

Physical Kinetics

Yury Holubeu *

October 19, 2025

This note is not intended for distribution. Kinetics is discussed in detail. Links below show the contents of [solved problems](#), summary of [special topics](#). Readers who have opened this note for the first time are highly recommended to read the preface.

Contents

Preface and main motivation	18
I — Typical Kinetics in a Nutshell —	20
1 Typical Models and Phenomena	20
1.1 General Models of Kinetics	20
1.1.1 Brownian Motion, Diffusion, Langevin Equation	20
1.1.2 Fokker-Plank equation	22
1.1.3 Boltzmann Equation	23
1.1.4 Random Processes: Main Template Models	25
1.1.5 Linear Response and FDT: Basics	26
1.2 Kinetics of gases and liquids	26
1.2.1 Kinetic in Hydrodynamics: Main Parameters and Laws	26
1.2.2 Kinetic in Hydrodynamics: Advanced Properties	29
1.2.3 Diffusion Phenomena in Gases	29
1.2.4 Fluctuations in gases	33
1.2.5 Reactions, Chemical Kinetics	34
1.3 Kinetics in condensed matter	34
1.3.1 Kinetics of phonons: basic	34
1.3.2 Kinetics of phonons: well-known effects	39
1.3.3 Deformation waves, sound	40
1.3.4 Heat transport	43
1.3.5 Overview of Kinetic Phenomena with Electrons	43
1.3.6 Kinetics of Electrons: Basic Laws	43
1.3.7 Kinetics of electrons: well-known electric and magnetic effects	44
1.4 Kinetics in electrodynamics	46
1.4.1 Collisionless Plasma	46
1.4.2 Collisions in Plasma by Landau	48
1.5 Basics of quantum kinetics	48
1.5.1 Lindblad equation	48
1.5.2 Kinetics for quantum optics: basic models	49
1.5.3 Green's functions, Keldysh method	49
1.5.4 Driven-Dissipative Systems	50
1.5.5 Typical Phenomena of Quantum Kinetics	51
1.5.6 Main Models of Quantum Kinetics	51
1.5.7 Spin Models with Dissipation: Main Methods and Examples	53
1.6 Mathematics for Kinetics	54
1.7 Physics for Kinetics	56
1.8 Main General Properties and Abstract Theory	56
1.8.1 Thermalization: Overview	56
1.8.2 H-theorem, General Properties	56
II — Special Kinetics in a Nutshell —	59

*<https://yuriholubeu.github.io/>, yuri.holubev@gmail.com

2	Fundamentals of kinetics: details	59
2.1	Other Proofs of Known Fundamental Equations and Their Modifications	59
3	Other Properties of Typical Models	60
3.1	Kinetics of gases and liquids: details	60
3.2	Kinetics in condensed matter: details	60
3.2.1	Kinetics of phonons: other models	60
3.2.2	Determination of Structural Properties of Materials through Elastic Scattering	60
3.3	Kinetics in electrodynamics: details	61
3.3.1	Plasma in Magnetic Field by Landau	61
3.3.2	Kinetics in electrons in metals: other properties and effects	62
3.3.3	Kinetics in superconductors	62
3.4	Basics of quantum kinetics: details	62
3.5	Fluctuations: Other Models	62
4	Special Models and Effects	62
4.1	Special models of classical kinetics	62
4.1.1	Special random processes	62
4.1.2	Theory of Instabilities by Landau	64
4.2	Special kinetics of condensed matter systems	64
4.2.1	Other Kinetics in Collisionless Plasma by Landau	64
4.2.2	Kinetics in Fermi liquid	64
4.2.3	Kinetics of Bose Condensates	64
4.2.4	Special kinetic phenomena in metals	64
4.2.5	Dynamics of Disordered Superconductors	65
4.3	Kinetics for Climate and Phenomena in Nature	65
4.4	Special abstract models	65
4.4.1	Kinetics of Phase Transitions by Landau	65
4.4.2	Phase Synchronization	66
4.4.3	Nucleation (????)	67
4.5	Kinetics of spin models	67
4.5.1	Quantum Quenches	67
4.5.2	Eigenstate Thermalization of Spin Models: Extra Properties	67
4.5.3	Quantum Chaos	67
4.5.4	tGGE Method	67
4.6	Kinetics of Biological and Living Systems	68
4.6.1	Nonequilibrium Physics in Living Systems	68
4.7	Other Applications (????)	68
4.7.1	Kinetics of polymers (!!???)	68
4.7.2	Kinetics in cosmology (???)	68
III	Fundamental Kinetic Laws and Equations	69
5	Fundamental Laws of Kinetics	69
5.1	Basics of Construction of Kinetic Theories and Their Solutions	69
5.1.1	Philosophy Underlying Physical Kinetics	69
5.1.2	Detailed Balance	69
5.1.3	Langevin equation: fundamentals, basic processes	72
5.1.4	Boltzmann H-theorem on Non-Decreasing Entropy	75
5.1.5	Random Forces	78
5.1.6	Approach by Classical Mechanics and BBKY hierarchy	78
5.2	Kinetics in scope of Random Processes: Fundamentals	78
5.2.1	Diffusion coefficients, correlators	78

5.2.2	Problem of First Hit of the Boundary	78
5.3	I Equations of Kinetic Theory of Gases by Landau	78
5.3.1	§1. The distribution function	78
5.3.2	§2. The principle of detailed balancing	81
5.3.3	§3. The Boltzmann transport equation	84
5.3.4	§4. The H theorem	87
5.3.5	§5. The change to macroscopic equations	88
5.3.6	§6. The transport equation for a slightly inhomogeneous gas	91
5.4	Boltzmann Equation	95
5.4.1	Meaning and General Properties of the Boltzmann Equation	95
5.4.2	BBGKY Hierarchy	102
5.4.3	Boltzmann Equation in the τ -Approximation	107
5.4.4	Other about the Boltzmann Equation	110
5.4.5	Collision Integral	110
5.4.6	Symmetry of Kinetic Coefficients and Onsager's Principle	113
5.4.7	Method of Moments (???)	117
5.4.8	Vlasov Equation	125
5.4.9	Transition to Macroscopic Equations	126
5.5	Thermalization: Basics	129
5.5.1	General Understanding of Thermalization 1	129
5.5.2	General Understanding of Thermalization 2	130
5.5.3	Overview of Models of Thermalization	130
6	Fundamental Laws of Kinetics for Non-physical Systems	130
6.1	General Ideas about Applications of Kinetics	130
6.2	Exact Applications or Attempts of Application of Kinetics	130
6.2.1	Does Kinetics Work for Dynamics of Society?	130
6.2.2	Does Kinetics Work for Dynamics of Animal Evolution?	130
7	Diffusion Approximation and Models	130
7.1	Diffusion and Brownian Motion: Basics	130
7.1.1	Overview of Parameters of Brownian Motion	130
7.1.2	Fokker–Planck Equation (!!!)	138
7.1.3	Kinetic Equation for a Weakly Inhomogeneous Gas	144
7.1.4	Random Walk of a Particle: Jump Diffusion	148
7.1.5	Typical Brownian Motion	149
7.1.6	Brownian Motion by Kolokolov (???)	150
7.1.7	Other about the Fokker–Planck Equation (?)	151
7.1.8	Derivation of Einstein Relation and Smolukhovsky equation	151
7.1.9	Hydrodynamic Limit of the Fokker–Planck Equation	162
7.1.10	Weakly Ionized Gas in an Electric Field	164
7.1.11	Fluctuations in a Weakly Ionized Nonequilibrium Gas	168
7.1.12	Overview of Applications of Brownian Motion and Similar Models	168
7.2	Diffusion and Brownian Motion: Advanced Effects	168
7.2.1	Recombination and Ionization	168
7.2.2	Overview of Other Mathematical Models of Diffusion	172
7.2.3	Applications of Diffusion in Programming	172
7.2.4	Brownian Trees	173
7.3	Hydrodynamic Limit	173
7.3.1	Hydrodynamic Equations: Derivation	173
7.3.2	Overview of Navier–Stokes Equations	181
7.3.3	Typical Transformations of Navier–Stokes Equations	183
7.3.4	Thermal Conductivity of Gases	183
7.3.5	Viscosity of Gases	186

8	Lectures on Kinetics by Maksimov	189
8.1	Kinetic Theory of Gases by Maksimov	189
8.1.1	1.1. The Boltzmann Equation	189
8.1.2	1.2. Limits of Applicability of Boltzmann Eq. for Molecular Gases	193
8.1.3	1.3. Properties of the Collision Integral	195
8.1.4	1.4. The Principle of Detailed Equilibrium	200
8.1.5	1.5. Transfer Equations (Grad Equations), Derivation of Hydrodynamics	202
8.1.6	1.6. τ -Approximation and Maxwell-Boltzmann Distribution	205
8.1.7	1.7. Calculation of Viscosity in τ Approximation by Grad Method	207
8.1.8	1.8. Calculation of Thermal Conductivity Coefficients in the τ Approximation	210
8.1.9	1.9. Linearization of the Boltzmann Equation	212
8.1.10	1.10. The Left Side of the Kinetic Equation	213
8.1.11	1.12. Calculation of Viscosity by the Chapman-Enskog Method	217
8.1.12	1.13. Derivation of the Chapman-Enskog Method	219
8.1.13	1.14. A One-Moment Approximation	221
8.1.14	1.15. Calculation of Thermal Conductivity	223
8.1.15	1.16. Transfer Phenomena in Gas Maxwellian Molecules	225
8.2	Kinetics of Crystal Systems by Maksimov	228
8.2.1	2.1. Crystal Lattice Vibrations	228
8.2.2	2.2. Kinetic Equation for Phonons. Thermal Conductivity of Dielectrics	230
8.2.3	2.3. Dependence of Thermal Conductivity of Dielectrics on T	232
8.2.4	2.4. Transfer Phenomena in Metals. Electrical Conductivity	234
8.2.5	2.5. Dependence of the Transfer Coefficients in Metals on Temperature	240
8.2.6	2.6. Residual Resistance	243
8.3	Kinetics of Amorphous Systems by Maksimov	244
8.3.1	3.1. Tunnel Model	246
8.3.2	3.2. The Interaction of Two Level System with Phonons	247
8.3.3	3.3. Single - Phonon Relaxation of Two Level System	250
8.3.4	3.4. Phonon Relaxation on Two Level System	251
8.3.5	3.5. Low-Temperature Thermal Conductivity of Amorphous Systems	252
8.3.6	3.6. Time Dependence of the Heat Capacity of Amorphous Systems	253
8.3.7	3.7. Saturation of Resonant Absorption	254
8.3.8	3.8. The Dielectric Constant of Amorphous Systems	255
8.3.9	3.9. Jump Conduction	256
8.3.10	3.10. Mott's Law	257
8.3.11	3.11. The Coulomb Gap	258
8.3.12	3.12. The Efros-Shklovskii Law	259
8.4	Linear Response Theory by Maksimov	260
8.4.1	4.1. The Density Matrix	260
8.4.2	4.2. Response to Mechanical Disturbance	261
8.4.3	4.3. Two-Time Delayed Functions of Green and FDT	263
8.4.4	4.4. Response to an Electric Field. Electrical Conductivity	265
8.4.5	4.5. Brownian Motion	268
8.4.6	4.6. Bloch Equations and Electron Paramagnetic Resonance	270
8.5	Kinetic Phenomena in Plasma by Maksimov	274
8.5.1	5.1. The Vlasov Equation	274
8.5.2	5.2. The Equilibrium Solution of the Vlasov Equation	275
8.5.3	5.3. Solution of the Linearized Vlasov Equation	277
8.5.4	5.4. Plasma Oscillations	279
8.5.5	5.5. The Physical Meaning of the Plasma's Own Oscillations	280
8.5.6	5.6. Landau Attenuation	281
8.5.7	5.7. The Condition of Applicability of the Linearized Vlasov Equation	284
8.5.8	5.8. Beam Instability in Plasma	285

8.5.9	5.9. Calculation of the Dielectric Constant of a Plasma in the Diffusion	288

IV Fundamentals of Quantum Kinetics 292

9	Quantum master equations	292
9.1	Density Matrix	292
9.2	3.1 General Concepts of Closed and Open Quantum Systems	292
9.3	3.2 Quantum Markov processes	299
9.3.1	3.2.1 Quantum dynamical semigroups	299
9.3.2	3.2.2 The Markovian quantum master equation	300
9.3.3	Physical Origin of Lindblad Operators	305
9.3.4	How to Chose Lindblad Operators for a Particular Dissipation	305
9.3.5	Lindblad Operators: Other Properties	305
9.3.6	3.2.3 The adjoint quantum master equation	305
9.3.7	3.2.4 Multi-time correlation functions	306
9.3.8	3.2.5 Irreversibility and entropy production	308
9.4	3.3 Microscopic derivations	310
9.4.1	3.3.1 Weak-coupling Limit	310
9.4.2	3.3.2 Relaxation to equilibrium	315
9.4.3	3.3.3 Singular-coupling limit	316
9.4.4	3.3.4 Low-density limit	317
9.4.5	General Important Features of Microscopic Quantum Kinetics	319
9.5	10. The Density Matrix. Relaxation of Quantum Systems by Kolokolov	319
9.5.1	10.1. The Formalism of the Density Matrix	319
9.5.2	10.2. Equation for the Density Matrix in the Interaction Representation	320
9.5.3	10.3. Relaxation Equation	321
9.5.4	10.4. The Linear Response of the System. Kubo's Formula	326
9.5.5	10.5. Quantum Corrections to Conductivity	327
9.6	Creation of Models from Microscopic Ideas	329
9.6.1	Creation of open spin models	329
9.6.2	Creation of open superconductive models	329
9.6.3	Creation of other open models	330
9.7	3.4 The quantum optical master equation	330
9.7.1	3.4.1 Matter in quantized radiation fields	330
9.7.2	3.4.2 Decay of a two-level system	334
9.7.3	3.4.3 Decay into a squeezed field vacuum	336
9.7.4	3.4.4 More general reservoirs	339
9.7.5	3.4.5 Resonance fluorescence	340
9.7.6	3.4.6 The damped harmonic oscillator	346
9.7.7	3.4.6.3 Coherent state representation	347
9.7.8	Open two-level system, Lasers, Bloch's equations	350
9.8	3.5 Non-selective, continuous measurements	360
9.8.1	3.5.1 The quantum Zeno effect	360
9.8.2	3.5.2 Density matrix equation	361
9.9	3.6 Quantum Brownian motion	364
9.9.1	3.6.1 The Caldeira-Leggett model	365
9.9.2	3.6.2 High-temperature master equation	366
9.9.3	3.6.3 The exact Heisenberg equations of motion	373
9.9.4	3.6.3.4 Response function, equilibrium correlation function and the FDT	378
9.9.5	3.6.4 The influence functional	381
9.9.6	Caldeira-Leggett Model: Explanation 2	388
9.10	3.7 Non-linear quantum master equations	393
9.10.1	3.7.1 Quantum Boltzmann equation	394

9.10.2	3.7.2 Mean field master equations	395
9.10.3	3.7.3 Mean field laser equations	397
9.10.4	3.7.4 Non-linear Schrödinger equation	399
9.10.5	3.7.5 Super-radiance	401
10	Basic models of quantum kinetics	405
10.1	Kubo's Linear Response	405
10.2	Green's Function Method for Kinetics	406
10.3	Kinetics of Fermi Liquid	406
10.3.1	Reminder: What Is Fermi Liquid?	406
10.3.2	Zero Sound	413
11	Basics of Field Theory of Non-Equilibrium Systems by Kamenev	416
11.1	Introduction	416
11.1.1	1.1 Closed Time Contour	416
11.1.2	1.2 Brief Outline of the Book	420
11.1.3	How Field Theory is Used in Kinetics?	421
11.2	Bosons	422
11.2.1	2.1 Bosonic Coherent States	422
11.2.2	2.2 Partition Function	423
11.2.3	2.3 Bosonic Gaussian Integrals	425
11.2.4	2.4 Normalization and Continuum Notation	426
11.2.5	2.5 Green Functions	427
11.2.6	2.6 Keldysh Rotation	429
11.2.7	2.7 Keldysh Action and Its Structure	432
11.2.8	2.8 Nonlinear Interactions	433
11.2.9	2.9 External Sources	434
11.2.10	2.10 Problems	438
11.3	Single-Particle Quantum Mechanics	439
11.3.1	3.1 Harmonic Oscillator	439
11.3.2	3.2 Quantum Particle in Contact with an Environment	441
11.3.3	3.3 From Matsubara to Keldysh	443
11.3.4	3.4 Quantum Tunneling in a Time-Dependent Potential	444
11.3.5	3.5 Dissipative Quantum Tunneling	447
11.3.6	3.6 Problems	450
11.4	Classical Stochastic Systems	451
11.4.1	4.1 Classical Dissipative Action	451
11.4.2	4.2 Langevin Equation	452
11.4.3	4.3 Multiplicative Noise and Martin-Siggia-Rose Method	453
11.4.4	4.4 Optimal Path Approximation	455
11.4.5	4.5 Fokker-Planck Equation	458
11.4.6	4.6 Ito versus Stratonovich	461
11.4.7	4.7 Noise with a Finite Correlation Time	463
11.4.8	4.8 Kramers Problem	464
11.4.9	4.9 Counting Statistics: Donsker-Varadhan Theory and Beyond	465
11.4.10	4.10 Fluctuation Relation	468
11.4.11	4.11 Reaction Models	470
11.4.12	4.12 Time-Dependent Problems	474
11.4.13	4.13 Large Deviations in Multivariable Systems	476
11.4.14	4.14 Problems	478
11.5	Driven-Dissipative Systems	479
11.5.1	5.1 Rotating-Wave Approximation	479
11.5.2	5.2 Lindblad Equation	482
11.5.3	5.3 From Keldysh to Lindblad	483

11.5.4	5.4 Linear Systems	486
11.5.5	5.5 Quantum Heating	490
11.5.6	5.6 Quantum Activation	492
11.5.7	5.7 Dark Space	497
11.5.8	5.8 Symmetries of Dissipative Evolution	499
11.5.9	5.9 Lindbladian Instantons	501
11.5.10	5.10 Optomechanical Cooling	504
11.5.11	5.11 Problems	505
12	Relatively Well-known Models of Non-Equilibrium Systems by Kamenev	506
12.1	Bosonic Fields	506
12.1.1	6.1 Complex Bosonic Fields	507
12.1.2	6.2 Interactions	508
12.1.3	6.3 Dyson Equation	510
12.1.4	6.4 Real Bosonic Fields	512
12.1.5	6.5 Self-Energy	514
12.1.6	6.6 Wigner Transformation	515
12.1.7	6.7 Kinetic Term	517
12.1.8	6.8 Collision Integral	519
12.1.9	6.9 Problems	522
12.2	Dynamics of Collisionless Plasma	522
12.2.1	7.1 Plasma Action	523
12.2.2	7.2 Plasmons and Landau Damping	525
12.2.3	7.3 Acoustic Modes in Plasma	527
12.2.4	7.4 Random Phase Approximation	528
12.2.5	7.5 Beyond Linearized Dynamics	531
12.2.6	7.6 Nonlinear Landau Damping	534
12.2.7	7.7 Problems	536
12.3	Kinetics of Bose Condensates	536
12.3.1	8.1 Gross-Pitaevskii Equation	536
12.3.2	8.2 Quasiparticles	538
12.3.3	8.3 Collisionless Relaxation of the Condensate Fluctuations	543
12.3.4	8.4 Condensate Growth and Collapse	545
12.3.5	8.5 Fluctuations	548
12.3.6	8.6 Semiclassical Dynamics of the Condensate	551
12.3.7	8.7 Quasiparticle Collision Integral	553
12.3.8	8.8 Dynamics of a Quantum Impurity in a Superfluid	556
12.3.9	8.9 Problems	559
12.4	Dynamics of Phase Transitions	562
12.4.1	9.1 Dissipative Chains and Membranes	563
12.4.2	9.2 Equilibrium Statistical Mechanics	564
12.4.3	9.3 Critical Nucleation in First-Order Transitions	565
12.4.4	9.4 Dynamics Near a Classical Second-Order Transition	568
12.4.5	9.5 Hohenberg-Halperin Classification	572
12.4.6	9.6 Quantum Phase Transitions	574
12.4.7	9.7 Absorbing State Transitions	577
12.4.8	9.7.0.1 Directed Percolation	579
12.4.9	9.7.0.2 Other Universality Classes of Reaction-Diffusion Models	581
12.4.10	9.8 KPZ Dynamics of Growing Interfaces	585
12.4.11	9.9 Large Deviations in Stochastic Systems	589
12.4.12	9.10 Problems	593
12.5	Fermions	594
12.5.1	10.1 Grassmann Variables and Integrals	595
12.5.2	10.2 Partition Function	597

