h(\vec{R}_z)}{\partial p^\alpha}\right)_{\substack{\vec{r}=\vec{r}_l \\ \vec{p}=0}} = \sum_\beta \left(\frac{\partial h(\vec{R}_z)}{\partial R_z^\beta}\right)_{\substack{\vec{r}=\vec{r}_l \\ \vec{p}=0}} V_{\alpha\beta}(t-\tau) = \sum_\beta h'_{r\beta}(\vec{r}_l)\, V_{\alpha\beta}(t-\tau).$$

Поэтому уравнение (13) принимает вид

$$\int \rho(t, \vec{r})\, h(\vec{r})\, d\vec{r} = -\int_{-\infty}^{t} \sum_{l,\alpha,\beta} U'_{r\alpha}(\tau, \vec{r}_l)\, V_{\alpha\beta}(t-\tau)\, h'_{r\beta}(\vec{r}_l)\, d\tau,$$

откуда вариация плотности равна

$$\rho(t, \vec{r}) = \sum_{l,\alpha} Q_l^\alpha(t) \frac{\partial \delta(\vec{r} - \vec{r}_l)}{\partial r^\alpha} = \sum_l (\vec{Q}_l, \nabla_r \delta(\vec{r} - \vec{r}_l)), \tag{18}$$

где

$$Q_l^\alpha(t) = \int_{-\infty}^{t} \sum_\beta U'_{r\beta}(\tau, \vec{r}_l)\, V_{\alpha\beta}(t-\tau)\, d\tau. \tag{19}$$

Для того чтобы выяснить смысл величины $\vec{Q}_i$, дважды продифференцируем (19) по времени. Учитывая (15), (16) и (18), получим

$$\frac{d^2 Q_i^\alpha}{dt^2} = -\frac{1}{m}\sum_\beta B_{\alpha\beta} Q_i^\beta + \frac{1}{m} U'_{r\alpha}(t, \vec{r}_i),$$

и так как

$$U(t, \vec{r}_i) = \int \Phi(|\vec{r}_i - \vec{r}'|)\,\rho(\vec{r}', t)\, d\vec{r}' =$$

$$= \sum_{j,\beta} Q_j^\beta \int \Phi(|\vec{r}_i - \vec{r}'|)\frac{\partial\delta(\vec{r}' - \vec{r}_j)}{\partial r'^\beta}\, d\vec{r}' = \sum_{j,\beta} Q_j^\beta \frac{\partial\Phi(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|)}{\partial r_i^\beta},$$

$$m\frac{d^2\vec{Q}_i}{dt^2} = \nabla_{r_i}\sum_j (\nabla_{r_i}\Phi(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|),\ \vec{Q}_j - \vec{Q}_i),$$

что представляет собой уравнение малых колебаний частиц кристаллической решетки [2], так что

$$\vec{r}_i(t) = \vec{r}_i + \vec{Q}_i(t).$$

Поскольку вариация плотности (18) является линейной функцией $\vec{Q}_i$, то, следовательно, и она колеблется с теми же частотами.

Таким образом, борновский спектр частот собственных колебаний кристаллической решетки полностью определяется кинетическим уравнением Власова (1) и является единственным спектром этого уравнения.

Найдем теперь функцию $\varphi(t, \vec{r}, \vec{p})$, определяемую уравнением (1).

Для этого помножим уравнение (10) на произвольную функцию $h(\vec{r}, \vec{p})$ и проинтегрируем его по всему фазовому объему. Мы получим тогда

$$\int \varphi(t, \vec{r}, \vec{p})\, h(\vec{r}, \vec{p})\, d\vec{r}\, d\vec{p} =$$

$$= \int d\vec{r}\, d\vec{p} \int_{-\infty}^{t} d\tau \sum_{i,\alpha} U'_{r\alpha}(\tau, \vec{R}_{-z})\,\delta(\vec{R}_{-z} - \vec{r}_i)\,\delta'_{p^\alpha}(\vec{N}_{-z})\, h(\vec{r}, \vec{p}). \tag{20}$$