12.5.3	10.3 Green Functions and Keldysh Rotation	598
12.5.4	10.4 Free Fermionic Fields and Their Action	601
12.5.5	10.5 External Fields and Sources	601
12.5.6	10.6 Free Degenerate Fermi Gas	605
12.5.7	10.7 Interactions	606
12.5.8	10.8 Stoner Instability	609
12.5.9	10.9 Problems	611
12.6	Kinetic Theory and Hydrodynamics	616
12.6.1	11.1 Kinetic Equation	616
12.6.2	11.2 Hydrodynamics of the Fermi Liquid	619
12.6.3	11.3 Hydrodynamic Modes	623
12.6.4	11.4 Magnetization Dynamics	624
12.6.5	11.5 Problems	626
12.7	Aspects of Kinetic Theory	627
12.7.1	12.1 Kinetic Equation in Presence of the Berry Curvature	627
12.7.2	12.2 Floquet Kinetic Theory	630
12.7.3	12.3 Kinetic Equation as a Stationary Point of the $\hat{G} - \hat{\Sigma}$ Action	633
12.7.4	12.4 Boltzmann-Langevin Kinetic Equation	635
12.7.5	12.5 The Butterfly Effect and OTOC	638
12.7.6	12.6 Problems	641
13	Special Non-Equilibrium Systems in Condensed Mater by Kamenev	644
13.1	Quantum Transport	644
13.1.1	13.1 Landauer Formula	644
13.1.2	13.2 Shot Noise	646
13.1.3	13.3 Counting Statistics	648
13.1.4	13.4 Fluctuation Relation	652
13.1.5	13.5 Adiabatic Pumping	653
13.1.6	13.6 Spin Torque	655
13.1.7	13.7 Problems	661
13.2	Disordered Fermionic Systems	663
13.2.1	14.1 Kinetic Equation Approach	664
13.2.2	14.2 Averaging over the Quenched Disorder	667
13.2.3	14.3 Nonlinear Sigma-Model	669
13.2.4	14.4 Stationary Point and Fluctuations	672
13.2.5	14.5 Sources and External Fields	675
13.2.6	14.6 Kubo Formula and Linear Response	677
13.2.7	14.7 Cooper Channel	678
13.2.8	14.8 Weak Localization and Scaling	680
13.2.9	14.9 Time-Dependent Perturbations	683
13.2.10	14.10 Problems	685
13.3	Mesoscopic Effects	687
13.3.1	15.1 Spectral Statistics	687
13.3.2	15.2 Wigner-Dyson Statistics	690
13.3.3	15.3 Universal Conductance Fluctuations	692
13.3.4	15.4 Full Counting Statistics in a Disordered Wire	695
13.3.5	15.5 Tunneling Action	698
13.3.6	15.6 Chaotic Cavity	700
13.3.7	15.7 Problems	702
13.4	Electron-Electron Interactions in Disordered Metals	703
13.4.1	16.1 K-Gauge	703
13.4.2	16.2 Nonlinear Sigma-Model for Interacting Systems	705
13.4.3	16.3 Zero Bias Anomaly	707
13.4.4	16.4 Altshuler-Aronov Effect	710

13.4.5	16.5 Kinetic Equation	712
13.4.6	16.6 Problems	715
13.5	Dynamics of Disordered Superconductors	717
13.5.1	17.1 Cooper Channel Interactions	717
13.5.2	17.2 Usadel Equation	719
13.5.3	17.3 Stationary Superconductivity	722
13.5.4	17.4 SNS System	724
13.5.5	17.5 Collective Modes of Disordered Superconductors	727
13.5.6	17.6 Time-Dependent Ginzburg-Landau Theory	732
13.5.7	17.7 Fluctuating Superconductivity	739
13.5.8	17.8 Problems	741
13.6	Electron-Phonon Interactions	744
13.6.1	18.1 Phonon Action and Propagators	744
13.6.2	18.2 Fröhlich and Pippard Electron-Phonon Interactions	745
13.6.3	18.3 Nonlinear Sigma-Model for Electron-Phonon Interactions	747
13.6.4	18.4 Electron Kinetics in Normal Metals	748
13.6.5	18.5 Kinetics of Quasiparticles in Superconductors	751
13.6.6	18.6 Phonon Kinetics	753
13.6.7	18.7 Ultrasound Attenuation	755
13.6.8	18.8 Problems	757
14	Nonequilibrium dynamics of closed interacting systems by Polkovnikov et al.	761
14.1	Nearly adiabatic dynamics in quantum systems	764
14.1.1	Universality in a nutshell	764
14.1.2	Universal dynamics near quantum critical points	765
14.1.3	Slow dynamics in gapped and gapless systems.	771
14.1.4	Effects of finite temperature.	773
14.1.5	Open problems	774
14.2	Effects of Integrability and its breaking: ergodicity and thermalization.	774
14.2.1	Quantum and classical ergodicity.	775
14.2.2	Nonergodic behavior in integrable systems: the generalized Gibbs ensemble	776
14.2.3	Breaking integrability: eigenstate thermalization.	781
14.2.4	Outlook and open problems	783
14.3	Experimental progress in quantum dynamics in cold atoms and other systems	785
V	Kinetics of Gases, Liquids and Plasma	791
15	Main Models	791
15.1	I Kinetic Theory of Gases by Landau	791
15.1.1	§7. Thermal conduction in the gas	791
15.1.2	§8. Viscosity in the gas	793
15.1.3	§9. Symmetry of the kinetic coefficients	796
15.1.4	§10. Approximate solution of the transport equation	799
15.1.5	§11. Diffusion of a light gas in a heavy gas	804
15.1.6	§12. Diffusion of a heavy gas in a light gas	807
15.1.7	§13. Transport phenomena in a gas in an external field	809
15.1.8	§14. Phenomena in slightly rarefied gases	814
15.1.9	§15. Phenomena in highly rarefied gases	822
15.1.10	§16. Dynamical derivation of the transport equation	832
15.1.11	§17. The transport equation including three-particle collisions	836
15.1.12	§18. The virial expansion of the kinetic coefficients	841
15.1.13	§19. Fluctuations of the distribution function in an equilibrium gas	843
15.1.14	§20. Fluctuations of the distribution function in a non-equilibrium gas	847

15.2	II The Diffusion Approximation by Landau	850
15.2.1	§21. The Fokker-Planck equation	850
15.2.2	§22. A weakly ionized gas in an electric field	854
15.2.3	§23. Fluctuations in a weakly ionized non-equilibrium gas	858
15.2.4	§24. Recombination and ionization	862
15.2.5	§25. Ambipolar diffusion	865
15.2.6	§26. Ion mobility in solutions of strong electrolytes	867
15.3	III Collisionless Plasma by Landau	872
15.3.1	§27. The self-consistent field	872
15.3.2	§28. Spatial dispersion in plasmas	875
15.3.3	§29. The permittivity of a collisionless plasma	878
15.3.4	§30. Landau damping	880
15.3.5	§31. Permittivity of a Maxwellian plasma	883
15.3.6	§32. Longitudinal plasma waves	888
15.3.7	§33. Ion-sound waves	891
15.3.8	§34. Relaxation of the initial perturbation	892
15.3.9	§35. Plasma echoes	896
15.3.10	§36. Adiabatic electron capture	900
15.3.11	§37. Quasi-neutral plasmas	903
15.3.12	§38. Fluid theory for a two-temperature plasma	905
15.3.13	§39. Solitons in a weakly dispersing medium	907
15.3.14	§40. Permittivity of a degenerate collisionless plasma	913
15.4	IV Collisions in Plasma by Landau	918
15.4.1	§41. The Landau Collision Integral	918
15.4.2	§42. Energy transfer between electrons and ions	923
15.4.3	§43. Mean Free Path of Plasma Particles	925
15.4.4	§44. Lorentzian plasmas	926
15.4.5	§45. Runaway electrons	930
15.4.6	§46. Convergent collision integrals	932
15.4.7	§47. Interaction via plasma waves	941
15.4.8	§48. Plasma absorption in the high-frequency limit	944
15.4.9	§49. Quasi-linear theory of Landau damping	946
15.4.10	§50. The transport equation for a relativistic plasma	951
15.4.11	§51. Fluctuations in plasmas	955
15.5	V Plasma in Magnetic Field by Landau	962
15.5.1	§52. Permittivity of a collisionless cold plasma	962
15.5.2	§53. The distribution function in a magnetic field	965
15.5.3	§54. Permittivity of a magnetoactive Maxwellian plasma	968
15.5.4	§55. Landau damping in magnetoactive plasmas	970
15.5.5	§56. Electromagnetic waves in a magnetoactive cold plasma	975
15.5.6	§57. Effect of thermal motion on EM wave propagation in magnetoactive plasmas	980
15.5.7	§58. Equations of fluid dynamics in a magnetoactive plasma	983
15.5.8	§59. Transport coefficients of a plasma in a strong magnetic field	986
15.5.9	§60. The drift approximation	995
15.6	VI Instability Theory by Landau	1003
15.6.1	§61. Beam instability	1003
15.6.2	§62. Absolute and convective instabilities	1006
15.6.3	§63. Amplification and non-transparency	1010
15.6.4	§64. Instability with weak coupling of two branches of spectrum	1013
15.6.5	§65. Instability in finite systems	1016
15.7	Typical Hydrodynamic Models	1019
15.7.1	Transport and Mixing in Random Flows	1019
15.8	Nonequilibrium Plasma	1021

15.8.1	Overview of Plasma Kinetics	1021
15.8.2	Fermi Liquid Theory for Plasma	1023
15.8.3	Dielectric Permittivity and Susceptibility of Plasma	1026
15.8.4	Spectrum and Damping	1031
15.8.5	Typical Model of Plasma Oscillations	1034
15.8.6	Overview of Applications of Plasma Kinetics	1039
16	Other about Plasma	1039
VI	Kinetics in Solid State Physics	1040
17	Typical Phenomena in Solid State Physics	1040
17.1	VII Insulators by Landau	1040
17.1.1	§66. Interaction of phonons	1040
17.1.2	§67. The transport equation for phonons in an insulator	1043
17.1.3	§68. Thermal conduction in insulators. High temperatures	1047
17.1.4	§69. Thermal conduction in insulators. Low temperatures	1051
17.1.5	§70. Phonon scattering by impurities	1054
17.1.6	§71. Phonon gas dynamics in insulators	1055
17.1.7	§72. Sound absorption in insulators. Long waves	1057
17.1.8	§73. Sound absorption in insulators. Short waves	1061
17.2	VIII Quantum Liquids by Landau	1063
17.2.1	§74. Transport equation for quasi-particles in a Fermi liquid	1063
17.2.2	§75. Thermal conductivity and viscosity of a Fermi liquid	1068
17.2.3	§76. Sound absorption in a Fermi liquid ‡	1070
17.2.4	§77. Transport equation for quasi-particles in a Bose liquid	1073
17.3	Typical Kinetic Phenomena with Electrons	1077
17.3.1	Parameters Used for Description of Electric Phenomena	1077
17.3.2	Drude Model	1078
17.3.3	Kinetic Equations for Electrons in Material	1078
17.3.4	Scattering on Random Potential	1079
17.3.5	Ohm's Law and $\rho_{\alpha\beta}(\omega, B)$	1079
17.3.6	Diffusion and Lorentz Model [see Arovas]	1082
17.3.7	Magnetoresistance and Hall Effect	1086
17.3.8	одномерное рассеяние и отражение	1086
17.4	Other Well-known Kinetic Phenomena with Electrons	1089
17.4.1	Scattering of Screened Electrons (???)	1089
17.4.2	Hall Effect in High Fields	1091
17.4.3	Collision of Electrons and Consequences	1093
17.4.4	Hall Effect	1093
17.5	Thermoelectric Effects	1093
17.5.1	General Properties and Parameters of Thermoelectric Effects	1093
17.5.2	Kinetic Equations for Thermoelectric Effects	1094
17.5.3	Thermoelectric Effects in Semiconductors	1099
17.5.4	Seebeck effect $\mathcal{E} = Q\nabla T$	1102
17.5.5	Peltier effect $\mathbf{j}_q = \Pi \mathbf{j}$	1102
17.5.6	Thomson effect $\mathbf{j}_q = -\kappa \nabla T$	1103
17.6	Phonons by Fominov	1103
17.6.1	Phonon Spectrum	1103
17.6.2	Dielectric Permittivity	1107
17.6.3	Theory of Elasticity for Acoustic Vibrations	1111
17.6.4	Anharmonicity and Thermal Expansion	1114
17.6.5	Quantization of Phonons	1115

17.6.6	Scattering of Sound on Impurities	1118
17.6.7	Kinetics of the Phonon Gas	1119
17.6.8	Phonon Interactions	1122
17.6.9	Temperature Dependence of Lattice Thermal Conductivity at $T < T_D$	1129
17.6.10	Scattering of Phonons on Impurities	1132
17.6.11	Second Sound	1133
17.6.12	Scattering Methods	1135
17.6.13	Electron–Phonon Interaction [see Kamenev!!]	1139
17.6.14	Кинетика других электромагнитных явлений	1144
17.7	Kinetics of Dielectrics	1144
17.8	Kinetics of Semiconductors	1144
17.9	Quantum Transport: Basics	1144
17.9.1	Theory of Kinetics by Arovas [I'll add later]	1145
17.9.2	Quantum Transport: Basics	1145
17.9.3	Examples of Semiconductors	1148
17.9.4	Quantum electron transport	1148
17.10	IX Metals by Landau	1157
17.10.1	§78. Residual resistance	1157
17.10.2	§79. Electron-phonon interaction	1162
17.10.3	§80. Transport coefficients in metals. High temperatures	1165
17.10.4	§81. Umklapp processes in metals	1168
17.10.5	§82. Transport coefficients in metals. Low temperatures	1171
17.10.6	§83. Electron diffusion on the Fermi surface	1177
17.10.7	§84. Galvanomagnetic phenomena in strong fields. General theory	1181
17.10.8	§86. Anomalous skin effect	1189
17.10.9	§87. Skin effect in the infra-red range	1196
17.10.10	§88. Helicon waves in metals	1198
17.10.11	§89. Magnetoplasma waves in metals	1201
17.10.12	§90. Quantum oscillations of the conductivity of metals in a magnetic field	1202
17.11	X The Diagrammatic Technique for Non-equilibrium Systems by Landau	1209
17.11.1	§91. The Matsubara susceptibility	1209
17.11.2	§92. Green's functions for a non-equilibrium system	1212
17.11.3	§93. The diagram technique for non-equilibrium systems	1217
17.11.4	§94. Self-energy functions	1222
17.11.5	§95. The transport equation in the diagram technique	1225
17.12	XI Superconductors by Landau	1228
17.12.1	§96. High-frequency properties of superconductors. General formula	1228
17.12.2	§97. High-frequency properties of superconductors. Limiting cases	1234
17.12.3	§98. Thermal conductivity of superconductors	1238

VII Problems in Kinetics

1240

18 Problems about well-known phenomena

1240

18.1	Problems about general models of kinetics, gases, liquids	1240
18.1.1	Problems about Langevin equation and random processes	1240
18.1.2	Problems about Main Laws of Kinetics	1250
18.1.3	Problems about Kinetics of Quantum Gases	1251
18.1.4	Problems about Kinetics in Hydrodynamics	1251
18.2	Problems about Kinetics of Solids	1253
18.2.1	Problems about Typical Kinetics of Electrons	1253
18.2.2	Problems about Kinetics of Magnetic Materials 1	1262
18.2.3	Problems about Kinetics of Magnetic Materials 2	1268
18.2.4	Problems about Kinetics in Metals and in Normal Fermi Liquid	1272

18.2.5	Problems about Kinetic Coefficients 1	1282
18.2.6	Problems about Kinetic Coefficients 2	1289
18.2.7	Problems about Mott Variable-Range Hopping Conductivity	1301
18.2.8	Problems about Kinetics of Phonons in Dielectrics	1307
18.2.9	Problems about Kinetics of Normal and Superfluid Liquids	1309
18.2.10	Problems about Sound Vibrations and Dissipation	1311
18.2.11	Problems about Collisionless Plasma 1	1317
18.3	Problems about Quantum Kinetics	1325
18.3.1	Problems about tunneling and quantum nucleation	1325
18.3.2	Problems about Transformations of Lindblad Equation	1343
18.3.3	Problems about Very Specific Models of Quantum Kinetics	1352
19	Other problems of kinetics	1352
19.1	Problems about kinetics of special systems	1352
19.1.1	Problems about Kinetics of Neutrons	1352
19.1.2	Problems about Keldysh Technique	1355
19.1.3	Problems about Synchronization	1368
19.1.4	Problems about nucleation and bubbles	1372
19.1.5	Problems about Kinetics of Polymers	1372
19.2	Problems about mathematical preparation to typical kinetics	1378
19.3	Problems about mathematical preparation to special kinetics	1378
VIII	Other Topics and Special Methods	1379
20	Special Kinetics by Kolokolov, Obrazovsky, Podvilov	1379
20.1	1. Classical Waves in Continuous Media	1379
20.1.1	1.1. The Hamiltonian Formalism for Nonlinear Waves	1379
20.1.2	1.2. Example: Sound	1381
20.2	2. The Derivation of the Kinetic Equation by Kolokolov	1384
20.2.1	2.1. The Quantum Kinetic Equation	1384
20.2.2	2.2. The Classic Approach	1388
20.2.3	2.3. Algebraic Approach	1389
20.2.4	2.4. The Diagrammatic Approach	1391
20.3	3. A Small Deviation from Thermal Equilibrium by Kolokolov	1393
20.3.1	3.1. The H-Theorem and Thermal Equilibrium	1393
20.3.2	3.2. Sound Attenuation	1394
20.4	4. Fluxes and Kolmogorov Spectra by Kolokolov	1395
20.4.1	4.1. Stationary Solution of the Kinetic Equation	1395
20.4.2	4.2. Crosslinking with Pumping	1399
20.4.3	4.3. Convergence of the Collision Integral	1399
20.5	5. The Kolmogorov Spectrum in Hydrodynamic Turbulence by Kolokolov	1400
20.5.1	5.1. The Kolmogorov Ratio "4/5"	1403
20.5.2	5.2. Reverse Cascade of Energy in Two-Dimensional Turbulence	1405
20.6	6. Langevin and Fokker-Planck Equations by Kolokolov	1408
20.6.1	6.1. Derivation of the Fokker-Planck Equation	1408
20.6.2	6.2. The Hydrodynamic Limit of the Fokker Planck Equation	1410
20.7	Seminars by Kolokolov 1	1412
20.7.1	1. Nonlinear Waves on the Water Surface	1412
20.7.2	2. Nonlinear Spin Waves	1416
20.7.3	3. Attenuation of Spin Waves	1420
20.7.4	2. Attenuation of Spin Waves near the Decay Threshold	1422
20.7.5	4. Kolmogorov Wave Turbulence Spectra	1423
20.7.6	5. The Langevin Equation for a Polymer Chain	1425

20.7.7	6. Neutron Deceleration	1432
20.7.8	7. Smolukhovsky Equation for Polar Liquids	1437
20.8	Seminars by Kolokolov 2	1438
20.8.1	8. Evolution of a Globular Cluster of Stars	1438
20.8.2	9. Teapot Theory	1441
20.8.3	10. The Glauber Model	1446
20.8.4	11. The Decay of the Metastable Phase	1449
20.8.5	12. Quantum Methods for Describing Reaction Kinetics	1451
20.8.6	13. Description of Magnetic Resonance by the Density Matrix Method	1458
21	Exotic Models of Quantum Kinetics	1461
21.0.1	Quantum Gas that Hits a Wall (???)	1461
22	Phase Transitions and Nucleation (??)	1461
22.1	Basics of Phase Transitions	1462
22.2	7. Kinetics of Phase Transitions of the 1st Kind by Kolokolov	1462
22.2.1	7.1. Zeldovich's Theory	1462
22.2.2	7.2. Qualitative Results of the Lifshitz-Slezov Theory	1465
22.2.3	7.3. Direct "Interaction" of Embryos	1467
22.2.4	7.4. Kinetics of Free Coagulation	1468
22.3	8. Kinetics of Phase Transitions of the 2nd Kind by Kolokolov	1469
22.3.1	8.1. The Fluctuation-Dissipative Theorem	1470
22.3.2	8.2. The Growth Rate of the Embryos of the New Phase	1473
22.3.3	8.3. Sound Attenuation near the Critical Point	1476
22.3.4	9. Methods of Quantum Theory for Describing Reaction Kinetics	1477
22.4	XII Kinetics of Phase Transitions	1487
22.4.1	§99. Kinetics of first-order phase transitions. Nucleation	1487
22.4.2	§100. Kinetics of first-order phase transitions. Coalescence	1492
22.4.3	§101. Relaxation of the order parameter near a second-order phase transition	1497
22.4.4	§102. Dynamical scale invariance	1499
22.4.5	§103. Relaxation in liquid helium near the λ -point	1501
22.5	Other Kinetics of Phase Transitions	1504
22.5.1	Theory of Boiling Water in a Cattle (???)	1504
23	Kinetics of Biological and Living Systems	1504
24	Statistics of extrema of some random 1D landscapes by Doussal, Monthus	1504
24.1	Introduction	1505
24.1.1	Overview	1505
24.1.2	Definition and properties of the toy model	1505
24.1.3	Applications of the toy model	1507
24.1.4	Goal and Results	1509
24.2	Renormalization procedure for an arbitrary 1D landscape	1511
24.2.1	Initial landscape	1512
24.2.2	Construction of the renormalized landscape	1512
24.2.3	Markovian landscapes and Block-product measures	1514
24.3	Explicit Solutions for a class of models	1516
24.3.1	Soluble models	1516
24.3.2	Properties of the blocks for a Schrodinger measure	1517
24.3.3	Explicit solution via a path-integral approach	1518
24.3.4	Explicit solution from the RSRG equations	1518
24.4	Statistics of extrema in the toy model	1520
24.4.1	Blocks of the toy model in terms of Airy functions	1520
24.4.2	Normalization of the full Measure for the renormalized landscape	1521

24.4.3	Alternative expression of the full measure using barriers	1522
24.4.4	Full measure using barriers for free boundary conditions	1522
24.4.5	Full measure using barriers on the infinite line	1523
24.5	Boltzmann equilibrium at low temperatures of the toy model	1524
24.5.1	Distribution of the position at zero temperature	1524
24.5.2	Moments of the position at zero temperature	1525
24.5.3	Joint distribution of position and energy at zero temperature	1526
24.5.4	Samples presenting nearly degenerate minima, thermal fluctuations at low T . .	1527
24.6	Non-equilibrium dynamics of the toy model	1530
24.6.1	Distribution over samples of the equilibration time	1531
24.6.2	Rare configurations with anomalously large equilibration times	1533
24.6.3	Probability density of minima in the renormalized landscape	1535
24.7	Diffusion front	1537
24.8	Results for stationary landscapes	1539
24.8.1	Explicit expressions for the blocks	1539
24.8.2	Normalization of the full measure	1541
24.8.3	Example: Brownian landscape with drift	1541
24.8.4	Some further examples	1542
24.8.5	An example with a long-ranged constraint: Positive Brownian landscape . . .	1543
24.9	Appendixes	1544
24.9.1	Explicit construction of the measure for renormalized landscape	1544
24.9.2	Renormalization procedure for periodic landscape	1546
24.9.3	Derivation of the explicit solutions for a Schrodinger measure	1547
24.9.4	Configurations presenting two nearly degenerate minima	1551
24.9.5	Study of two valleys configurations in the toy model	1552
24.9.6	Useful properties of Airy functions	1553
25	Exotic Kinetic Effects and Models	1553
25.1	Kinetics of Magnetic Liquids (???)	1553
25.1.1	Dynamo theory	1553
25.1.2	Magnetic Dynamo	1553
25.2	Other Special Effects in Solids	1554
25.2.1	Kinetics of Plasma in Graphene	1554
25.2.2	Weak Localization (????)	1555
25.3	Reaction-Diffusion	1557
25.4	Phase Synchronization	1557
25.4.1	Typical Models of Phase Synchronization	1557
25.4.2	Other about Phase Synchronization (??)	1566
25.5	Percolation Theory (!???)	1567
25.6	Kinetics of Polymers (??)	1567
25.6.1	Freely-jointed chain model	1567
25.6.2	Rouse Model	1568
25.6.3	Polymers and Ideal Random Chains by Kleinert	1573
26	Applications of Kinetics	1574
26.1	Diffusion in AI	1574
26.2	Specific Aerodynamics	1574
26.2.1	Некоторые темы	1574
26.3	Weather and Climate (???)	1574
26.3.1	Simple Models of Weather (??)	1574
26.3.2	Models of Climate Change	1574
26.3.3	Models of Melting of the Ice	1574
26.4	Nuclear Reactions	1574
26.4.1	Замедление нейтронов	1574

26.5	Cosmology	1575
26.5.1	Cosmological Kinetic Equations	1575
26.6	Applications to Mathematics (??)	1575
26.7	Finances	1575
26.7.1	Stocks	1575
26.7.2	Risk Management	1576
26.8	Sociology, Games, Wars	1576

IX Appendix 1577

A	Preface and main motivation	1577
A.1	Extra Motivation	1577
A.2	The Mindset of Professionals	1577
A.2.1	Essence of the Subject	1577
A.2.2	Ways to Guess Some Key Ideas	1577
A.2.3	Features of Effective Learning	1577
A.2.4	21st century answers to questions of 17th century scientists	1578
A.2.5	What Kinetics Tells Us about Condensed Matter?	1578
A.3	The Mindset of Professionals: Advanced Topics	1578
A.3.1	Overview of Results and Applications	1578
A.3.2	Currently Unsolved Problems of Kinetics	1578
A.4	Acknowledgements	1578
A.5	Literature	1578
A.5.1	Main Literature	1578
A.5.2	Professional Literature	1579
A.5.3	Extra Literature	1580
A.6	General Overview of Kinetics	1582
A.6.1	Popular Introduction to Kinetics	1582
A.6.2	Overview of Real Non-Physical Applications	1582
A.6.3	Which Phenomena Are There in Kinetics?	1582
A.6.4	What is Going On in Quantum Kinetics?	1582
A.6.5	Connection of Kinetics with Other Parts of Physics	1583
A.6.6	Connection of Kinetics with Other Parts of Science	1583
A.7	Short Historical Overview	1583
A.8	Description of the Note	1584
A.8.1	General Description of the Note	1584
A.8.2	Notation	1584
A.8.3	Constants	1584
A.9	Puzzles for Different Situations	1584
A.9.1	Puzzles for Interesting Discussion	1584
A.9.2	Puzzles About Everyday Life	1584
A.9.3	Selected Fun Typical Problems	1584
A.9.4	Principal Puzzles	1585
B	Some Mathematics for Kinetics	1585
B.1	Random Processes and Probability Theory	1585
B.1.1	Random Processes	1585
B.1.2	Correlations, Averaging	1587
B.1.3	Measure Theory	1588
B.1.4	Markov Chain	1588
B.2	Numerical Methods	1588
B.3	Other Mathematics	1592
B.3.1	PDE for Kinetics	1592

B.3.2	Some Special Functions	1592
B.3.3	Path Integral for Kinetics (???)	1592
C	Some Physics for Kinetics	1592
D	Modeling in Kinetics	1593
D.1	Methods of Modelings	1593
D.2	Examples of Modelings	1593
D.2.1	Modeling of Diffusion	1593
D.2.2	Modeling of Reaction Diffusion	1593
D.2.3	Overview of Artistic Modeling Using Kinetics (???)	1593
E	Bibliography	1594

Preface and main motivation



Fundamental Kinetic Laws and Equations

Fundamentals of Quantum Kinetics

Models of Kinetics

Kinetics in Solid State Physics

Other Topics and Special Methods

I used the following [literature](#).

Let's discuss some minimum knowledge and motivation that would be good to understand for studying physical kinetics.

Idea of the note in a nutshell

(I'll write very shortly the main idea of this approach later)

Фундаментальность и необычности кинетических явлений

(потом раскрою)

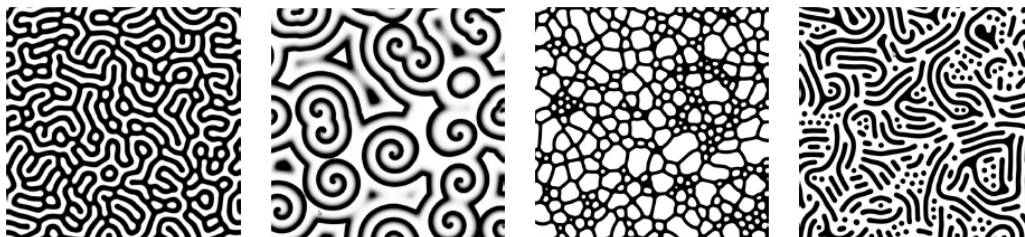
Множество приложений

Укажем приложения

(потом раскрою)

Результаты

Обсудим, что полезного и важного человечество получило, поняв этот предмет.



(доучу когда-то ур р дифф, напишу потом)

Идейные головоломки для мотивации

Как вообще описывать квантовые неравновесные процессы?

(распишу, на самом деле, для ответа на этот вопросы мы и открываем именно кинетику)

Образование пузырьков при фазовом переходе

(основа в записи про фазовые переходы, тут применяем эту теорию)

Как закипает вода в чайнике?

(там большая теория какая-то, потом додумаю, что-то тут не тривиально все... там со звуком - типичный вопрос, почему он то есть, то нет, то потом снова есть в этом процессе? большой пока вопрос для меня.)

Технические головоломки для мотивации

Какая сила воздействия ферми частиц на стенку?

Вот допустим есть ферми-газ, в нем движется стенка. С какой силой газ будет на нее воздействовать? (!!!!!!!)

(честно, вообще не готов к этой задаче.)

(коротко напишу суть)

Part I

Typical Kinetics in a Nutshell

1 Typical Models and Phenomena

1.1 General Models of Kinetics

1.1.1 Brownian Motion, Diffusion, Langevin Equation

Параметры броуновского движения

(??? which are they)

Время корреляции:

$$C(\tau) := \langle \vec{v}(0) \vec{v}(\tau) \rangle \quad (\text{автокорр. ф. скорости})$$

$$\tau_c := \frac{\int_0^{+\infty} d\tau C(\tau)}{C(0)} \quad (\text{Время коррел. скорости})$$

Коэффициент диффузии:

$$D := \frac{1}{3} \int_0^{+\infty} dt \langle \vec{v}(0) \vec{v}(t) \rangle \quad (\text{ф. Грина-Кубо})$$

Density of particles:

$$n(\vec{r}; t) := \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} e^{i\vec{q}\vec{r}} \langle e^{-i\vec{q}(\vec{r})} \rangle$$

(????)

Langevin equation

Уравнение Ланжевена имеет вид:

$$\frac{d\vec{r}(t)}{dt} = \mu \vec{f}(\vec{r}, t) + \vec{\xi}(t)$$

$$\langle \xi_\alpha(t) \rangle = 0, \quad \langle \xi_\alpha(t_1) \xi_\beta(t_2) \rangle = 2D \delta_{\alpha\beta} \delta(t_1 - t_2)$$

Example:

$$\langle r^2(t) \rangle = 6Dt, \quad \langle \Delta r^2 \rangle = 6D\Delta t. \quad (\text{dim}=3)$$

Example:

$$\frac{d\vec{r}(t)}{dt} = \mu \vec{f}(\vec{r}(t), t) + \vec{\xi}(t),$$

$$\sigma_\xi^2 := 2D/\tau_c. \quad (\text{dispersion})$$

$$\langle \xi_\alpha(0) \xi_\beta(t) \rangle = 2D \delta_{\alpha\beta} \delta(t).$$

$$C(t) = \sigma_\xi^2 \left(1 - \frac{|t|}{\tau_c} \right) I(|t| < \tau_c)$$

Hints for working with Langevin equation and examples

We can separate интеграл на сумму, а дальше экспоненту от суммы представляем в виде произведений. Example:

$$\vec{r}(t) = \vec{r}(0) + \sum_{i=1}^{t/\Delta t} \Delta \vec{r}_i; \quad \int_0^t \xi(t') dt' = \sum_{l=0}^{t/\tau_c} \xi(l\tau_c).$$

$$\langle e^{-i\vec{q}\vec{r}(t)} \rangle \approx e^{-i\vec{q}\vec{r}(0) - q^2 Dt}$$

$$\langle r^2(t) \rangle = 6Dt$$

$$\langle \Delta r^2 \rangle = 6D\Delta t.$$

$$\begin{aligned} \langle e^{-i\vec{q}\vec{r}(t)} \rangle &= \left\langle e^{-i\vec{q}\left(\vec{r}(0) + \sum_{i=1}^{t/\Delta t} \Delta \vec{r}_i\right)} \right\rangle = e^{-i\vec{q}\vec{r}(0)} \langle e^{-i\vec{q}\Delta \vec{r}} \rangle^{t/\Delta t} = \\ &= e^{-i\vec{q}\vec{r}(0)} \left(1 - \frac{q^2 \langle (\Delta r)^2 \rangle}{6}\right)^{\frac{t}{\Delta t}} = e^{-i\vec{q}\vec{r}(0)} (1 - q^2 D \Delta t)^{\frac{t}{\Delta t}} \approx e^{-i\vec{q}\vec{r}(0) - q^2 Dt} \end{aligned}$$

(???)

Example:

$$\langle \vec{v}(t) \rangle = \mu \vec{f}, \quad \mu - \text{ПОДВИЖНОСТЬ}$$

среднее находится модификацией известной формулы переходом в другую систему отсчета и обратно:

$$n(\vec{r}; t) = \frac{1}{(4\pi Dt)^{3/2}} e^{-\frac{(\vec{r} - \vec{r}(0) - \mu \vec{f}t)^2}{4Dt}}$$

Example:

$$\frac{dx(t)}{dt} = -\mu k x(t) + \xi(t) \quad \langle \xi(t_1) \xi(t_2) \rangle = 2D\delta(t_1 - t_2)$$

$$x(t) = x(0)e^{-\mu kt} + e^{-\mu kt} \int_0^t dt' e^{\mu kt'} \xi(t') \quad (\text{пр. Орнштейна-Уленбека})$$

$$\langle x(t) \rangle = x(0)e^{-\mu kt},$$

$$\langle x^2(t) \rangle = x^2(0)e^{-2\mu kt} + e^{-2\mu kt} \int_0^t \int_0^t dt_1 dt_2 e^{\mu k(t_1+t_2)} \langle \xi(t_1) \xi(t_2) \rangle = x^2(0)e^{-2\mu kt} + \frac{D}{\mu k} (1 - e^{-2\mu kt}).$$

Langevin equation from Burmistrov

Представим решение линейного уравнения в виде свертки

$$x(t) = \int_{-\infty}^t \alpha(t - \tau) f(\tau) d\tau \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \alpha_R(t - \tau) f(\tau) d\tau, \quad \alpha_R(t) = \alpha(t) \vartheta(t)$$

Функцию α называют восприимчивостью или линейным откликом на силу f . Мы ограничиваем верхний предел интегрирования моментом времени t , чтобы удовлетворить принцип причинности, когда на движение частицы в момент времени t может оказать влияние силы, которые действовали только в предшествующие моменты времени $\tau \leq t$. Функция $\alpha_R(t)$, тождественно равная нулю при $t < 0$, называется запаздывающим откликом.

Фурье-компонента запаздывающего отклика

$$\alpha_R(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \alpha_R(t) e^{i\omega t} dt = \int_0^{\infty} \alpha_R(t) e^{i\omega t} dt$$

как функция комплексной переменной $\omega = \omega' + i\omega''$ аналитична в верхней полуплоскости Π^+ ($\omega'' > 0$), т.е. не имеет особенностей, в силу того, что интеграл $\int_0^{\infty} \alpha_R(t) e^{i\omega' t} e^{-\omega'' t} dt$ абсолютно сходится при $\omega'' > 0$.

Диффузионные методы по Любшину

Диффузия невзаимодействующих непроницаемых частиц на прямой, закон $t^{1/4}$.

Вычисление Левитта.

Зависимость асимптотики на больших временах от начального распределения.

Время первого прохождения и связанные с ним характеристики броуновского движения с дрейфом.

Принцип отражения, распределение Леви, теорема Чанга-Феллера.

Статистики экстремумов гауссовых процессов.

Toy model и её физические реализации.

Точные результаты (по Monthus, le Doussal 2003).

Главная часть асимптотики в общем случае (по Huesler, Piterbarg 1999).

1.1.2 Fokker-Plank equation

Основные свойства ур. Фоккера-Планка

(?? idea)

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}(A(x, t)f(x, t)) + \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{B(x, t)}{2}\frac{\partial}{\partial x}f(x, t)\right)$$

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

Proof.

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

$$w(\mathbf{p} + \mathbf{q}, \mathbf{q})f(t, \mathbf{p} + \mathbf{q}) \approx w(\mathbf{p}, \mathbf{q})f(t, \mathbf{p}) + \mathbf{q} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} w(\mathbf{p}, \mathbf{q})f(t, \mathbf{p}) + \frac{1}{2} q_\alpha q_\beta \frac{\partial^2}{\partial p_\alpha \partial p_\beta} w(\mathbf{p}, \mathbf{q})f(t, \mathbf{p}).$$

□

Diffusion equation:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \text{div}(D \nabla c - bc \mathbf{F}),$$

Other properties of Fokker-Plank equation

О гидродинамическом пределе уравнения Фоккера Планка

(??? по Колоколову пишу)

Fokker Plank equation for a small number of light gas in a havy gas

(main idea from 21.LL10)

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{1}{p^2} \frac{\partial}{\partial p} p^2 \left\{ f A + \frac{B}{p^2} \frac{\partial}{\partial p} f p^2 \right\},$$

$$B = \frac{1}{2} \frac{\sum (\delta p)^2}{\delta t}.$$

Обзор применений и моделей с УФП

В основном применяется для описания электронов в газах при воздействии электрического поля.

(??? 1 день подумаю про него - и пропишу)

1.1.3 Boltzmann Equation

Об уравнении Больцмана

Суть уравнения Больцмана

$$\hat{L}f = \frac{\partial f}{\partial t} + v_i \frac{\partial f}{\partial x_i} + \frac{F_i}{m} \frac{\partial f}{\partial v_i} = \hat{I}_{st}f$$

$$\hat{I}_{st} = \iiint W(1, 2; 1', 2') [f(1') f(2') - f(1) f(2)] d\mathbf{v}_2 d\mathbf{v}'_1 d\mathbf{v}'_2$$

$$\frac{\partial \langle na \rangle}{\partial t} + \frac{\partial \langle n v_i a \rangle}{\partial x_i} = n \langle \hat{L} \rangle + \int a \hat{I}_{st} f d\mathbf{v}$$

$$\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{V} \cdot \nabla = \frac{\partial}{\partial t} + V_i \frac{\partial}{\partial x_i}.$$

$$f_0 = n \left(\frac{m}{2\pi T} \right)^{3/2} \exp \left[-\frac{m(\mathbf{v} - \mathbf{V})^2}{2T} \right],$$

$$\frac{n \langle u^2 \rangle_0}{2} = \frac{3}{2} T, \quad \Pi_{ik}^0 = n T \delta_{ik}.$$

Линеаризованное уравнение Больцмана: $f = f_0(1 + \chi)$,

$$\hat{L} \ln f_0 = \iint [\chi(1') + \chi(2') - \chi(1) - \chi(2)] f_0(2) |\mathbf{v}_{12}| d\sigma d\mathbf{v}_2$$

$$\hat{L} \ln f_0 = \frac{m}{T} \left[u_i u_k - \delta_{ik} \frac{u^2}{3} \right] \frac{\partial V_i}{\partial x_k} + \left[\frac{mu^2}{2} - \frac{5}{2} \right] \frac{u_i}{T} \frac{\partial T}{\partial x_i}$$

Тау-приближение для однокомпонентного газа:

$$\hat{I}_{st} f = -\frac{f - f_0}{\tau}, \quad f = f_0 - \tau \hat{L} f_0,$$

$$\Pi_{ik} = nT \delta_{ik} \delta_{ik} - \eta \left[\frac{\partial V_i}{\partial x_k} + \frac{\partial V_k}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ik} \frac{\partial V_i}{\partial x_k} \right],$$

$$\mathbf{Q} = -\kappa \nabla T, \quad \eta = nT\tau, \quad \kappa = \frac{5}{2} \frac{nT\tau}{m}.$$

Тау-приближение для легких частиц в тяжелом газе:

$$\tau^{-1} = nv\sigma_{tr} = nv\pi \int_0^\pi (1 - \cos \vartheta) \sigma(\vartheta) d\vartheta$$

Гидродинамическая форма законов сохранения

$$\frac{dn}{dt} = -\operatorname{div} \mathbf{V}$$

$$\frac{dV_i}{dt} = -\frac{1}{mn} \frac{\partial \Pi_{ik}}{\partial x_k} + \frac{F_i}{m}$$

$$\frac{d}{dt} \frac{mn u^2}{2} = -\operatorname{div} \mathbf{Q} - \Pi_{ik} \frac{\partial V_i}{\partial x_k}$$

границы применимости уравнения Больцмана

тогда, когда с соотношением неопределенностей все хорошо, нет квантовых явлений.

а если квантуется волновая функция, то там квантовая кинетика.

когда силы короткодействующие.

например, в плазме оно не выполняется, потому что там кулоновские силы и как таковых столкновений не происходит.

переход к уравнению Навье-Стокса

?

1. Функция распределения
2. Принцип детального равновесия
3. Кинетическое уравнение Больцмана

1.1.4 Random Processes: Main Template Models

О процессах первого достижения

Время первого достижения для процесса Винера (???)

плотность вероятности координаты броуновской частицы при наличии стенки в начале координат:

$$p_{\text{surv}}(t) = \int_0^{+\infty} dx n(x; t)$$

$$\partial_t n(x; t) = D \partial_x^2 n(x; t)$$

$$n(x; 0) = \delta(x - x_0), \quad n(0; t) = 0.$$

$$p_{\text{surv}}(t) = \int_0^{+\infty} n(x, t) dx = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{L/2\sqrt{Dt}} d\xi e^{-\xi^2} = \text{erf}\left(\frac{x_0}{2\sqrt{Dt}}\right).$$

$$P(T) = \frac{x_0}{2\sqrt{\pi DT^{3/2}}} \exp\left(-\frac{x_0^2}{4DT}\right) \quad (\text{распр. Леви-Смирнова})$$

Оно имеет степенной хвост $\propto T^{-3/2}$, и по этой причине математическое ожидание времени первого достижения бесконечно велико. Для оценки типичного времени первого достижения можно использовать вершину распределения $P(T) : T_m = x_0^2/6D$.

Метод функции Грина

Рассмотрим броуновское движение на неограниченной оси x . Функция Грина $G(x; t|x_0) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \left[\exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{4Dt}\right) \right]$ описывает эволюцию функции распределения координаты частицы, изначально помещенной в точку $x = x_0$. Заметим, что если частица оказалась в начале координат в момент t , то историю ее предшествующей жизни можно разделить на два этапа: первое посещение точки $x = 0$ в некоторый промежуточный момент времени $\tau \in (0, t]$ и возвращение в $x = 0$ спустя время $t - \tau$. С учетом закона полной вероятности сказанное позволяет записать

$$G(0; t|x_0) = \int_0^t d\tau P(\tau) G(0; t - \tau|0)$$

где $P(T)$ это введенная нами выше функция распределения времени первого посещения частицей начала координат. Благодаря тому, что интеграл в правой части этого уравнения представляет собой свертку, после взятия преобразования Лапласа от обеих частей мы

находим

$$\tilde{G}(0; s|x_0) = \tilde{P}(s)\tilde{G}(0; s|0), \text{ где } \tilde{G}(0; s|x_0) = \int_0^\infty dt e^{-st} G(0; t|x_0) = \frac{1}{\sqrt{sD}} \exp\left(-\sqrt{\frac{s}{D}}|x_0|\right) \text{ и}$$

$$\tilde{P}(s) = \int_0^\infty dt e^{-sT} P(T), \text{ и, следовательно,}$$

$$\tilde{P}(s) = \frac{\tilde{G}(0; s|x_0)}{\tilde{G}(0; s|0)} = \exp\left(-\sqrt{\frac{s}{D}}|x_0|\right),$$

1.1.5 Linear Response and FDT: Basics

(уже в статфизе вроде написал, потом заново напишу это, ну и почитаю специальные книги про это.)

Двухвременные запаздывающие функции Грина

примеры применения

????

Отклик на электрическое поле. Электропроводность

Уравнения Блоха и электронный парамагнитный резонанс (ЭПР)

1.2 Kinetics of gases and liquids

1.2.1 Kinetic in Hydrodynamics: Main Parameters and Laws

Гидродинамические и диффузионные параметры (TOP ONE SECTION TODO)

Коэффициент самодиффузии D :

????

Формула Кубо:????