После замены переменных (12) с учетом (17) правая часть уравнения (20) приводится к виду

$$\int d\vec{r}\, d\vec{p} \int_{-\infty}^{t} d\tau \sum_{i,\alpha} U'_{r\alpha}(\tau, \vec{r})\,\delta(\vec{r} - \vec{r}_i)\,\delta'_{p^\alpha}(\vec{p})\, h(\vec{R}_z, \vec{N}_z) =$$

$$= \int_{-\infty}^{t} \sum_{i,\alpha} U'_{r\alpha}(\tau, \vec{r}_i)\left(\frac{\partial h(\vec{R}_z, \vec{N}_z)}{\partial p^\alpha}\right)_{\substack{\vec{r} = \vec{r}_i \\ \vec{p} = 0}} d\tau =$$

$$= \int_{-\infty}^{t} \sum_{i,\alpha} U'_{r\alpha}(\tau, \vec{r}_i) \sum_{\beta} \left\{ \frac{\partial h(\vec{R}_z, \vec{N}_z)}{\partial R_z^{\beta}} \frac{\partial R_z^{\beta}}{\partial p^{\beta}} + \frac{\partial h(\vec{R}_z, \vec{N}_z)}{\partial N_z^{\beta}} \frac{\partial N_z^{\beta}}{\partial p^{\alpha}} \right\}_{\substack{\vec{r}=\vec{r}_i \\ \vec{p}=0}} d\tau =$$

$$= \int_{-\infty}^{t} \sum_{i,\alpha,\beta} U'_{r\alpha}(\tau, \vec{r}_i) \{h'_{r\beta}(\vec{r}_i, 0) V_{\alpha\beta}(t-\tau) + h'_{p\beta}(\vec{r}_i, 0) \dot{V}_{\alpha\beta}(t-\tau)\} d\tau.$$

Поэтому уравнение (20) будет

$$\int \varphi(t, \vec{r}, \vec{p}) h(\vec{r}, \vec{p}) d\vec{r} d\vec{p} =$$

$$= \int_{-\infty}^{t} \sum_{i,\alpha,\beta} U'_{r\alpha}(\tau, \vec{r}_i) \{h'_{r\beta}(\vec{r}_i, 0) V_{\alpha\beta}(t-\tau) + h'_{p\beta}(\vec{r}_i, 0) \dot{V}_{\alpha\beta}(t-\tau)\} d\tau. \quad (21)$$

Отсюда для $\varphi(t, \vec{r}, \vec{p})$ получаем выражение

$$\varphi(t, \vec{r}, \vec{p}) = -\sum_i (\vec{Q}_i, \nabla_r \delta(\vec{r} - \vec{r}_i)) \delta(\vec{p}) - \sum_i (\vec{P}_i, \nabla_p \delta(\vec{p}|) \delta(\vec{r} - \vec{r}_i), \quad (22)$$

где

$$Q_i^{\beta}(t) = \int_{-\infty}^{t} \sum_{\alpha} U'_{r\alpha}(\tau, \vec{r}_i) V_{\alpha\beta}(t-\tau) d\tau \quad (23)$$

и

$$P_i^{\beta}(t) = m \int_{-\infty}^{t} \sum_{\alpha} U'_{r\alpha}(\tau, \vec{r}_i) \dot{V}_{\alpha\beta}(t-\tau) d\tau. \quad (24)$$

Дифференцируя (21) и (22) по времени, получаем

$$m \frac{d\vec{Q}_i}{dt} = \vec{P}_i, \quad \frac{d\vec{P}_i}{dt} = \nabla_{r_i} \sum_j \left(\nabla_{r_i} \Phi(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|), \vec{Q}_j - \vec{Q}_i \right), \quad (25)$$

т. е. уравнения малых колебаний частиц кристалла [2].

Таким образом, решением кинетического уравнения Власова (1) для кристалла при $T = 0$°K и адиабатическом включении бесконечно малого возмущения является выражение (22), в котором $\vec{Q}_i$ и $\vec{P}_i$ определяются уравнениями (25).

Пользуюсь случаем выразить благодарность акад. Н. Н. Боголюбову за обсуждение настоящей статьи и ценные замечания.

ЛИТЕРАТУРА

1. Власов А. А. Теория многих частиц. ГИТТЛ, М., 1950.
2. Борн М., Гёпперт-Мейер М. Теория твердого тела. ГИТТЛ, М., 1938.

Поступила в редакцию
19. 3 1963 г.

Кафедра
статистической физики и механики