Коэффициент самодиффузии D выражается через интеграл корреляционной функции проекции скорости (импульса) частицы:

$$D = \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} m_1^{-2} \int_0^\infty e^{-\varepsilon\tau} \langle p_1^x(0) p_1^x(\tau) \rangle d\tau$$

где p_i - импульс частицы (номер 1), верхний индекс x означает x -компоненту вектора, τ - время. Угловые скобки означают усреднение по равновесному распределению Гиббса.

В классическом случае формула упрощается:

$$D = \int_0^\infty \langle v_1^x(0) v_1^x(\tau) \rangle d\tau$$

Коэффициент сдвиговой вязкости:

ф-ла кубо:???

$$\eta = \lim_{\varepsilon \rightarrow \downarrow 0} \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{1}{Vk_B T} \int_0^\infty e^{-\varepsilon\tau} \langle \pi^{xy}(0) \pi^{xy}(\tau) \rangle d\tau$$

где η -коэффициент сдвиговой вязкости, π^{xy} -компоненты тензора потока полного импульса.

Коэффициент объёмной вязкости:

$$\zeta = \lim_{\varepsilon \rightarrow \pm 0} \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{1}{Vk_B T} \int_0^\infty e^{-\varepsilon \tau} \langle (1 - \mathcal{P}) \pi^{xx}(0) \pi^{xx}(\tau) \rangle d\tau$$

где ζ - коэффициент объёмной вязкости, оператор

$$\mathcal{P} \pi^{xx} = \langle \pi^{xx} \rangle + (H - \langle H \rangle) \frac{\partial \langle \pi^{xx} \rangle}{\partial \langle H \rangle} + (N - \langle N \rangle) \frac{\partial \langle \pi^{xx} \rangle}{\partial \langle N \rangle}$$

H - гамильтониан системы, N - полное число частиц.

(??????)

Тензор плотности потоков импульса:

$$\Pi_{ik} = p\delta_{ik} + \rho v_i v_k - \sigma'_{ik} = -\sigma_{ik} + \rho v_i v_k$$

$$\sigma_{ik} = -p\delta_{ik} + \sigma'_{ik}$$

физический смыслог следующий.

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int \rho v_i dV &= - \int \frac{\partial \Pi_{ik}}{\partial x_k} dV \\ \frac{\partial}{\partial t} \int \rho v_i dV &= - \oint \Pi_{ik} df_k \end{aligned}$$

Таким образом, Π_{ik} есть i -я компонента количества импульса, протекающего в единицу времени через единицу поверхности, перпендикулярную к оси x_k .

Тензор $\hat{\Pi}_{ik}$ называют тензором плотности потока импульса.

Поток энергии, являющейся скалярной величиной, определяется вектором;

поток же импульса, который сам есть вектор, определяется тензором второго ранга.

Тензор напряжений:

$$\sigma_{ik} = -p\delta_{ik} + \sigma'_{ik}$$

$$\sigma'_{ik} = \eta \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_k} + \frac{\partial v_k}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ik} \frac{\partial v_l}{\partial x_l} \right) + \zeta \delta_{ik} \frac{\partial v_l}{\partial x_l}$$

Процессы внутреннего трения в жидкости возникают только в тех случаях, когда различные участки жидкости движутся с различной скоростью, так что имеет место движение частей жидкости друг относительно друга.

Поэтому вязкий тензор должно зависеть от производных от скорости по координатам.

Если скорость жидкости равна нулю, то вязкость не проявляется.

Если вся жидкость как целое совершает равномерное вращение, вязкость не проявляется.

При равномерном вращении с угловой скоростью Ω скорость $\mathbf{v}$ равна векторному произведению $[\Omega \mathbf{r}]$.

Линейными комбинациями производных $\partial v_i / \partial x_k$, обращающимися в нуль при $\mathbf{v} = [\Omega \mathbf{r}]$, являются суммы

$$\frac{\partial v_i}{\partial x_k} + \frac{\partial v_k}{\partial x_i}$$

Поэтому σ'_{ik} должно содержать именно эти симметричные комбинации производных $\partial v_i / \partial x_k$.

$$\sigma'_{ik} = \eta \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_k} + \frac{\partial v_k}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ik} \frac{\partial v_l}{\partial x_l} \right) + \zeta \delta_{ik} \frac{\partial v_l}{\partial x_l}$$

где $\eta > 0, \zeta > 0$.

$$\begin{aligned}\Pi_{ik} &= p\delta_{ik} + \rho v_i v_k - \sigma'_{ik} = -\sigma_{ik} + \rho v_i v_k \\ \sigma_{ik} &= -p\delta_{ik} + \sigma'_{ik}\end{aligned}$$

Тензор вязких напряжений:

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

(???)

Main laws of hydrodynamics for kinetics

Закон сохранения количества вещества

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V}) = 0$$

Уравнение Навье-стокса:

$$\rho \frac{du_\alpha}{dt} + \frac{\partial P}{\partial x_\alpha} = \frac{\partial \sigma'_{\alpha\beta}}{\partial x_\beta} + nF_\alpha.$$

Здесь мы ввели плотность газа $\rho = mn$ и обозначение $d/dt = \partial/\partial t + (\mathbf{u} \cdot \nabla)$ для так называемой субстанциональной производной.

Фактически это уравнение является уравнением движения (уравнением Ньютона) в применении к элементу объема газа:

$$\rho du_\alpha/dt = f_\alpha = -(\nabla P)_\alpha + \partial \sigma'_{\alpha\beta}/\partial x_\beta + nF_\alpha$$

$$\frac{\partial(\rho V_\alpha)}{\partial t} + \frac{\partial \Pi_{\alpha\beta}}{\partial x_\beta} = 0$$

$$\frac{3}{2} \frac{dP}{dt} + \frac{5P}{2} \operatorname{div} \mathbf{u} = \sigma'_{\alpha\beta} \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} - \operatorname{div} \mathbf{q}'$$

Уравнение Эйлера для идеальной жидкости

$$\frac{\partial v_i}{\partial t} = -v_k \frac{\partial v_i}{\partial x_k} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i}$$

уравнение непрерывности

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = - \frac{\partial(\rho v_k)}{\partial x_k}$$

Уравнение баланса импульса для идеальной жидкости

Уравнение баланса импульса для идеальной жидкости имеет вид:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho v_i = -\rho v_k \frac{\partial v_i}{\partial x_k} - \frac{\partial p}{\partial x_i} - v_i \frac{\partial(\rho v_k)}{\partial x_k} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_k} \rho v_i v_k$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho v_i = \rho \frac{\partial v_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho}{\partial t} v_i$$

- 6. Кинетическое уравнение для слабо неоднородного газа
- 7. Теплопроводность газа
- 8. Вязкость газа

1.2.2 Kinetic in Hydrodynamics: Advanced Properties

- 9. Симметрия кинетических коэффициентов
- 10. Приближенное решение кинетического уравнения
- Колмогоровский спектр в гидродинамической турбулентности
- Соотношение Колмогорова “4/5”

Обратный каскад энергии в двумерной турбулентности

(??)

1.2.3 Diffusion Phenomena in Gases

- 11. Диффузия легкого газа в тяжелом

(???)

(write the description of the model)

$$D \sim \bar{v}l,$$

(write the main statement!)

If there is a diffusion equilibrium, the concentration of a light gas changes as $\sqrt{T}$

Proof. One needs to calculate the change of particles and gets the kinetic equation in a form

$$v \cos \theta \frac{\partial f}{\partial x} = N_2 v \int F(p, \alpha) [f(p, \theta', x) - f(p, \theta, x)] d\alpha \equiv \text{St } f.$$

(describe parameters here)

(the idea of next transformations)

$\mathbf{i} := \int f \mathbf{v} d^3p$ (diffusion stream)

$$\begin{aligned} i &= -\frac{T}{3} \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \frac{c}{T} \left\langle \frac{v}{\sigma_t} \right\rangle \right\} = -\frac{1}{3} \left\langle \frac{v}{\sigma_t} \right\rangle \frac{\partial c}{\partial x} - \frac{cT}{3} \frac{\partial}{\partial T} \left[\frac{1}{T} \left\langle \frac{v}{\sigma_t} \right\rangle \right] \frac{\partial T}{\partial x} \equiv \\ &\equiv -ND \left(\nabla c + \frac{k_T}{T} \nabla T \right), \end{aligned}$$

(??? and there are some other statements there)

□

- 12. Диффузия тяжелого газа в легком

По порядку величины $D \sim \bar{v}/N\sigma$, где $\bar{v} \sim \sqrt{T/m_1}$ - снова (как и в (11, 13)) - средняя тепловая скорость молекул легкого газа. Таким образом, порядок величины коэффициента диффузии в обоих случаях одинаков:

$$D \sim T^{3/2}/\sigma P m_1^{1/2}$$

Proof.

$$f_0 = \frac{N_1}{(2\pi m_1 T)^{3/2}} \exp\left(-\frac{m_1 v^2}{2T}\right),$$

$$\begin{aligned} \mathbf{f}_r &= m_1 \int f_0(\mathbf{v} + \mathbf{V}) v \mathbf{v} \sigma_t d^3 p \\ &= -\frac{m_1^2}{T} \int f_0(v) (\mathbf{V} \mathbf{v}) \mathbf{v} v \sigma_t d^3 p \\ &= -\frac{m_1^2}{3T} \mathbf{V} \int f_0(v) \sigma_t v^3 d^3 p = -N_1 \frac{m_1^2}{3T} \mathbf{V} \langle \sigma_t v^3 \rangle \end{aligned}$$

□

13. Кинетические явления в газе во внешнем поле

Heat stream in a magnetic field:

$$\mathbf{q} = -\kappa \nabla T - \kappa_1 \mathbf{b}(\mathbf{b} \nabla T) - \kappa_2 [\nabla T \cdot \mathbf{b}].$$

(?? physical statement???)

Proof. (write that we have a magnetic moment, so)

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \gamma [\mathbf{MB}] \frac{\partial f}{\partial \mathbf{M}} = S_t f.$$

$$f = f_0(1 + \chi/T),$$

$$\frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{M}} = 0$$

(?? some transform-s, like in par 7,8 LL10)

$$\frac{\varepsilon(\Gamma) - c_p T}{T} \mathbf{v} \nabla T = -\gamma [\mathbf{MB}] \frac{\partial \chi}{\partial \mathbf{M}} + I(\chi).$$

$$x_{\alpha\beta} = -\frac{1}{T} \int f_0 \varepsilon v_\alpha g_\beta d\Gamma$$

$$x_{\alpha\beta} = x \delta_{\alpha\beta} + x_1 b_\alpha b_\beta + x_2 e_{\alpha\beta\gamma} b_\gamma,$$

□

Viscosity in a magnetic field:

Proof.

$$\left(m v_\alpha v_\beta - \frac{\varepsilon(\Gamma)}{c_v} \delta_{\alpha\beta} \right) V_{\alpha\beta} = I(\chi) - \gamma [\mathbf{MB}] \frac{\partial \chi}{\partial \mathbf{M}}$$

(??? then, there are big formulas, and I don't yet understand physics there, so I'll first write them in the theory)

□

14. Явления в слабо разреженных газах

(??? what are they??)

$$f = f_0 \left[1 + \frac{1}{T} \chi^{(1)} + \frac{1}{T} \chi^{(2)} \right]$$

$$\frac{T}{f_0} \left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \nabla \right) \frac{f_0 \chi^{(1)}}{T} - \frac{1}{T^2} \int w' f_{01} \left[\chi^{(1)'} \chi_1^{(1)'} - \chi^{(1)} \chi_1^{(1)} \right] d\Gamma_1 d\Gamma' d\Gamma'_1 = \frac{1}{T} I \left(\chi^{(2)} \right)$$

$$K := \frac{l}{L}$$

$$R := \frac{VL}{\nu}$$

$$R := \frac{V}{u}$$

$K = l/L$ связан с двумя параметрами, характеризующими гидродинамическое движение, - числом Рейнольдса R и числом Маха M . Первое из них определяется как $R \sim VL/v$, где V -характерный масштаб изменения скорости течения, а v кинематическая вязкость; число же Маха есть $M \sim V/u$, где u скорость звука. В газе порядок величины скорости звука совпадает со средней тепловой скоростью молекул $\bar{v}$, а кинематическая вязкость $\nu \sim \bar{v}$. Поэтому $R \sim VL/l\bar{v}$, $M \sim V/\bar{v}$, а число Кнудсена

$$K \sim M/R.$$

Поправочные члены в предельных условиях на границе между газом и твердыми телами приводят к эффектам первого порядка по l/L . Поэтому заметные явления, обусловленные разреженностью газа, имеют место именно вблизи твердых поверхностей.

Proof. (see words about it in LL10)

□

Jump of temperature.

(??)

Heat slipperiness.

(???)

Appearance of extra heat stream $\mathbf{q}'_{\text{пов}} = \varphi \frac{\partial \mathbf{V}_t}{\partial n}$

$$\varphi = T\eta\mu$$

Proof. (see 1 page of LL10)

□

15. Явления в сильно разреженных газах

(write, what is going on??)

$$\int_{\mathbf{nv} < 0} w(\Gamma', \Gamma) \mathbf{nv} e^{-\varepsilon/T_1} d\Gamma = -\mathbf{nv} e' e^{-\varepsilon'/T_1}$$

Speed of change of entropy of the system:

$$\dot{S} = \int \left[\frac{q\tau}{T^2} + \frac{F_n V_n}{T} + \frac{\mathbf{F}_t \mathbf{V}_t}{T} \right] df$$

Proof. (see LL10)

□

$$q = \alpha\tau, \quad \alpha = \frac{1}{2T^2} \int (\varepsilon - \varepsilon')^2 |v_x| w(\Gamma', \Gamma) \exp\left(\frac{\mu - \varepsilon(\Gamma)}{T}\right) d\Gamma d\Gamma'$$

$(v_x < 0, v'_x > 0)$
 (?? meaning??)

Proof. (write main words)

□

Knudsen effect:

$$\frac{P_1}{\sqrt{\tilde{T}_1}} = \frac{P_2}{\sqrt{\tilde{T}_2}}$$

Proof. (write main words)

$$\kappa \sim L \bar{v} N \sim \frac{PL}{\sqrt{mT}}.$$

□

Аналогично, «вязкость» сильно разреженного газа, проявляющаяся при относительном движении двух находящихся в нем пластинок (причем опять $L \ll l$), тоже пропорциональна давлению. Коэффициент вязкости η надо определить теперь так, чтобы было

$$F = \eta V/L,$$

где F -сила трения, испытываемая движущейся пластинкой (отнесенная к единице ее площади), а V -скорость движения одной пластинки относительно другой. Написав в (8, 11) расстояние L вместо длины пробега l ,

$$\eta \sim m \bar{v} N L \sim L P \sqrt{\frac{m}{T}}.$$

22. Слабо ионизованный газ в электрическом поле

$$\frac{\partial f}{\partial t} - e\mathbf{E} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = -\frac{1}{p^2} \frac{\partial}{\partial p} p^2 s + Nv \int [f(t, p, \theta') - f(t, p, \theta)] d\sigma,$$

$$s = -B \left(\frac{v}{T} f + \frac{\partial f}{\partial p} \right), \quad B = \frac{\sum (\Delta p)^2}{2\delta t}.$$

(this is a big, nontrivial topic, I skip it for now)

1.2.4 Fluctuations in gases

19. Флуктуации функции распределения в равновесном газе

(write main ideas)

Correlator of distribution function:

$$\langle \delta f(t_1, \mathbf{r}_1, \Gamma_1) \delta f(t_2, \mathbf{r}_2, \Gamma_2) \rangle,$$

$$\left[i(\mathbf{k}\mathbf{v}_1 - \omega) - \hat{I}_1 \right] (\delta f_1 \delta f_2)_{\omega \mathbf{k}}^{(+)} = \bar{f}(\Gamma_1) \delta(\Gamma_1 - \Gamma_2).$$

(discuss meaning!)

Proof.

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v}_1 \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} - \hat{I}_1 \right) \langle \delta f(t, \mathbf{r}, \Gamma_1) \delta f(0, 0, \Gamma_2) \rangle = 0$$

$$(\delta f_1 \delta f_2)_{\omega \mathbf{k}} = \int_{-\infty}^{\infty} dt \int \langle \delta f(t, \mathbf{r}, \Gamma_1) \delta f(0, 0, \Gamma_2) \rangle e^{-i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)} d^3x$$

□

Correlator of density:

$$(\delta N^2)_{\omega \mathbf{k}} = \frac{2T}{\omega} \text{Im } \alpha(\omega, \mathbf{k})$$

(???)

20. Флуктуации функции распределения в неравновесном газе

(what is the model?)

$$\mathbf{v}_1 \frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{r}_1} + \mathbf{v}_2 \frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{r}_2} - \hat{I}_1 \varphi - \hat{I}_2 \varphi = \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \text{St}_{12} \bar{f}.$$

Proof. (see LL10)

□

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{F}_1 \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1} - \hat{I}_1 \right) \langle \delta f(t, \Gamma_1) \delta f(0, \Gamma_2) \rangle = 0$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{F}_1 \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1} - \hat{I}_1 \right) \langle \delta f(t, \Gamma_1) \delta f(0, \Gamma_2) \rangle = 0$$

(?? meaning of the formulas??)

23. Флуктуации в слабо ионизованном неравновесном газе

1.2.5 Reactions, Chemical Kinetics

24. Рекомбинация и ионизация

(напишу, уже есть в теории, но пока не особо въезжал.)

1.3 Kinetics in condensed matter

1.3.1 Kinetics of phonons: basic

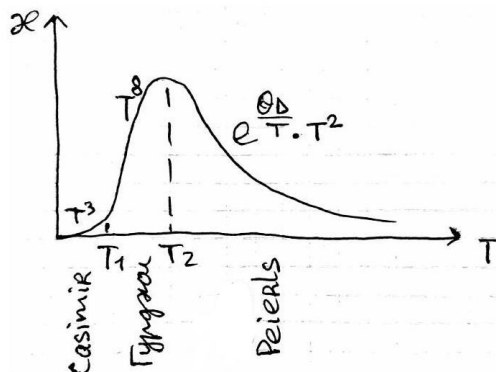
Обзор кинетических свойств среды с фононами

Фононный вклад в электропроводность металлов:

$$\sigma = \frac{Ne^2\tau_{tr}}{m} \sim \begin{cases} 1/T, & T \gg \Theta_D, \\ 1/T^5, & T \ll \Theta_D. \end{cases}$$

Число Лоренца и закон Видемана-Франца:

$$L = \frac{\kappa}{\sigma T} = \frac{\text{const}}{e^2}.$$



Есть баллистический (кнудсеновский) режим, диффузионный, пуазейлев, второй звук.
(!! напишу тут обзор этого всего!)

Кинетическое уравнение Больцмана для фононов

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} - \frac{\partial \omega}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{k}} = I_{\text{cr}}(f)$$

(write idea of it)

Proof:

(???)

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \mathbf{v} = \frac{\partial \omega(\mathbf{k}, \mathbf{r})}{\partial \mathbf{k}}, \quad \frac{d\mathbf{k}}{dt} = -\frac{\partial \omega}{\partial \mathbf{r}}.$$

$$I_{\text{cr}} = I_{\text{ph-ph}} + I_{\text{imp}} + I_{\text{b}},$$

τ -приближение:

$$I_{\text{cr}} = -\frac{f - f_0}{\tau} = -\frac{\delta f}{\tau},$$

$$\delta f \equiv f - f_0$$

$$f_0(\varepsilon) = n(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\varepsilon/T} - 1}$$

Коэффициент теплопроводности и закон Казимира.

Пусть есть слабый градиент температуры, ω от $\mathbf{r}$ не зависит. В τ -приближении имеем

$$\mathbf{v} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} = -\frac{\delta f}{\tau}.$$

Rate of heat flow:

$$Q_i = -\sum_j \kappa_{ij} \nabla_j T = \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \hbar \omega(\mathbf{k}) v_i(\mathbf{k}) \delta f = -\int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \tau \hbar \omega(\mathbf{k}) v_i(\mathbf{k}) \left(\mathbf{v}(\mathbf{k}) \frac{\partial f}{\partial T} \nabla T \right).$$

$$f \approx f_0 \quad \Rightarrow$$

$$\kappa_{ij} = \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \tau \hbar \omega(\mathbf{k}) v_i(\mathbf{k}) v_j(\mathbf{k}) \frac{\partial f_0}{\partial T}.$$

$$T \ll T_D \quad \Rightarrow$$

$$\kappa \sim \int dk \cdot k^2 \tau \hbar \omega c^2 \cdot \frac{\hbar \omega}{T^2} \frac{1}{\text{sh}^2 \frac{\hbar \omega}{2T}} \sim \frac{\tau T^3}{\hbar^3 c} \int_0^{T_D/2T} \frac{x^4 dx}{\text{sh}^2 x} \propto T^3 \quad (\text{Casimir})$$

Это баллистический (кнудсеновский) режим. Другие возможные режимы: диффузионный, пуазейлев, второй звук (???).

Взаимодействие фононов

А. Ангармонизм и взаимодействие. Слияния и распады. N- и U-процессы.

$$\mathbf{u} = \sqrt{\frac{\hbar}{2MN}} \sum_{\mathbf{k}, s} \frac{\mathbf{e}_{\mathbf{k}s} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}}}{\sqrt{\omega(\mathbf{k})}} (a_{\mathbf{k}s} + a_{-\mathbf{k}s}^\dagger).$$

$$U = U_0 + \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'} D_1 (\mathbf{R} - \mathbf{R}') (u(\mathbf{R}) - u(\mathbf{R}'))^2 +$$

$$+ \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{R}', \mathbf{R}''} K_1 (\mathbf{R} - \mathbf{R}', \mathbf{R} - \mathbf{R}'') (u(\mathbf{R}) - u(\mathbf{R}')) (u(\mathbf{R}) - u(\mathbf{R}'')) (u(\mathbf{R}') - u(\mathbf{R}'')).$$

Ангармоническое term:

$$H_{\text{intr}} := \left(\frac{\hbar}{2MN} \right)^{3/2} \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{R}', \mathbf{R}''} K_2 (\mathbf{R} - \mathbf{R}', \mathbf{R} - \mathbf{R}'') \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{k}''} \frac{1}{\sqrt{\omega(k)\omega(k')\omega(k'')}} \times$$

$$\times (a_{\mathbf{k}} + a_{-\mathbf{k}}^\dagger) (a_{\mathbf{k}'} + a_{-\mathbf{k}'}^\dagger) (a_{\mathbf{k}''} + a_{-\mathbf{k}''}^\dagger) (e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} - e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}'})(e^{i\mathbf{k}'\mathbf{R}} - e^{i\mathbf{k}'\mathbf{R}''})(e^{i\mathbf{k}''\mathbf{R}} - e^{i\mathbf{k}''\mathbf{R}''}).$$

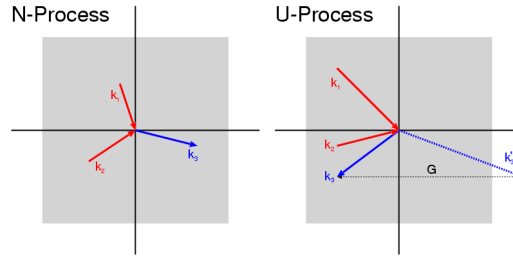
(?? write the idea)

$$\mathbf{k} + \mathbf{k}' + \mathbf{k}'' = \mathbf{b}, \quad \Rightarrow \quad \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{K}\mathbf{R}} = N \sum_{\mathbf{b}} \delta_{\mathbf{K},\mathbf{b}}.$$

$$H_{\text{intr}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}+\mathbf{k}'+\mathbf{k}''=\mathbf{b}} B \left(a_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}'} a_{-\mathbf{k}''}^{\dagger} + a_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}'}^{\dagger} a_{-\mathbf{k}''}^{\dagger} \right),$$

$$B(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{k}'') := \left(\frac{\hbar}{2M} \right)^{3/2} \frac{1}{\sqrt{\omega\omega'\omega''}} \sum_{\mathbf{R}=\mathbf{R}', \mathbf{R}=\mathbf{R}''} K_2(\mathbf{R}-\mathbf{R}', \mathbf{R}-\mathbf{R}'') \cdot \left(1 - e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}'-\mathbf{R})} \right) \left(1 - e^{i\mathbf{k}'(\mathbf{R}''-\mathbf{R})} \right) \left(e^{i\mathbf{k}''(\mathbf{R}'-\mathbf{R})} - e^{i\mathbf{k}''(\mathbf{R}''-\mathbf{R})} \right).$$

Here two слагаемых эрмитово сопряжены друг другу и описывают обратные друг другу процессы. Первое - это слияние (два в один), а второе - распад фононов (один в два). Если $\mathbf{b} = 0$, то это N-процесс (нормальный). Если $\mathbf{b} \neq 0$, то это U-процесс (Umklapp - процесс переброса).



$$\omega(\mathbf{k}) \pm \omega(\mathbf{k}') - \omega(\mathbf{k}'') = 0$$

(?? write ideas!)

$$w_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f | H_{B3} | i \rangle|^2 \delta(E_f - E_i).$$

$$w_{\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}', \mathbf{k}''} = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{|B|^2}{N} \delta(\hbar\omega_k - \hbar\omega_{k'} - \hbar\omega_{k''}) \delta_{\mathbf{k}+\mathbf{k}'+\mathbf{k}'', \mathbf{b}}$$

(?????? then there is a lot of theory, which I don't understand now)

$$w_{\mathbf{k}, \mathbf{k}' \rightarrow \mathbf{k}''} = \frac{2\pi}{\hbar^2} \frac{|B|^2}{N} \delta(\omega_k + \omega_{k'} - \omega_{k''}) \delta_{\mathbf{k}+\mathbf{k}'+\mathbf{k}'', \mathbf{b}}$$

В формуле (9.26) нет множителя $1/2$, такого как в (9.22), поскольку здесь один из пары исходных фононов $(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ задан.

Если в процессах, описываемых формулами (9.11) и (9.12), все три фонона - акустические, то нас интересуют малые $\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{k}''$ и $\mathbf{b} = 0$. В этом случае можно выяснить, как ведёт себя B . Вспоминая определение этой величины [формула (9.12)], видим, что под суммой каждая из скобок с экспонентами в длинноволновом пределе оказывается пропорциональна первой степени соответствующего волнового вектора, т.е. первой степени соответствующей частоты. Поэтому в целом в случае N-процессов с тремя акустическими фононами имеем

$$B \propto \sqrt{\omega\omega'\omega''}$$

$$\frac{|B|^2}{N} = A\hbar^3 \omega_k \omega_{k'} \omega_{k''}.$$

$$A \sim \frac{a_0^3}{mc^2 V},$$

где V - объём всего кристалла. Можно это делать, начиная с выражения для ангармонической энергии: при смещении атомов на величину порядка межатомного расстояния a_0 ангармоническая энергия в расчёте на один атом - порядка атомной (а та - порядка mc^2 , где m - средняя масса атома решётки ²⁰), поэтому в формуле (9.2) получаем $K_1(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \mathbf{R}_3) \sim mc^2/a_0^3$ и т.д. Но можно это сообразить и по размерности. Из формул (9.18) и (9.29) следует, что размерность A есть обратная энергия. При этом эта буква может складываться из микроскопических параметров a_0, m, c и полного объёма V (фурье-преобразования и т.д.). Можно сначала проверить, что зависимость от V имеет вид $A \propto 1/V$ [это следует из N в знаменателе формулы (9.29)]. Тогда нужную размерность мы получим, обезразмерив объём с помощью a_0^3 и сделав энергию mc^2 . Это и даёт оценку (9.30).

В. Время свободного пробега от взаимодействия фононов.

We approximate the collision integral:

$$f_k = f_0 + \delta f$$

(т.е. $f_{k'}$ и $f_{k''}$ будем считать равновесными).

$$(f_k + 1) f_{k'} f_{k''} - f_k (f_{k'} + 1) (f_{k''} + 1) \approx -\delta f (f'_0 + f''_0 + 1).$$

В скобке комбинация $(f'_0 + f''_0)$ приводит к индуцированному распаду, а 1 - к спонтанному распаду.

Время релаксации $\tau(T, \omega)$ определяем так:

$$I_{\text{ст}} = -\frac{\delta f_k}{\tau}.$$

Важно, что при этом τ не зависит от функции распределения f_k . Это и означает τ -приближение - формула (9.32) соответствует именно такому виду.

Рассмотрим сначала N-процессы.

$$\sum_{\mathbf{k}'} = V \int \frac{d^3 k'}{(2\pi)^3},$$

(??)

$$\begin{aligned} \left(\frac{1}{\tau_N} \right)_{\text{расп.}} &= \pi \hbar V \int \frac{d^3 k'}{(2\pi)^3} A \omega \omega' \omega'' (f_{k'} + f_{k''} + 1) \delta(\omega - \omega' - \omega''), \\ \left(\frac{1}{\tau_N} \right)_{\text{сл.}} &= 2\pi \hbar V \int \frac{d^3 k'}{(2\pi)^3} A \omega \omega' \omega'' (f_{k'} - f_{k''}) \delta(\omega + \omega' - \omega''). \end{aligned}$$

Учтём ещё, что

$$d^3 k' = \frac{\omega^2 d\omega' d\Omega_{k'}}{c^3}.$$

Получим оценки $1/\tau$ для нескольких случаев:

1. **Спонтанный распад.** Основной вклад даёт область $\omega \sim \omega' \sim \omega''$, ²¹ в результате (учитывая, что $\omega_D = ck_D = c/a_0$ и в подынтегральное выражение входит ω^5)

$$\left(\frac{1}{\tau_N} \right)_{\text{сп.расп.}} \sim \frac{\hbar a_0^3 \omega^5}{mc^5} = \frac{\hbar a_0^3 \omega_D^5}{mc^5} \left(\frac{\omega}{\omega_D} \right)^5 = \omega_D \left(\frac{\hbar \omega_D}{mc^2} \right) \left(\frac{\hbar \omega}{\hbar \omega_D} \right)^5.$$

$$\gamma = \frac{\hbar\omega_D}{mc^2} = \frac{\hbar}{a_0 mc} \sim \frac{10^{-27}}{5 \cdot 10^{-8} \cdot (10^{-27} \cdot 2 \cdot 10^3 \cdot 10^2) \cdot 10^5} \sim 10^{-3}. \quad c \sim 1 \text{ km/c}$$

Важное качественное обстоятельство: спонтанный распад не зависит от температуры (т.к. в формулу для τ не вошли функции распределения).

2. Индуцированный распад холодного фонона. Для индуцированных распадов помимо частоты фонона возникает второй важный энергетический масштаб - температура. Поэтому нужно рассматривать разные возможные соотношения между $\hbar\omega$ и T . Холодный фонон означает фонон с $\hbar\omega \ll T$. Из-за закона сохранения энергии из холодного фонона могут родиться только два холодных. Основной вклад даёт область $\hbar\omega \sim \hbar\omega' \sim \hbar\omega'' \ll T$, при этом $f(\omega) \approx T/\hbar\omega$. Получается комбинация вида

$$\omega^5 (f_{\omega'} + f_{\omega''})$$

$$\left(\frac{1}{\tau_N} \right)_{\text{инд.расп.}} \sim \omega_D \left(\frac{\hbar\omega_D}{mc^2} \right) \frac{(\hbar\omega)^4 T}{(\hbar\omega_D)^5}.$$

3. Слияние для холодного фонона.

В этом случае $\hbar\omega \ll T$, при этом фонон, с которым сливаемся, может быть тепловым с $\hbar\omega' \sim T$, тогда и получающийся фонон будет тепловым. Именно этот случай даёт основной вклад: $\hbar\omega' \sim \hbar\omega'' \sim T$. При этом в разности $(f_{\omega'} - f_{\omega''})$, входящей в формулу (9.35), каждое слагаемое порядка единицы, а разность мала (??? understand it better!)

$$\omega\omega'^3\omega'' (f_{\omega'} - f_{\omega''}) \frac{\omega'}{\omega} \sim \omega T^4.$$

$$\left(\frac{1}{\tau_N} \right)_{\text{сл.}} \sim \omega_D \left(\frac{\hbar\omega_D}{mc^2} \right) \frac{\hbar\omega T^4}{(\hbar\omega_D)^5}.$$

4. Распад (спонтанный и индуцированный) и слияние тепловых фононов.

Оценку для случая $\hbar\omega \sim T$ можно получить из вышеприведённых формул (они все стыкуются в этом случае):

$$\frac{1}{\tau_N} \sim \omega_D \left(\frac{\hbar\omega_D}{mc^2} \right) \left(\frac{T}{T_D} \right)^5.$$

5. Процессы переброса для тепловых фононов (при $T \ll T_D$).

При $T \ll T_D$ исходный импульс теплового фонона мал по сравнению с дебаевским:

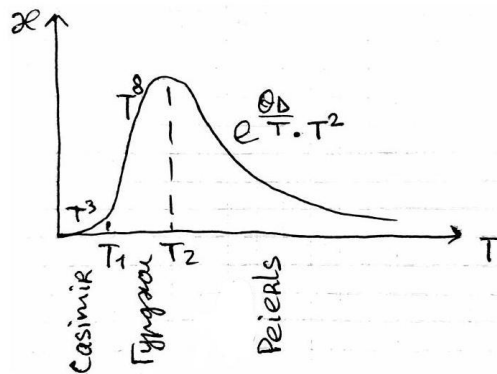
$$k = \frac{\omega}{c} \sim \frac{T/\hbar}{c} \ll \frac{T_D}{\hbar c} \sim k_D.$$

Распады с перебросом (как спонтанные, так и индуцированные) оказываются невозможны по следующей причине. В силу закона сохранения энергии при распаде имеем $k = k' + k''$, поэтому раз $k \ll k_D$, то и $k', k'' \ll k_D$. Закон сохранения импульса, который для процесса переброса имеет вид $\mathbf{k} + \mathbf{k}' + \mathbf{k}'' = \mathbf{b}$ с ненулевой правой частью, не может быть выполнен. Иными словами, исходный импульс недостаточен для процесса переброса.

Слияния при $T \ll T_D$ возможны, мы можем рассмотреть слияние с любым фононом, не обязательно тепловым - этот процесс может содержать малость из-за функции распределения, но он возможен. Основной вклад будет от $\omega' \sim \omega'' \sim \omega_D$ (нам нужны большие частоты, чтобы был переброс). Получается комбинация вида

$$\omega\omega'^3\omega'' (f_{\omega'} - f_{\omega''}) \sim T\omega_D^4 e^{-T_D/T}.$$

Температурная зависимость теплопроводности решётки



Температурная зависимость теплопроводности решётки при низких температурах ($T < \Theta$)

удельная теплоёмкость фононов

$$c_{\text{ph}}(k) := \partial (\hbar \omega(k) f_0) / \partial T,$$

$$\kappa \sim \int d^3k \cdot c_{\text{ph}}(k) l c, \quad l = c\tau.$$

Если же τ не зависит от k (а мы ниже будем рассматривать тепловые фононы, для которых это можно считать справедливым, т.к. их частота задана температурой), то интегрирование относится только к теплоёмкости на импульсе и даёт в результате удельную теплоёмкость с учётом всего спектра (полную в этом смысле):

$$\kappa \sim c_{\text{ph}} l c.$$

Мы считаем, что есть образец с некоторым поперечным размером d , а теплопроводность мы измеряем вдоль образца. При самых низких температурах длина свободного пробега определяется рассеянием на стенках, поэтому $l \sim d$, что с учётом

$$c_{\text{ph}} \sim \left(\frac{T}{\hbar c} \right)^3 \sim k_D^3 \left(\frac{T}{T_D} \right)^3$$

$$\kappa \sim \frac{\omega_D^3}{c^2} \left(\frac{T}{T_D} \right)^3 d. \quad (\text{Casimir})$$

При самых низких T

$$d \ll l_N \ll l_U,$$

(??? other ideas are here!!)

68. Теплопроводность диэлектриков. Высокие температуры по Ландау

69. Теплопроводность диэлектриков. Низкие температуры по Ландау

1.3.2 Kinetics of phonons: well-known effects

Рассеяние фононов на примесях

Scattering on a single impurity

Impurity:

1) у неё другая масса, поэтому меняется кинетическая энергия,

2) она по-другому взаимодействует с соседними атомами, поэтому меняются силовые константы (потенциальная энергия).

Для простоты будем говорить об изотопическом рассеянии, когда важен только первый эффект. Изменение массы при этом почти всегда малó (за исключением случаев водорода и гелия), поэтому будем считать его малым параметром и делать теорию возмущений.

$$\delta H = \sum_{j\alpha} \frac{\delta m}{2} \dot{u}_{0,j,\alpha}^2 = \frac{1}{N} \frac{\delta m}{2} \sum_{j,\alpha,s,\mathbf{q},s',\mathbf{q}'} e_{j,\alpha}^{(s,\mathbf{q})} e_{j,\alpha}^{(s',\mathbf{q}')} \frac{P_{s,\mathbf{q}}}{M} \frac{P_{s',\mathbf{q}'}}{M}.$$

$$\delta H_1 = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q},\mathbf{q}'} V_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} a_{\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{q}'} \quad V_{\mathbf{q}'} := \frac{V}{N} \frac{\delta m}{2} \sqrt{\frac{\hbar\omega_{s,-\mathbf{q}}}{M}} \sqrt{\frac{\hbar\omega_{s',\mathbf{q}'}}{M}} e_{j,\alpha}^{(s,-\mathbf{q})} e_{j,\alpha}^{(s',\mathbf{q}')}.$$

$$w = \int \frac{d\mathbf{q}'}{(2\pi)^3} \frac{2\pi}{\hbar} |V_{\mathbf{q}\mathbf{q}'}|^2 \underbrace{\delta(\hbar\omega_{s',\mathbf{q}'} - \hbar\omega_{s,\mathbf{q}})}_{=\frac{\delta(q' - \frac{c}{c'}q)}{\hbar c'}}, \quad (\text{Fermi g.r.})$$

$$\frac{dw}{d\Omega} = \frac{2\pi}{\hbar^2 c'} |V_{\mathbf{q}\mathbf{q}'}|^2 \frac{q'^2}{(2\pi)^3}, \quad q' = \frac{c}{c'} q.$$

$$V_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} \propto \sqrt{\omega\omega'}, \\ \omega = \omega'$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \propto \frac{dw}{d\Omega} \propto \omega^4. \quad (\text{Rayleigh})$$

A. Время свободного пробега и теплопроводность.

B. Двухступенчатая релаксация. 42

70. Рассеяние фононов на примесях by Landau

Второй звук

(пока думаю, что это специфика с фононами связана, нужно будет - разберусь)

A. Гидродинамические уравнения. 43

B. Второй звук и его скорость. 44

71. Гидродинамика фононного газа в диэлектрике

Поглощение звука

72. Поглощение звука в диэлектрике. Длинные волны

73. Поглощение звука в диэлектрике. Короткие волны

1.3.3 Deformation waves, sound

(??? по Колоколову писал это????)

Звук

$$H = \int d^3r \left[\frac{\rho v^2}{2} + \rho \varepsilon(\rho) \right]$$

плотность среды, $\mathbf{v} = \nabla \phi$ - скорость, ϕ - потенциал, ε - внутренняя энергия единицы массы.

уравнение непрерывности и уравнение Эйлера

$$\partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0, \quad \partial_t \mathbf{v} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} = -\frac{1}{\rho} \nabla P$$

или в каноническом виде

$$\partial_t \rho = \frac{\delta H}{\delta \phi}, \quad \partial_t \phi = -\frac{\delta H}{\delta \rho}$$

$$\frac{\delta H}{\delta \phi} = -\nabla \cdot (\rho \nabla \phi) = \partial_t \rho$$

Учитывая потенциальность течения, $\text{rot } \mathbf{v} = 0 \rightarrow (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} = \nabla v^2/2$, получим из уравнения Эйлера

$$\nabla \frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \left[\frac{(\nabla \phi)^2}{2} \right] = -\frac{1}{\rho} \nabla \left(\rho^2 \frac{d\varepsilon}{d\rho} \right) = -\nabla \left(\rho \frac{d\varepsilon}{d\rho} + \varepsilon \right).$$

$$-\frac{\partial \phi}{\partial t} = \left[\frac{(\nabla \phi)^2}{2} \right] + \rho \frac{d\varepsilon}{d\rho} + \varepsilon = \frac{\delta H}{\delta \rho}.$$

$$c_s^2 = \left(\frac{dP}{d\rho} \right)_s = \frac{d}{d\rho} \left(\rho^2 \frac{d\varepsilon}{d\rho} \right)_0 = 2\rho_0 \varepsilon'_0 + \rho_0^2 \varepsilon''_0.$$

$$H_2 = \int d^3r \left[\frac{\rho_0}{2} (\nabla \phi)^2 + \frac{\rho_1^2}{2\rho_0} c_s^2 \right] = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \left[\rho_0 k^2 \phi_{\mathbf{k}} \phi_{-\mathbf{k}} + \frac{c_s^2}{\rho_0} \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} \right].$$

(тут укажу словами коротко шаги, как прийти к тому, что ниже)

$$H_3 = \frac{1}{2\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \sqrt{\frac{c_s}{8\rho_0}} \sqrt{k k_1 k_2} \Delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) (a_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}_1}^* a_{\mathbf{k}_2}^* + c.c.) (\cos \theta_{12} + \cos \theta_{k_2} + \cos \theta_{k_1} + 3g),$$

где, например, θ_{12} - угол между волновыми векторами $\mathbf{k}_1$ и $\mathbf{k}_2$, т. е. $\cos \theta_{12} = \mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{k}_2 / (k_1 k_2)$ и т. д. Это выражение будет в дальнейшем часто использоваться для иллюстрации общих утверждений (??).

Квантовое кинетическое уравнение

$$\frac{dp_n}{dt} = \sum_{m \neq n} w_{mn} p_m - p_n \sum_{m \neq n} w_{nm}$$

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^* a_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} a_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}_1}^* a_{\mathbf{k}_2}^* \Delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) + c.c.$$

$$\begin{aligned} \hat{V}_{\mathbf{k}} &= \frac{1}{2\sqrt{V}} \sum_{1,2} (V_{\mathbf{k};1,2} \hat{a}_1^+ \hat{a}_2^+ \hat{a}_{\mathbf{k}} + V_{\mathbf{k};1,\mathbf{a}}^* \hat{a}_{\mathbf{k}}^+ \hat{a}_1 \hat{a}_2) \Delta(\mathbf{k} - \mathbf{1} - \mathbf{2}) + \\ &+ \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{1,2} (V_{\mathbf{2};\mathbf{k},1} \hat{a}_{\mathbf{k}}^+ \hat{a}_1^+ \hat{a}_{\mathbf{2}} + V_{\mathbf{2};\mathbf{k},1}^* \hat{a}_{\mathbf{2}}^+ \hat{a}_1 \hat{a}_{\mathbf{k}}) \Delta(\mathbf{2} - \mathbf{1} - \mathbf{k}). \end{aligned}$$

(????)

$$\begin{aligned} \dot{n}_{\mathbf{k}} = & \frac{2\pi}{V} \sum_{1,2} |V_{2;1,\mathbf{k}}|^2 \left[(n_{\mathbf{k}} + n_1 + 1) n_2 - n_1 n_{\mathbf{k}} \right] \Delta(\mathbf{2} - \mathbf{1} - \mathbf{k}) \delta(\omega_1 + \omega_k - \omega_2) + \\ & + \frac{\pi}{V} \sum_{1,2} |V_{\mathbf{k};1,2}|^2 \left[n_1 n_2 - (n_1 + n_2 + 1) n_{\mathbf{k}} \right] \Delta(\mathbf{k} - \mathbf{1} - \mathbf{2}) \delta(\omega_k - \omega_1 - \omega_2). \end{aligned}$$

$$i\dot{a}_{\mathbf{k}} = \{a_{\mathbf{k}}, \mathcal{H}\} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial a_{\mathbf{k}}^*}$$

Классический подход

Найдем изменение числа волн $n_{\mathbf{k}}$ со временем за счет слабого взаимодействия:

$$\partial_t n_{\mathbf{k}} = \langle a_{\mathbf{k}} \partial_t a_{\mathbf{k}}^* + a_{\mathbf{k}}^* \partial_t a_{\mathbf{k}} \rangle.$$

Из уравнений движения следует

$$\partial_t a_{\mathbf{k}} + i\omega_k a_{\mathbf{k}} = -\frac{i}{\sqrt{V}} \sum_{12} \left[V_{1,2\mathbf{k}} a_1 a_2^* \Delta(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}) + \frac{1}{2} V_{\mathbf{k},12}^* a_1 a_2 \Delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \right]$$

Замечая, что в круглых скобках стоят комплексно сопряженные величины, последнее уравнение можно переписать так:

$$\begin{aligned} \partial_t n_{\mathbf{k}} = & \text{Im} \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{12} \Delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) V_{\mathbf{k},12}^* \langle a_1 a_2 a_{\mathbf{k}}^* \rangle - \\ & - \text{Im} \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{12} 2\Delta(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}) V_{1,2\mathbf{k}}^* \langle a_1^* a_2 a_{\mathbf{k}} \rangle. \end{aligned}$$

Если вычислять корреляторы для волнового поля без учета нелинейности, то получим ноль. Поэтому надо найти $\langle a_1^* a_2 a_{\mathbf{k}} \rangle$ в следующем порядке теории возмущений.

Алгебраический подход

(тут жёсть какая-то с вычислениями, вообще нет желания конспектировать)

$$[\partial_t - i(\omega_k - \omega_1 - \omega_2)] \langle a_1 a_2 a_{\mathbf{k}}^* \rangle = \frac{i}{\sqrt{V}} V_{\mathbf{k},12} \Delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) [n_1 n_2 - n_k (n_1 + n_2)]$$

Диаграммный подход

(какие-то диаграммы, тоже тронешься, пока будешь разбирать это.)

(мб нарисую диаграммы)

$$\begin{aligned} \langle \tilde{a}_1 a_2^* a_{\mathbf{k}}^* \rangle(t) &= \frac{(-i)}{2\sqrt{V}} \sum_{34} V_{134}^* \int_0^t d\tau e^{i(t-\tau)(\omega_2 + \omega_k - \omega_1 + i\delta)} \langle a_3 a_4 a_2^* a_{\mathbf{k}}^* \rangle_0(\tau) = \\ &= \frac{i}{\sqrt{V}} V_{12\mathbf{k}}^* n_2 n_{\mathbf{k}} \pi \delta(\omega_2 + \omega_k - \omega_1) \end{aligned}$$

1.3.4 Heat transport

обзор главных формул

$$\begin{aligned}\frac{\partial Q(r,t)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \cdot \mathbf{j}_Q &= \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{j}_e \\ \mathbf{j}_Q &= \mathbf{j}_E - \frac{\mu(r,t)}{e} \mathbf{J}_e \\ \boldsymbol{\varepsilon} &= \mathbf{E}_{ext} - \nabla \mu / e\end{aligned}$$

Закон сохранения тепла

$$\begin{aligned}dE(r,t) &= T(r,t)dS(r,t) + \mu(r,t)dn(r,t) \\ T(r,t)\frac{\partial S(r,t)}{\partial t} &= \frac{\partial Q(r,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} E(r,t) - \mu(r,t)\frac{\partial}{\partial t} n(r,t).\end{aligned}$$

уравнение теплопроводности

$$\rho_{CP} \frac{\partial T(r,t)}{\partial t} - \operatorname{div} \kappa \nabla T = \dot{q}_V$$

поток тепла и квантовый оператор

хз

1.3.5 Overview of Kinetic Phenomena with Electrons

Обсудим, какие вообще могут быть задачи.

(потом это напишу как следует!!)

Может быть, что есть в металле примесь.

Может быть, что в металле есть колебания, тогда электроны будут взаимодействовать с фононами.

Может быть, что есть магнитное поле.

1.3.6 Kinetics of Electrons: Basic Laws

I. Кинетическое уравнение для электронов в металле 3

II. Проводимость, обусловленная примесями 6

III. Теплопроводность, обусловленная примесями 8

IV. Электрон-электронное рассеяние 9

A. Без процессов переброса 9

B. Роль процессов переброса 11

V. Электрон-фононное рассеяние 12

При деформации решётки возникает поляризация $\mathbf{P}(\mathbf{r})$ (сейчас рассматриваем решётку в непрерывном пределе). Плотность поляризационного заряда есть $\rho_{\text{пол}} = -\operatorname{div} \mathbf{P}$, а энергия взаимодействия электронов с этим зарядом равна

$$V(\mathbf{r}) = -e \int Q(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \operatorname{div} \mathbf{P}(\mathbf{r}') d^3 \mathbf{r}'.$$

Без экранирования ядро было бы чистым кулоновским взаимодействием: $Q = 1/|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$. Однако, из-за экранировки оно становится короткодействующим. Считая атомные расстояния малыми, можем считать ядро дельта-функцией:

$$Q(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \approx a^2 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'),$$

где a имеет порядок атомного пространственного масштаба, $a \sim 10^{-8}$ см $\sim \hbar/p_0$, откуда

$$V(\mathbf{r}) \sim -ea^2 \operatorname{div} \mathbf{P}(\mathbf{r}).$$

Поляризацию можно оценить как $\mathbf{P} \sim ne\mathbf{u}$, где n - плотность атомов (порядка плотности электронов), $\mathbf{u}$ - смещение. Взаимодействие содержит $\operatorname{div} \mathbf{P}$, что в фурьепредставлении даст $iku_{\mathbf{k}}$, при том что для длинноволновых фононов $\omega = c_s k$. В результате

$$V_{\mathbf{k}} \sim -ie^2 a^2 n \frac{\omega}{c_s} u_{\mathbf{k}}.$$

Используя формулы квантования фононов, можем записать смещение $u_{\mathbf{k}}$ через операторы a и $a^\dagger$. В первом порядке теории возмущений есть процессы, соответствующие матричным элементам $a_{\mathbf{k}}$ и $a_{\mathbf{k}}^\dagger$, т.е. процессам с поглощением или испусканием одного фонона. Например, для испускания будет матричный элемент $\langle n_{\mathbf{k}} + 1 | a_{\mathbf{k}}^\dagger | n_{\mathbf{k}} \rangle = \sqrt{n_{\mathbf{k}} + 1}$, и мы получим (N - число элементарных ячеек, M - масса элементарной ячейки):

$$V_{\mathbf{p}-\hbar\mathbf{k},\mathbf{p}} \sim -ie^2 a^2 n \left(\frac{\hbar(n_{\mathbf{k}} + 1)}{NM\omega} \right)^{1/2} \frac{\omega}{c_s} \sim -ina^3 \frac{e^2}{a} \left(\frac{\hbar\omega(n_{\mathbf{k}} + 1)}{N} \right)^{1/2} \frac{1}{c_s \sqrt{M}}.$$

Поскольку $na^3 \sim 1$, $e^2/a \sim p_0^2/m$, $c_s \sqrt{M} \sim v\sqrt{m}$,² получаем

$$V_{\mathbf{p}-\hbar\mathbf{k},\mathbf{p}} \sim -ip_0 \left(\frac{\hbar\omega(n_{\mathbf{k}} + 1)}{Nm} \right)^{1/2}.$$

предельные случаи высоких и низких температур:

VI. Температурная зависимость проводимости и теплопроводности 16

VII. Кин.уравнение при наличии магнитного поля 17

1.3.7 Kinetics of electrons: well-known electric and magnetic effects

VIII. Эффект Холла и магнитосопротивление в слабом магнитном поле 21

Квантовые поправки к проводимости

Полная вероятность перехода $W_{A \rightarrow B}$ из точки A в точку B есть

$$W_{A \rightarrow B} = \left| \sum_i A_i \right|^2 = \sum_i |A_i|^2 + \sum_{i \neq j} A_i A_j^*.$$

За время t (много большего времени свободного пробега $\tau \sim l/v$, где $v = p_0/m$ - скорость электрона) за счет рассеяния на случайно расположенных примесях электрону будет доступен объем $V \sim R^2 b$, где $b \leq l$ толщина проводника, а $R^2 = Nl^2$ - среднеквадратичное смещение электрона при случайном рассеянии на $N = vt/l$ примесях, т. е. $V \sim vtlb$. Чтобы за промежуток времени dt электрон вернулся в

исходную точку, надо, чтобы конечная точка пути электрона попала в элемент объема $vdt\lambda^2$. Вероятность этого события равна отношению объемов $vdt\lambda^2/(lvtb)$. Тогда относительное изменение проводимости есть

$$\frac{\Delta\sigma}{\sigma} \sim - \int_{\tau}^{\tau_{\phi}} \frac{v\lambda^2 dt}{vltb} \sim - \frac{\lambda^2}{bl} \ln \frac{\tau_{\phi}}{\tau}$$

Сечение неупругого рассеяния электронов на фононах Σ_{e-ph} при низких температурах ($T \ll \theta$ - температуры Дебая) пропорционально плотности числа фононов, которая определяется как

$$\frac{9N}{\omega_{\max}^3} \int_0^{\omega_{\max}} \frac{\omega^2 d\omega}{e^{\hbar\omega/T} - 1} \sim N \left(\frac{T}{\theta} \right)^3 \quad \text{для} \quad T \ll \hbar\omega_{\max} \equiv \theta,$$

где N - плотность числа атомов в решетке.

$$\begin{aligned} \Delta\varepsilon &\approx \frac{\vec{p} \cdot \hbar\vec{k}}{m} = \frac{p\Delta p \cos \phi}{m} \\ \Delta\varepsilon &\sim T \\ \cos \phi &\sim \frac{Tmc_s}{pT} \sim \frac{c_s}{v} \ll 1, \end{aligned}$$

$$\sum_{i=1}^n (\hbar\vec{k}_i)^2 \sim n(\hbar k)^2 \sim p^2 \rightarrow n \sim \left(\frac{c_s p}{T} \right)^2 \sim T^{-2}.$$

$$\tau_{\phi, e-ph} \sim \frac{n}{\Sigma_{e-ph}} \sim T^{-5}$$

$$\frac{\Delta\sigma}{\sigma} \sim - \frac{\lambda^2}{bl} \ln \frac{c\hbar}{evlH\tau}$$

$$\Delta\sigma(H) - \Delta\sigma(0) \sim - \frac{\lambda^2\sigma}{bl} \ln \frac{evlH\tau_{\phi}}{c\hbar}$$

Таким образом, магнитное поле $H_0 \sim \hbar c / (evl\tau_{\phi})$ подавляет интерференционный вклад траекторий, возвращающихся назад, и увеличивает проводимость.

IX. Эффект Холла в сильном магнитном поле 23

X. Термоэлектрические явления 28

XI. Термоманнитные явления в слабом магнитном поле 32

XII. Термоманнитные явления в сильном магнитном поле 33

XIII. Нормальный скин-эффект 36

XIV. Аномальный скин-эффект 37

XV. Аномальный скин-эффект. Решение кин.уравнения 40

XVI. Квантовые эффекты в магнитной восприимчивости электронной системы 46

XVII. Эффект де Гааза–ван Альфена

78. Остаточное сопротивление

79. Электрон-фононное взаимодействие

1.4 Kinetics in electrodynamics

1.4.1 Collisionless Plasma

Plasma - a fully ionized gas.

Here, there are well-known statements from electrodynamics, but in a more general formalism.

27. Самосогласованное поле

Debye's radius:

$$a^{-2} = \frac{4\pi}{T} \sum_a N_a (z_a e)^2,$$

Classical plasma: $T \gg \hbar^2 N^{2/3}/m$,

The system of self-consistent equations for plasma is:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_e}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f_e}{\partial \mathbf{r}} - e \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} [\mathbf{vB}] \right) \frac{\partial f_e}{\partial \mathbf{p}} &= 0 \\ \frac{\partial f_i}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f_i}{\partial \mathbf{r}} + ze \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} [\mathbf{vB}] \right) \frac{\partial f_i}{\partial \mathbf{p}} &= 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{rot } \mathbf{E} &= -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, & \text{div } \mathbf{B} &= 0 \\ \text{rot } \mathbf{B} &= \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}, & \text{div } \mathbf{E} &= 4\pi \rho \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \rho &= e \int (zf_i - f_e) d^3p \\ \mathbf{j} &= e \int (zf_i - f_e) \mathbf{v} d^3p \end{aligned}$$

28. Пространственная дисперсия в плазме

$$D_\alpha(t, \mathbf{r}) = E_\alpha(t, \mathbf{r}) + \int_0^\infty \int K_{\alpha\beta}(\tau, \boldsymbol{\rho}) E_\beta(t - \tau, \mathbf{r} - \boldsymbol{\rho}) d^3\rho d\tau$$

$$D_\alpha(t, \mathbf{r}) = E_\alpha(t, \mathbf{r}) + \int_0^\infty \int K_{\alpha\beta}(\tau, \boldsymbol{\rho}) E_\beta(t - \tau, \mathbf{r} - \boldsymbol{\rho}) d^3\rho d\tau$$

(write main statements)

29. Диэлектрическая проницаемость бесстолкновительной плазмы

$$\varepsilon_l = 1 - \frac{4\pi e^2}{k} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{df(p_x)}{dp_x} \frac{dp_x}{kv_x - \omega - i0}.$$

(add physical intuition!)

Proof.

$$\frac{\partial \delta f}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial \delta f}{\partial \mathbf{r}} = e \mathbf{E} \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{p}}.$$

$$\delta f = \frac{e \mathbf{E}}{i(\mathbf{k} \mathbf{v} - \omega)} \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{p}}.$$

(and then, there are statements about poles...)

□

30. Затухание Ландау

$$Q = - |\mathbf{E}|^2 \frac{\pi m e^2 \omega}{2k^2} \left. \frac{df(p_x)}{dp_x} \right|_{v_x=\omega/k}.$$

Диссипация возникает уже в бесстолкновительной плазме (Ландау, 1946)
(!! discuss meaning and parameters!!)

Proof.

$$\varepsilon_l'' = - \frac{4\pi^2 e^2 m}{k^2} \left. \frac{df(p_x)}{dp_x} \right|_{v_x=\omega/k}.$$

$$m \frac{d\delta w}{dt} = -eE(t, x_0) = -e \operatorname{Re} \left\{ E_0 e^{ikt(w_0 - \omega/k)} e^{t\delta} \right\}.$$

$$\delta w = -\frac{e}{m} \operatorname{Re} \frac{E(t, x_0)}{ik(w_0 - \omega/k) + \delta},$$

$$\delta x = -\frac{e}{m} \operatorname{Re} \frac{E(t, x_0)}{[ik(w_0 - \omega/k) + \delta]^2}.$$

□

31. Диэлектрическая проницаемость максвелловской плазмы

$$\varepsilon(\omega) = 1 - (\Omega_e/\omega)^2.$$

$$\varepsilon(\omega) = 1 - (\Omega_e/\omega)^2.$$

32. Продольные плазменные волны

$$\gamma = \sqrt{\frac{\pi}{8}} \frac{\Omega_e}{(ka_e)^3} \exp \left[-\frac{1}{2(ka_e)^2} - \frac{3}{2} \right]$$

(Л. Д. Ландау, 1946). В силу условия $ka_e \ll 1$, декремент затухания плазменных волн действительно оказывается экспоненциально малым. Он возрастает с уменьшением длины волны и при $ka_e \sim 1$ (когда формула (32, 7) уже неприменима) становится того же порядка величины, что и частота, так что понятие о распространяющихся плазменных волнах теряет смысл.

33. Ионно-эвуквые волны

$$\begin{aligned} \varepsilon_l &= 1 - \frac{\Omega_i^2}{\omega^2} + \frac{1}{(ka_e)^2} \left[1 + i\sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{\omega}{kv_T} \right]. \\ \varepsilon_l = 0 \quad \Rightarrow \quad \omega^2 &= \Omega_i^2 \frac{k^2 a_e^2}{1 + k^2 a_e^2} = \frac{zT_e}{M} \frac{k^2}{1 + k^2 a_e^2} \quad N_e = zN_i \\ \omega &= k\sqrt{\frac{zT_e}{M}}, \quad ka_e \ll 1. \end{aligned}$$

34. Релаксация начального возмущения

$$\begin{aligned} \varphi_{\omega\mathbf{k}}^{(+)} &= -\frac{4\pi e}{k^2 \varepsilon_l(\omega, k)} \int \frac{g_{\mathbf{k}}(\mathbf{p}) d^3 p}{i(kv - \omega - \omega)}, \\ \varphi_{\omega\mathbf{k}}^{(+)} &= -\frac{4\pi e}{k^2 \varepsilon_l(\omega, k)} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{g_{\mathbf{k}}(p_x) dp_x}{i(kv_x - \omega)}, \quad g_{\mathbf{k}}(p_x) := \int g_{\mathbf{k}}(\mathbf{p}) dp_y dp_z \end{aligned}$$

1.4.2 Collisions in Plasma by Landau

41. Интеграл столкновений by Ландау
42. Передача энергии между электронами и ионами
43. Длина пробега частиц в плазме
44. Лоренцева плазма
45. Убегающие электроны
46. Сходящийся интеграл столкновений
47. Взаимодействие через плазменные волны

1.5 Basics of quantum kinetics

1.5.1 Lindblad equation

Lindblad equation

(!!! write about it!!)

Об уравнениях для матрицы плотности (???)

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{\rho}_I = [\hat{V}_I(t), \hat{\rho}_I(t)]$$

$$\hat{\rho}_I(t) = \hat{\rho}(0) - \frac{i}{\hbar} \int_0^t [\hat{V}_I(t'), \hat{\rho}_I(t')] dt'$$

$$\frac{d}{dt} \hat{\rho}_I(t) = -\frac{i}{\hbar} [\hat{V}_I(t), \hat{\rho}_I(0)] - \frac{1}{\hbar^2} \int_0^t dt' [\hat{V}_I(t), [\hat{V}_I(t'), \hat{\rho}_I(t')]]$$

$$\hat{H} = \hat{H}_r + \hat{H}_s + \hat{V}$$

$$\hat{V} = ga^\dagger \hat{\sigma}_- + g^* a \hat{\sigma}_+$$

1.5.2 Kinetics for quantum optics: basic models

(??? see note on quantum optics and open quantum systems for now. there are many formulas, some of them are big, but I'll select most important later)

1.5.3 Green's functions, Keldysh method

различные функции Грина (????)

Известно, что

$$G = \begin{pmatrix} G^{--} & G^{-+} \\ G^{+-} & G^{++} \end{pmatrix}$$

$$G_{\alpha\beta}^{-+}(r, t; r', t') = i \langle \psi_{\beta}^{+}(r', t') \psi_{\alpha}(r, t) \rangle$$

$$G_{\alpha\beta}^{+-}(r, t; r', t') = -i \langle \psi_{\alpha}(r, t) \psi_{\beta}^{+}(r', t') \rangle$$

$$G_{\alpha\beta}^{-}(-r, t; r', t') = \theta(t - t') G_{\alpha\beta}^{+-}(r, t; r', t') + \theta(t' - t) G_{\alpha\beta}^{-+}(r, t; r', t')$$

$$G_{\alpha\beta}^{++}(r, t; r', t') = \theta(t - t') G_{\alpha\beta}^{-+}(r, t; r', t') + \theta(t' - t) G_{\alpha\beta}^{+-}(r, t; r', t')$$

Функция распределения

Функция распределения:

$$n(t, \mathbf{R}, \mathbf{p}) = -i \int G_{\omega, \mathbf{p}}^{-+}(t, \mathbf{R}) \frac{d\omega}{2\pi}$$

$$G_{\omega, \mathbf{p}}^{-+}(t, \mathbf{R}) = \int e^{i\omega t - i\mathbf{p}\mathbf{r}} G_{\omega, \mathbf{p}}^{-+} \left(t + \frac{\tau}{2}, \mathbf{R} + \frac{\mathbf{r}}{2}; t - \frac{\tau}{2}, \mathbf{R} - \frac{\mathbf{r}}{2} \right) d\mathbf{r} d\tau$$

$$[\hat{G}_0(0, 1)]^{-1} \hat{G}(1, 2) = \hat{\tau}_3 \delta(X_1 - X_2) + \int \hat{\tau}_3 \hat{\Sigma}(1, 3) \hat{G}(3, 2) d^4 X_3$$

Функция Грина для свободных и равновесных фермионов (???)

Функция Грина для свободных и равновесных фермионов:

$$\hat{G}^{(0)}(\omega, \mathbf{p}) = \begin{pmatrix} \frac{1-n_F(\xi_p)}{\omega-\xi_p+i\delta} + \frac{n_F(\xi_p)}{\omega-\xi_p-i\delta} & 2\pi n_F(\xi_p) \delta(\omega-\xi_p) \\ -2\pi i (1-n_F(\xi_p)) \delta(\omega-\xi_p) & -\frac{1-n_F(\xi_p)}{\omega-\xi_p-i\delta} - \frac{n_F(\xi_p)}{\omega-\xi_p+i\delta} \end{pmatrix}$$

Отклик на механическое возмущение

(по книге Колоколова)

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{\rho}_I}{\partial t} &= -\frac{i}{\hbar} [\hat{V}_I, \hat{\rho}_I] - \gamma (\hat{\rho}_I - \hat{\rho}_0) \\ \hat{\rho}_I(t) &= \hat{\rho}_0 - \frac{i}{\hbar} e^{-\gamma t} \int_{-\infty}^t e^{\gamma t'} \left[\hat{V}_I(t'), \underbrace{\hat{\rho}_I(t')}_{\approx \hat{\rho}_0} \right] dt' \quad (\text{Kubo}) \\ \langle j_\alpha \rangle &= \sum_l \frac{e}{m} \langle p_{\alpha l} \rangle = \frac{e}{m} \sum_l Sp(\hat{\rho} \hat{p}_{\alpha l}). \end{aligned}$$

$$Sp(e^{i\hat{H}_0\tau/\hbar} \hat{p}_{\alpha l} [\hat{r}_{\beta j}, \hat{\rho}_0] e^{-i\hat{H}_0\tau/\hbar}) = Sp(\hat{p}_{\alpha l} [\hat{r}_{\beta j}, \hat{\rho}_0]) = Sp(\hat{\rho}_0 [\hat{p}_{\alpha l}, \hat{r}_{\beta j}]) = -i\hbar \delta_{lj} \delta_{\alpha\beta}.$$

Таким образом, тензор проводимости равен

$$\sigma_{\alpha\beta} = \frac{ine^2}{m(\omega + i\gamma)} \delta_{\alpha\beta}$$

92. Гриневские функции неравновесной системы

93. Диаграммная техника для неравновесных систем

94. Собственно-энергетические функции

95. Кинетическое уравнение в диаграммной технике

1.5.4 Driven-Dissipative Systems

(see Kamenev)

Rotating-Wave Approximation

Lindblad Equation

$$\partial_t \rho(t) = -i[H, \rho] + \sum_a \gamma_a \left(L_a \rho L_a^\dagger - \frac{1}{2} \{L_a^\dagger L_a, \rho\} \right)$$

(write comments what is going on!)

From Keldysh to Lindblad

Linear Systems

Quantum Heating

Quantum Activation

Dark Space

Symmetries of Dissipative Evolution

Lindbladian Instantons

Optomechanical Cooling

1.5.5 Typical Phenomena of Quantum Kinetics

1.5.6 Main Models of Quantum Kinetics

Caldeira-Leggett model

(??? here are the main conclusions of this model!!)

Частица массой M находится в потенциале $U_0(q)$ и взаимодействует с внешней средой - термостатом, который представляет собой бесконечный набор $\{\alpha\}$ фононов, т.е. осцилляторов с частотами ω_α .

$$H_{\text{B3}} = \sum_{\alpha} \left(\frac{m\dot{x}_{\alpha}^2}{2} + \frac{m\omega_{\alpha}^2 x_{\alpha}^2}{2} \right)$$

$$U_{\text{B3}} = \sum_{\alpha} \gamma(q) C_{\alpha} x_{\alpha}$$

$$J(\Omega) := \frac{\pi}{2} \sum_{\alpha} \frac{C_{\alpha}^2}{m\omega_{\alpha}} \delta(\Omega - \omega_{\alpha})$$

$$S = \int \left[\frac{M\dot{q}^2}{2} - U_0(q) + \sum_{\alpha} \left(\frac{m\dot{x}_{\alpha}^2}{2} - \frac{m\omega_{\alpha}^2 x_{\alpha}^2}{2} \right) - \gamma(q) \sum_{\alpha} C_{\alpha} x_{\alpha} \right] dt$$

$$M\ddot{q} + U'_0(q) = -\gamma'(q) \sum_{\alpha} C_{\alpha} x_{\alpha}$$

$$m\ddot{x}_{\alpha} + m\omega_{\alpha}^2 x_{\alpha} = -\gamma(q) C_{\alpha}$$

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

$$= C_{\alpha} \int_{-\infty}^{\infty} K_{\alpha}^R(t-s) \gamma(q_s) ds + x_{\alpha}^{(\text{cs})}(t)$$

$$K_{\alpha}^R(t) = -\vartheta(t) \frac{\sin \omega_{\alpha} t}{m\omega_{\alpha}}$$

$$K_{\alpha}^R(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} K_{\alpha}^R(t) e^{i\omega t} dt = -\frac{1}{m [\omega_{\alpha}^2 - (\omega + i\delta)^2]},$$

$$F(t) = \gamma'(q) \int_{-\infty}^{\infty} K^R(t-s) \gamma(q_s) ds + f(t)$$

где $f(t) = -\gamma(q) \sum_{\alpha} C_{\alpha} \left(x_{\alpha}(0) \cos \omega_{\alpha} t + \frac{\dot{x}_{\alpha}(0)}{\omega_{\alpha}} \sin \omega_{\alpha} t \right)$.

$$K^R(t) = - \sum_{\alpha} C_{\alpha}^2 K_{\alpha}^R(t) = \vartheta(t) \sum_{\alpha} C_{\alpha}^2 \frac{\sin \omega_{\alpha} t}{m \omega_{\alpha}}$$

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

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

$$K^R(\omega) = K_0 + K_1^R(\omega); \quad K_0 := \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{J(\Omega)}{\Omega} d\Omega = \sum_{\alpha} \frac{C_{\alpha}^2}{m \omega_{\alpha}}; \quad K_1^R(\omega) := \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{J(\Omega)}{\Omega} \frac{\omega^2}{\Omega^2 - (\omega + i\delta)^2} d\Omega$$

$$K^R(t) = K_0 \delta(t) - \eta \delta'(t)$$

$$\begin{aligned} M\ddot{q} + U'_0(q) &= K_0 \gamma'(q_t) \int_{-\infty}^{\infty} \delta(t-s) \gamma(q_s) ds - \eta \gamma'(q_t) \int_{-\infty}^{\infty} \delta'(t-s) \gamma(q_s) ds + f(t) = \\ &= K_0 \gamma'(q) \gamma(q) - \eta \gamma'^2(q) \dot{q}(t) + f(t) \end{aligned}$$

$$M\ddot{q} + \mu(q) \dot{q} + U'(q) = f(t)$$

где $U(q) = U_0(q) - \frac{1}{2} K_0 \gamma^2(q)$ и $\mu(q) = \eta \left(\frac{\partial \gamma(q)}{\partial q} \right)^2$.

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

$$\langle x_{\alpha}(0) x_{\beta}(0) \rangle \stackrel{\alpha \neq \beta}{=} 0$$

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

$$\langle x_{\alpha}(0) \dot{x}_{\alpha}(0) \rangle = 0 \text{ (ср. от полной производной по времени),}$$

$$\langle \dot{x}_{\alpha}^2(0) \rangle = \omega_{\alpha}^2 \langle x_{\alpha}^2(0) \rangle.$$

Harmonic oscillator:

$$\hat{H}_{\alpha} = \frac{\hat{p}_{\alpha}^2}{2m} + \frac{m \omega_{\alpha}^2 \hat{x}_{\alpha}^2}{2},$$

$$\hat{x}_{\alpha} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_{\alpha}}} (\hat{a}^{+} + \hat{a}), \quad \hat{p}_{\alpha} = i \sqrt{\frac{\hbar m \omega_{\alpha}}{2}} (\hat{a}^{+} - \hat{a}),$$

$$\frac{1}{2} \langle \hat{x}_\alpha \hat{p}_\alpha + \hat{p}_\alpha \hat{x}_\alpha \rangle = i \frac{\hbar}{2} \langle 2\hat{a}^+ \hat{a}^+ - 2\hat{a} \hat{a} \rangle = 0,$$

$$\langle x_\alpha^2(0) \rangle \equiv \langle \hat{x}_\alpha^2 \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega_\alpha} \langle \hat{a}^+ \hat{a} + \hat{a} \hat{a}^+ \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega_\alpha} \left(\frac{\hbar}{e^{\hbar\omega_\alpha/T} - 1} + 1 \right) = \frac{\hbar}{2m\omega_\alpha} \operatorname{cth} \frac{\hbar\omega_\alpha}{2T}.$$

$$J(\Omega) = \frac{\pi}{2} \sum_\alpha \frac{C_\alpha^2}{m\omega_\alpha} \delta(\Omega - \omega_\alpha)$$

$$\begin{aligned} \langle f(t)f(t') \rangle &= \sum_\alpha C_\alpha^2 \frac{\hbar}{2m\omega_\alpha} \operatorname{cth} \frac{\hbar\omega_\alpha}{2T} \cos \omega_\alpha(t-t') = \\ &= \frac{\hbar}{\pi} \int_0^{+\infty} J(\Omega) \operatorname{cth} \frac{\hbar\Omega}{2T} \cos \Omega(t-t') d\Omega = \\ &= \frac{\eta}{2\pi} \int_0^{+\infty} \hbar\Omega \operatorname{cth} \frac{\hbar\Omega}{2T} (e^{i\Omega(t-t')} + e^{-i\Omega(t-t')}) d\Omega \equiv \eta \int_{-\infty}^{+\infty} \hbar\Omega \operatorname{cth} \frac{\hbar\Omega}{2T} e^{-i\Omega(t-t')} \frac{d\Omega}{2\pi} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle f(t)f(t') \rangle_\Omega &= \int_{-\infty}^{+\infty} \langle f(t)f(t') \rangle e^{i\Omega(t-t')} dt = \\ &= \eta \hbar\Omega \operatorname{cth} \frac{\hbar\Omega}{2T} = \\ &= \begin{cases} 2\eta T, & \text{классический предел, } \hbar = 0, \\ \eta \hbar |\Omega|, & \text{квантовый предел, } T = 0 \end{cases} \\ \langle f(t)f(t') \rangle &= \begin{cases} 2\eta T \delta(t-t'), & \text{классический предел, } \hbar = 0, \\ -\frac{\eta \hbar}{\pi(t-t')^2}, & \text{квантовый предел, } T = 0. \end{cases} \end{aligned}$$

$$\int_0^{+\infty} x \cos x dx = \lim_{\delta \rightarrow +0} \operatorname{Re} \int_0^{+\infty} x e^{(i-\delta)x} dx = -1.$$

(????)

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

$$M\ddot{q} + \eta\dot{q} + U'(q) = f(t),$$

$$q(\omega) = \alpha(\omega)f(\omega),$$

$$\operatorname{Im}\{\alpha(\omega)\}^{-1} = -\eta\omega,$$

$$\langle f(t)f(t') \rangle_\omega = \eta\omega \hbar \operatorname{cth} \frac{\hbar\omega}{2T},$$

1.5.7 Spin Models with Dissipation: Main Methods and Examples

(maybe I'll create some other sections in the 2nd 1st part about it)

Description of dissipation in nearly integrable spin models

We consider a diagonal Hamiltonian, or in other words, one that can be written as:

$$H_0 = \sum_p \varepsilon_p n_p + E_0$$

Suppose, there is a dissipation in the model. Then the density matrix obeys the following equation:

$$\frac{d\rho}{dt} = -i[H_0, \rho] + \hat{\mathcal{D}}[\rho], \quad \hat{\mathcal{D}}[\rho] := \epsilon \left(\sum_i L_i \rho L_i^\dagger - \frac{1}{2} \{L_i^\dagger L_i, \rho\} \right).$$

In case of this model, it also can be expressed as:

$$\rho_\mu(t) = \frac{e^{-\sum_{q,\sigma} \mu_q(t) n_{q,\sigma}}}{\text{Tr}[e^{-\sum_{q,\sigma} \mu_q(t) n_{q,\sigma}}]}.$$

This is called the GGE. The key feature of it is that there are as many coefficients μ as many conserved quantities (this number is equal to the number of the lattice sites). Then, this form gives us the following equations of the parameters μ and $\langle n \rangle$:

$$\langle \dot{n}_p \rangle(t) \approx \text{Tr} [n_p \hat{\mathcal{D}}[\rho_\mu(t)]] ,$$

$$\dot{\mu}_q(t) = - \sum_{p'} (\chi^{-1})_{p,p'}(t) \langle \dot{n}_{p'} \rangle(t). \quad \chi_{p,p'}(t) := \langle n_p n_{p'} \rangle_{\rho_{\mu(t)}} - \langle n_p \rangle_{\rho_{\mu(t)}} \langle n_{p'} \rangle_{\rho_{\mu(t)}}.$$

$$\langle O \rangle_{\rho_\mu} := \text{Tr}[O \rho_\mu].$$

The GGE can be used simpler. The $\langle \dot{n}_m \rangle$ can be evaluated from the equation that follows from the above:

$$\langle \dot{n}_m \rangle = \epsilon \sum_j \langle L_j^\dagger n_m L_j \rangle - \langle L_j^\dagger L_j n_m \rangle.$$

So, we need just to plug the Lindblad operator and get the simplified differential equation for $\langle n \rangle$. The m is the momenta index, it is not k, p or q to make it more distinct. Note, that this formula assumes that Lindblad operators are time-independent.

(and then do what Iris did numerically to obtain the plots)

Description of dissipation in nearly other spin models

(???)

1.6 Mathematics for Kinetics

Одномерное движение: дискретное блуждание на прямой

Асимптотическое поведение на больших временах, связь с уравнением диффузии.
Обобщение на случай произвольной размерности пространства.

Уравнение диффузии: возможные типы граничных условий

Одномерное уравнение диффузии

Диффузия в ограниченной области

Возможные граничные условия для уравнения диффузии и их физическая интерпретация.

Отражающие граничные условия

.

Поглощающие граничные условия

.

Граничное условие, задающее постоянную пристеночную концентрацию

.

задача о случайно расположенных на прямой поглощающих центрах

Сумма большого количества независимых одинаково распределённых случайных величин.

Задача о диффузии на прямой со случайно расположенными поглощающими центрами: принцип формирования статистики;

определение статистики в терминах оптимальных флуктуаций, перемежаемость статистики.

1.5

Закон Аррениуса

Схема построения решения для функции распределения.

Обобщение решения на различные случаи: двумерный случай; случай, когда потенциал в точке перевала имеет особенность типа $-|x|$.

1.7

Проводимость классического газа с трением

Проводимость для модели среды с трением.

Классический эффект Холла.

1.8

Шумы, возникающие за счет активационных переходов

Модель туннельной системы с двумя локальными минимумами.

1.9

Стохастический резонанс

3

Перенос и перемешивание в случайных потоках

Понятие о хаотическом потоке, примеры таких течений.

Перенос примеси потоком. Эйлеров и лагранжевы способы описания.

Диффузия примеси.

Размешивание примеси хаотическим потоком.

1.7 Physics for Kinetics

Physics for quantum kinetics

91. Мацубаровская восприимчивость

1.8 Main General Properties and Abstract Theory

1.8.1 Thermalization: Overview

(there are a lot of statements about it, I'll just summarize most important ones)

1.8.2 H-theorem, General Properties

4. H-теорема

5. Переход к макроскопическим уравнениям

H-теорема и тепловое равновесие

$$Z = \prod_i \frac{(n_i + g - 1)!}{(g - 1)! (n_i)!} \approx \prod_i \frac{(n_i + g)!}{(g)! (n_i)!},$$

$$\frac{dS}{dt} = \sum_i \ln \frac{(n_i + g)}{n_i} \frac{dn_i}{dt} = \sum_{\mathbf{k}} \ln \frac{(n_{\mathbf{k}} + 1)}{n_{\mathbf{k}}} \frac{dn_{\mathbf{k}}}{dt} \quad S = \ln Z$$

Энтропия не убывает.

Proof: (??? в чем идея???)

$$\begin{aligned} \frac{dS}{dt} &= \frac{\pi}{V} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} |V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}-\mathbf{q}, \mathbf{q}}|^2 \delta(\omega_{\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{q}} - \omega_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}) \frac{1}{n_{\mathbf{k}}} [n_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} n_{\mathbf{q}} - n_{\mathbf{k}} (n_{\mathbf{q}} + n_{\mathbf{k}-\mathbf{q}})] - \\ &\quad - \frac{2\pi}{V} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} |V_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \mathbf{k}, \mathbf{q}}|^2 \delta(\omega_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \omega_{\mathbf{q}} - \omega_{\mathbf{k}}) \frac{1}{n_{\mathbf{k}}} [n_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{q}} - n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} (n_{\mathbf{q}} + n_{\mathbf{k}})] = \\ &= \frac{\pi}{V} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} |V_{\mathbf{k}, \mathbf{q}, \mathbf{k}-\mathbf{q}}|^2 \delta(\omega_{\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{q}} - \omega_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}) \frac{[n_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} n_{\mathbf{q}} - n_{\mathbf{k}} (n_{\mathbf{q}} + n_{\mathbf{k}-\mathbf{q}})]^2}{n_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} n_{\mathbf{q}}} \geq 0 \end{aligned}$$

Найдем равновесное число волн при температуре T из условия максимальности энтропии S . При трехволновом взаимодействии полная энергия $E = \sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} = \text{Const}$, поскольку она сохраняется в каждом элементарном акте взаимодействия. Условие максимальности энтропии при постоянном значении энергии имеет вид

$$\frac{\delta(S - \lambda E)}{\delta n_{\mathbf{k}}} = \frac{\delta}{\delta n_{\mathbf{k}}} \sum_{\mathbf{k}} \left(\ln \frac{(n_{\mathbf{k}} + 1)}{n_{\mathbf{k}}} - \lambda \omega_{\mathbf{k}} \right) \delta n_{\mathbf{k}} = 0,$$

откуда

$$n_{\mathbf{k}}^0 = \frac{1}{e^{\omega_{\mathbf{k}}/T} - 1}$$

где мы положили $\lambda = T$, чтобы совпадало с равновесным бозераспределением при температуре T . В пределе $T \gg \omega_{\mathbf{k}}$ получаем

$$n_{\mathbf{k}}^0 = \frac{T}{\omega_{\mathbf{k}}}$$

- распределение Джинса.

Затухание звука

$$\frac{dn_{\mathbf{k}}}{dt} = -\frac{2\pi}{V} \sum_{\mathbf{q}} |V_{\mathbf{k}+\mathbf{q};\mathbf{k},\mathbf{q}}|^2 \delta(\omega_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \omega_{\mathbf{q}} - \omega_{\mathbf{k}}) [n_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{q}} - n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} (n_{\mathbf{q}} + n_{\mathbf{k}})]$$

Для $n_{\mathbf{k}} \gg n_{\mathbf{q}}^0 = T/\omega_{\mathbf{q}}$, $n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^0 = T/\omega_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}$ кинетическое уравнение имеет решение вида $n_{\mathbf{k}}(t) = n_{\mathbf{k}}(0) \exp[-2\gamma_{\mathbf{k}} t]$.

$$\gamma_{\mathbf{k}} = \pi \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} |V_{\mathbf{k}+\mathbf{q};\mathbf{k},\mathbf{q}}|^2 \frac{T\omega_{\mathbf{k}}}{\omega_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}\omega_{\mathbf{q}}} \delta(\omega_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \omega_{\mathbf{q}} - \omega_{\mathbf{k}}),$$

$$V_{\mathbf{k}+\mathbf{q};\mathbf{k},\mathbf{q}} = \sqrt{\frac{c_s}{8\rho_0}} |\mathbf{k} + \mathbf{q}| k q \quad (3g + \cos \theta_{\mathbf{k},\mathbf{q}} + \cos \theta_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{q}} + \cos \theta_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{k}}).$$

$$|V_{\mathbf{k}+\mathbf{q};\mathbf{k},\mathbf{q}}|^2 = \frac{c_s}{8\rho_0} 9(g+1)^2 k q (k+q).$$

$$\gamma_{\mathbf{k}} = \frac{9(g+1)^2 T k}{32\pi \rho_0 c_s} \int_0^{T/c_s} q(k+q) dq = \frac{3(g+1)^2 T^4 k}{32\pi \rho_0 c_s^4}$$

Потоки и колмогоровские спектры

Стационарное решение кинетического уравнения

кинетическое уравнение для трехволнового взаимодействия в симметричном виде:

$$\frac{\partial}{\partial t} n_{\mathbf{k}} = I[n_{\mathbf{k}}] \equiv \pi \int \frac{d\mathbf{k}_1 d\mathbf{k}_2}{(2\pi)^d} (R_{\mathbf{k},\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2} - R_{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}\mathbf{k}_2} - R_{\mathbf{k}_2,\mathbf{k}\mathbf{k}_1}),$$

(????)

$$I[n_{\mathbf{k}}] = \int \frac{d\mathbf{k}_1 d\mathbf{k}_2}{(2\pi)^d} R_{\mathbf{k};\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2} (1 - \lambda_1^\gamma - \lambda_2^\gamma) \quad (\text{Кац-Конторович})$$

$$\gamma = 2d + 2m - 2b - a, \lambda_2 = k/k_2.$$

Стационарное решение кинетического уравнения возможно, если

$$(1 - \lambda_1^\gamma - \lambda_2^\gamma) = 1 - \left(\frac{\omega}{\omega_1}\right)^\nu - \left(\frac{\omega}{\omega_2}\right)^\nu = 0,$$

$$\lambda_1 := \frac{k}{k_1} = \left(\frac{\omega}{\omega_1}\right)^{1/a}, \quad \lambda_2 := \frac{k}{k_2} = \left(\frac{\omega}{\omega_2}\right)^{1/a}, \quad \nu := \frac{2(d+m-b)-a}{a}$$

$$\frac{\partial n(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = D\Delta n(\mathbf{r}, t) + 4\pi q\delta(\mathbf{r})$$

Это уравнение имеет стационарное решение $n(\mathbf{r}) = q/(Dr)$. Плотность потока частиц $\mathbf{j} = -D\nabla n$, тогда $\text{div } \mathbf{j} = -D\Delta n$, и для сферически симметричного источника

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 j_r) = -D\Delta n(\mathbf{r}, t)$$

Интегрируя это уравнение и умножая на площадь, найдем поток числа частиц

$$J_r = -4\pi \int_0^r r'^2 D\Delta n(\mathbf{r}') dr'$$

$$\begin{aligned} J_r &= -4\pi \int_0^r r'^2 D \frac{1}{r'^2} \frac{\partial}{\partial r'} \left(r'^2 \frac{\partial}{\partial r'} \frac{qr'^{s-1}}{D} \right) dr' = \\ &= -4\pi q(s-1)(r^s)_{s \rightarrow +0} = 4\pi q. \end{aligned}$$

Поток энергии равен

$$P(q) \sim \int_0^q k^2 c_s k s \frac{A^2}{\rho_0} k^{-4+2s} dk \Big|_{s \rightarrow 0} \sim \frac{c_s A^2}{\rho_0} = \text{Const.}$$

Значит, константу A в стационарном колмогоровском решении кинетического уравнения можно представить в виде

$$A = \alpha \left(\frac{P\rho_0}{c_s} \right)^{1/2}$$

где α - численный множитель порядка единицы.

Сшивка с накачкой

Сходимость интеграла столкновений

Part II

Special Kinetics in a Nutshell

2 Fundamentals of kinetics: details

(всякие рассуждения про применимости кинетики, т.п.. про H-теорему и всякое такое, что не нужно для решений задач)

2.1 Other Proofs of Known Fundamental Equations and Their Modifications

16. Динамический вывод кинетического уравнения

(this is about BBKY hierarchy, useless but fundamental method, I'll write later)

17. Кинетическое уравнение с учетом тройных столкновений

$$f^{(3)}(t, \tau_1, \tau_2, \tau_3) = f^{(1)}(t_0, \tau_{10}) f^{(1)}(t_0, \tau_{20}) f^{(1)}(t_0, \tau_{30}).$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial f(t, \tau_1)}{\partial t} + \mathbf{v}_i \frac{\partial f(t, \tau_1)}{\partial \mathbf{r}_1} &= \text{St}^{(2)} f + \text{St}^{(3)} f, \\ \text{St}^{(2)} f(t, \tau_1) &= \int \frac{\partial U_{12}}{\partial \mathbf{r}_1} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1} \left\{ \hat{S}_{12} f(t, \tau_1) f(t, \tau_2) \right\} d\tau_2, \\ \text{St}^{(3)} f(t, \tau_1) &= \frac{1}{\mathcal{N}} \int \frac{\partial U_{12}}{\partial \mathbf{r}_1} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1} \left\{ \hat{R}_{123} f(t, \tau_1) f(t, \tau_2) f(t, \tau_3) \right\} d\tau_2 d\tau_3. \end{aligned}$$

(meaning???)

Proof. (write just words)

□

18. Виримальное разложение кинетических коэффициентов

Независимость коэффициентов теплопроводности и вязкости от плотности (или давления) газа является следствием учета одних только парных столкновений молекул. Именно для таких столкновений их частота (т.е. число столкновений, испытываемых в 1 с заданной молекулой) пропорциональна плотности N , длина пробега $l \simeq 1/N$, а поскольку η и χ пропорциональны Nl , они оказываются независимыми от N . Получающиеся таким образом значения (обозначим их η_0 и x_0) являются, конечно, лишь первыми членами разложения этих величин по степеням плотности (эти разложения называют виримальными). Уже в следующем приближении появляется зависимость от плотности вида

$$x = x_0 (1 + \alpha N d^3), \quad \eta = \eta_0 (1 + \beta N d^3),$$

где d -параметр порядка величины молекулярных размеров, а α, β -безразмерные постоянные. Эти первые поправки имеют

$$x = x_0 \left[1 + \alpha_1 N d^3 + \alpha_2 (N d^3)^2 \ln \frac{1}{N d^3} + \dots \right]$$

Proof. (it is 2 page LL9, so I'll write just words later)

□

3 Other Properties of Typical Models

3.1 Kinetics of gases and liquids: details

25. Амбиполярная диффузия

26. Подвижность ионов в растворах сильных электролитов

3.2 Kinetics in condensed matter: details

3.2.1 Kinetics of phonons: other models

Гамильтонов формализм для нелинейных волн

$$H = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{s=0}^n \int d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_s d\mathbf{r}_{s+1} \dots d\mathbf{r}_n A(\mathbf{r}_1 \dots \mathbf{r}_n) Q(\mathbf{r}_1) \dots Q(\mathbf{r}_s) P(\mathbf{r}_{s+1}) \dots P(\mathbf{r}_n)$$

$$H_2 = \frac{1}{2} \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 [A(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) P(\mathbf{r}_1) P(\mathbf{r}_2) + B(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) Q(\mathbf{r}_1) Q(\mathbf{r}_2)] + \\ + \frac{1}{2} \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 C(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) Q(\mathbf{r}_1) P(\mathbf{r}_2)$$

переходя к фурье-компонентам, получим

$$H_2 = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} [A_{\mathbf{k}} P_{\mathbf{k}} P_{-\mathbf{k}} + B_{\mathbf{k}} Q_{\mathbf{k}} Q_{-\mathbf{k}} + C_{\mathbf{k}} Q_{\mathbf{k}} P_{-\mathbf{k}}].$$

$$H_2 = \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^* a_{\mathbf{k}},$$

Следующий, кубический по каноническим переменным вклад

$$H_3 = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} a_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}_1}^* a_{\mathbf{k}_2}^* \Delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) + c.c. + \\ + \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} U_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} a_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}_1} a_{\mathbf{k}_2} \Delta(\mathbf{k} + \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2) + c.c.$$

3.2.2 Determination of Structural Properties of Materials through Elastic Scattering

(более подробно - см. конд среды)

В. Неупругое рассеяние нейтронов. 47

С. Фактор Дебая–Уоллера.

3.3 Kinetics in electrodynamics: details

3.3.1 Plasma in Magnetic Field by Landau

(не уверен, насколько нужен этот раздел, но ладно, пусть побудет)

52. Диэлектрическая проницаемость бесстолкновительной холодной плазмы

53. Функция распределения в магнитном поле

54. Диэлектрическая проницаемость магнитоактивной максвелловской плазмы

55. Затухание Ландау в магнитоактивной плазме

56. Электромагнитные волны в магнитоактивной холодной плазме

57. Влияние теплового движения на распространение электромагнитных волн в магнитоактивной плазме

58. Уравнения гидродинамики магнитоактивной плазмы

59. Кинетические коэффициенты плазмы в сильном магнитном поле

$$\mathbf{j}^{(2)} = \frac{eN_e}{3\omega_{Be}^2} \nabla_{\perp} \langle v^2 v_{ei}(v) \rangle = \frac{4\sqrt{2\pi}ze^5 L_e N_e}{3m^3/2\omega_{Be}^2} \nabla_{\perp} \frac{P_e}{T^{3/2}}.$$

$$\mathbf{j}_{\perp} = \mathbf{j}^{(1)} + \mathbf{j}^{(2)}$$

$$\frac{1}{eN_e} \nabla_{\perp} P_e = \frac{\mathbf{j}_{\perp}}{\sigma_{\perp}} + \Re B [\mathbf{b} \mathbf{j}_{\perp}] + \alpha_{\perp} \nabla_{\perp} T + \mathcal{N} B [\mathbf{b} \nabla_{\perp} T],$$

определяющие эти коэффициенты. Положив сначала $\nabla T = 0$ и собирая члены порядка $1/\omega_{Be}$, найдем, что

$$\mathbf{j}^{(1)}/\sigma_{\perp} + \Re B [\mathbf{b} \mathbf{j}^{(2)}] = 0,$$

$$\sigma_{\perp} = \frac{3\pi^{1/2}e^2 N_e}{2^{1/2}mv_{ei}} \quad v_{ei} := v_{ei}(v_{Te}) = \frac{4\pi ze^4 L_e N_e}{m^{1/2}T^{3/2}}.$$

Электронная теплопроводность

Тепловой поток в плазме складывается как из электронной, так и из ионной частей; рассмотрим сначала первую из них. Электронный тепловой поток вычисляется как интеграл

$$\mathbf{q}_e = \frac{m}{2} \int v^2 \mathbf{v} \delta f_e d^3 p$$

В первом приближении по $1/\omega_{Be}$, подставив сюда (59, 5), находим

$$\mathbf{q}_e^{(1)} = -\frac{m}{2\omega_{Be}} ([br_{\perp}] \langle \mathbf{v} \rangle \mathbf{v} v^2) N_e = -\frac{m}{6\omega_{Be}} [br_{\perp}] N_e \langle v^4 \rangle,$$

откуда

$$\mathbf{q}_e^{(1)} = -\frac{5c}{2eB} [\mathbf{b} \nabla_{\perp}] P_e T = -\frac{w_e}{e} \mathbf{j}^{(1)} - \frac{5cP_e}{2eB} [\mathbf{b} \nabla_{\perp} T], \quad (59, 20)$$

где $w_e = 5T/2$ -электронная тепловая функция, отнесенная к одному электрону. Сравним с определением коэффициента $\mathcal{L}$ в (58, 14), получим

$$\mathcal{L}_e = -\frac{5cN_e T}{2eB^2}$$

60. Дрейфовое приближение

3.3.2 Kinetics in electrons in metals: other properties and effects

80. Кинетические коэффициенты металла. Высокие температуры

81. Процессы переброса в металле

82. Кинетические коэффициенты металла. Низкие температуры

83. Диффузия электронов по ферми-поверхности

$$s_\alpha = -D_{\alpha\beta} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial p_\beta} - a_\beta \right),$$

$$D_{\alpha\beta} = T^5 \frac{30\zeta(5)}{\pi^2 v_F^2} \left\langle \frac{M(\mathbf{t})}{u^5(\mathbf{t})} t_\alpha t_\beta \right\rangle$$

Плотность тока вычисляется по функциям φ как интеграл

$$\mathbf{j} = -\frac{2e}{(2\pi)^3} \int \varphi \mathbf{n} dS_F.$$

3.3.3 Kinetics in superconductors

96. Высокочастотные свойства сверхпроводников. Общая формула

97. Высокочастотные свойства сверхпроводников. Предельные случаи

98. Теплопроводность сверхпроводника

3.4 Basics of quantum kinetics: details

3.5 Fluctuations: Other Models

(I'll write later)

4 Special Models and Effects

(тут очень много специфики, так что раздел наберется большим, но пока тут мало что)

4.1 Special models of classical kinetics

4.1.1 Special random processes

Модель случайных энергий (REM).

Точное решение, стандартное репличное решение, «строгое репличное решение»
Доценко.

Схемы нарушения репличной симметрии.

Обзорно: направленный полимер в 2D и распределение Трейси-Уидома.

Стохастическая теория экстремумов.

Основное состояние REM в низкотемпературной фазе.

Процесс Пуассона-Дирихле.

Концентрация свободной энергии, направленный полимер на дереве.

Распределения Гумбеля, Вейбулла, Фреше.

Случайные блуждания со степенным распределением длины шага.

Распределение Леви.

Статистика величины гравитационного поля (распределение Хольцмарка).

4.1.2 Theory of Instabilities by Landau

- 61. Пучковая неустойчивость
- 62. Абсолютная и конвективная неустойчивость
- 63. Усиление и непропускание
- 64. Неустойчивость при слабой связи двух ветвей спектра колебаний
- 65. Неустойчивость конечных систем

4.2 Special kinetics of condensed matter systems

4.2.1 Other Kinetics in Collisionless Plasma by Landau

- 35. Плазменное эхо
- 36. Адиабатический захват электронов
- 37. Квазинейтральная плазма
- 38. Гидродинамика двухтемпературной плазмы
- 39. Солитоны в слабо диспергирующей среде
- 40. Диэлектрическая проницаемость вырожденной бесстолкновительной плазмы
- 48. Поглощение в плазме в высокочастотном пределе
- 49. Квазилинейная теория затухания Ландау
- 50. Кинетическое уравнение для релятивистской плазмы
- 51. Флуктуации в плазме

4.2.2 Kinetics in Fermi liquid

- 74. Кинетическое уравнение для квазичастиц в ферми-жидкости
- 75. Теплопроводность и вязкость ферми-жидкости
- 76. Поглощение звука в ферми-жидкости
- 77. Кинетическое уравнение для квазичастиц в бозе-жидкости

4.2.3 Kinetics of Bose Condensates

(see section 8 of Kamenev. not needed for now)

4.2.4 Special kinetic phenomena in metals

- 84. Гальваномагнитные явления в сильных полях. Общая теория

(??? idea??)

(?? result)

Proof:

$$\frac{dn}{dt} \approx -\frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} e \mathbf{v} \mathbf{E} + \frac{\partial \delta \tilde{n}}{\partial \tau}.$$

$$\delta \tilde{n} \equiv \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} e \mathbf{E} \mathbf{g}, \quad \mathbf{g} = \mathbf{g}(\varepsilon, p_z, \tau)$$

$$\frac{dn}{dt} = \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} e \mathbf{E} \left(-\mathbf{v} + \frac{\partial \mathbf{g}}{\partial \tau} \right). \quad \text{St } n \approx \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} e \mathbf{E} I(\mathbf{g})$$

85. Гальваноманнитные явления в сильных полях. Частные случаи

87. Скин-эффект в инфракрасной области

88. Геликоидальные волны в металле

89. Магнитоплазменные волны в металле

90. Квантовые осцилляции проводимости металла в магнитном поле

4.2.5 Dynamics of Disordered Superconductors

Nonlinear sigma-model can be generalized to include interactions in the Cooper channel. As its stationary point approximation the coupled Usadel, selfconsistency and Poisson equations are derived.

They are used to derive the Josephson current of an SNS junction, as well as the dispersion of the collective Carlson-Goldman mode of the superconductors.

In the gapless case one may explicitly integrate out fermionic degrees of freedom, obtaining the time-dependent Ginzburg-Landau action.

The latter is used to derive the Aslamazov-Larkin fluctuation correction to the normal state conductivity.

(maybe it is better to just draw a scheme)

4.3 Kinetics for Climate and Phenomena in Nature

(?? I'll learn it later, maybe)

4.4 Special abstract models

4.4.1 Kinetics of Phase Transitions by Landau

99. Одномерное автомодельное движение

100. Разрывы в начальных условиях

101. Одномерные бегущие волны

102. Образование разрывов в звуковой волне

103. Характеристики

Dynamics of Phase Transitions by sec. 9 of Kamenev

9.1 Dissipative Chains and Membranes 199

9.2 Equilibrium Statistical Mechanics 201

9.3 Critical Nucleation in First-Order Transitions 203

9.4 Dynamics Near a Classical Second-Order Transition 207

9.5 Hohenberg–Halperin Classification 212

9.6 Quantum Phase Transitions 215

9.7 Absorbing State Transitions 218

9.8 KPZ Dynamics of Growing Interfaces 228

9.9 Large Deviations in Stochastic Systems 234

9.10 Problems 240

9.10.1 Edwards–Wilkinson Universality Class 240

9.10.2 Height Distribution in 1d Edwards–Wilkinson Model 240

9.10.3 Soliton Solutions of Large Deviation Equations

4.4.2 Phase Synchronization

О модели Курамото, Сакагучи-Курамото

Модель Курамото

есть $N \gg 1$ осцилляторов, динамика фазы i -го:

$$\dot{\theta}_i = \Omega_i + \frac{K}{N} \sum_{j=1}^N \sin(\theta_j - \theta_i)$$

где $K \geq 0$ - это константа взаимодействия. Множитель $1/N$ введен, чтобы обеспечить конечность силы взаимодействия в пределе $N \rightarrow \infty$.

Параметр порядка:

$$re^{i\psi} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N e^{i\theta_j}$$

Подставим, используем метод среднего поля (??):

$$\dot{\theta}_i = \omega_i - Kr \sin \theta_i$$

где $\omega_i = \Omega_i - \Omega_0$.

(???)

$$\partial_t n(\theta|\omega) = -\partial_\theta[(\omega - Kr \sin \theta)n(\theta|\omega)]$$

$$n_{\text{drift}}(\theta|\omega) = \frac{\sqrt{\omega^2 - K^2 r^2}}{2\pi|\omega - Kr \sin \theta|}$$

Уравнение самосогласования

$$1 = K \int_{-\pi/2}^{+\pi/2} d\theta \cos^2 \theta g(\Omega_0 + Kr \sin \theta)$$

(?? получается из расписывание параметра порядка (???)

Разложим, получим критическое значение, после которого есть решения

$$K_c = \frac{2}{\pi g(\Omega_0)}$$

Модель Сакагучи-Курамото

$$\dot{\theta}_i = \Omega_i + \frac{K}{N} \sum_{j=1}^N \sin(\theta_j - \theta_i) + \xi_i$$

где $\langle \xi_i(t) \rangle = 0$, $\langle \xi_i(t_1) \xi_j(t_2) \rangle = 2D\delta_{ij}\delta(t_1 - t_2)$. Преобразуем

$$\dot{\theta}_i = \omega_i - Kr \sin \theta_i + \xi_i,$$

где $\omega_i = \Omega_i - \Omega_0$ - расстройка фазы.

Эволюция условной плотности распределения $n(\theta|\omega)$ фазы осциллятора при заданном значении расстройки его частоты ω описывается уравнением Фоккера-Планка

$$\partial_t n(\theta|\omega) = -\partial_\theta[(\omega - Kr \sin \theta)n(\theta|\omega)] + D\partial_\theta^2 n(\theta|\omega)$$

$$K_c(D) = \frac{2}{D} \left[\int_{-\infty}^{+\infty} g(\omega + \Omega_0) \frac{d\omega}{D^2 + \omega^2} \right]^{-1}$$

Общие указания для решения таких задач (????)

4.4.3 Nucleation (????)

(тоже есть тут теория про это, пока не до нее.)

Основные формулы

4.5 Kinetics of spin models

4.5.1 Quantum Quenches

(main methods and examples)

Overview of other examples

(subparagraphs about articles which I understood about it)

4.5.2 Eigenstate Thermalization of Spin Models: Extra Properties

(there are many articles about it)

4.5.3 Quantum Chaos

(?? there are many things about this also)

4.5.4 tGGE Method

Idea of Generalized Gibbs Ensembles

(short paragraph, same ideas as in statistical physics)

Idea of tGGE

(what Zala developed in a nutshell)

Examples of Usage of Generalized Gibbs Ensembles

(?? see articles about it)

4.6 Kinetics of Biological and Living Systems

4.6.1 Nonequilibrium Physics in Living Systems

see a good review here: <https://www.youtube.com/watch?v=a9QNKZT6V0&t=3421s>. I'll write a summary of it later.

this is the idea of this section, also below in the theory, there will be a big discussion of all these models.

4.7 Other Applications (????)

(потом мб увеличу разделы, пока малые они, потому что не так много этим занимался.)

4.7.1 Kinetics of polymers (!!??)

(тут крутые штуки, потом напишу, уже почти готов.)

4.7.2 Kinetics in cosmology (???)

(see note on cosmology for now, I'll collect later main ideas and formulas also here)

Part III

Fundamental Kinetic Laws and Equations

5 Fundamental Laws of Kinetics

Обсудим конструкции, которые лежат в основе кинетики, которые далее используются в различных задачах.

(тут минимально примеров и нет фокуса на газы. про газы - чисто следующая глава!!!)

5.1 Basics of Construction of Kinetic Theories and Their Solutions

(я хз, что писать, пусть повесит раздел, мб потом придумаю что-то. тренироваться нужно, вот что!)

5.1.1 Philosophy Underlying Physical Kinetics

(???? пропишу потом все это подробнее, все-таки такое тоже есть, пусть сразу это и не видно.)

What is quantum and what is classical kinetics

(I'll write connection between them so the later part about quantum kinetics will be not a surprise)

5.1.2 Detailed Balance

принцип детального равновесия в двух словах

(???)

у нас столкновений в одну сторону столько же, сколько в обратную

Принцип детального равновесия утверждает, что в равновесии число столкновений с переходом $\Gamma, \Gamma_1 \rightarrow \Gamma', \Gamma'_1$ равно числу столкновений с переходом $\Gamma'^T, \Gamma'^T_1 \rightarrow \Gamma^T, \Gamma^T_1$.

Здесь мы имеем дело с «детальным равновесием» в буквальном смысле этого слова: каждый микроскопический процесс столкновений балансируется обратным ему процессом.

Theory

Рассмотрим столкновения молекул, из которых одна обладает значениями величин Γ , лежащими в заданном интервале $d\Gamma$, а другая - в интервале $d\Gamma_1$, причем в результате столкновения эти молекулы приобретают значения Γ в интервалах соответственно $d\Gamma'$ и $d\Gamma'_1$;

для краткости будем говорить просто о столкновениях молекул Γ и Γ_1 с переходом

$$\Gamma, \Gamma_i \rightarrow \Gamma', \Gamma'_1.$$

Полное число таких столкновений, отнесенное к единице времени и к единице объема газа:

$$f(t, \mathbf{r}, \Gamma) d\Gamma$$

можно написать в виде произведения числа молекул в единице объема $f(t, \mathbf{r}, \Gamma) d\Gamma$ на вероятность каждой из них испытать столкновение рассматриваемого типа.

Эта вероятность пропорциональна числу молекул Γ_1 в единице объема $f(t, \mathbf{r}, \Gamma_1) d\Gamma_1$ и интервалам $d\Gamma', d\Gamma'_1$ значений величин Γ обеих молекул после столкновения.

Таким образом, число столкновений с переходом $\Gamma, \Gamma_1 \rightarrow \Gamma', \Gamma'_1$, происходящих в 1 с в 1см^3 , можно представить в виде

$$w(\Gamma', \Gamma'_1; \Gamma, \Gamma_1) f f_1 d\Gamma d\Gamma_1 d\Gamma' d\Gamma'_1$$

(здесь и ниже индексы у функций f отвечают индексам их аргументов Γ : $f_i \equiv f(t, \mathbf{r}, \Gamma_i)$, $f' \equiv f(t, \mathbf{r}, \Gamma')$ и т. п.);

коэффициент w есть некоторая функция всех перечисленных в ней аргументов Γ .

Отношение $w d\Gamma' d\Gamma'_1$ к абсолютной величине относительной скорости $\mathbf{v} - \mathbf{v}_1$ сталкивающихся молекул имеет размерность площади и представляет собой эффективное сечение столкновений:

$$d\sigma = \frac{w(\Gamma', \Gamma'_1; \Gamma, \Gamma_1)}{|\mathbf{v} - \mathbf{v}_1|} d\Gamma' d\Gamma'_1$$

Функция w может быть определена в принципе лишь путем решения механической задачи о столкновении частиц, взаимодействующих по данному закону.

Но некоторые свойства этой функции могут быть выяснены уже на основании общих соображений.

Как известно, вероятность столкновения обладает важным свойством, следующим из симметрии законов механики (классической или квантовой), относительно обращения знака времени (см. III, § 144, ага, уже пошел квантмех переучивать).

Обозначим посредством Γ^T значения величин, получающихся из Γ при обращении времени.

Эта операция меняет знаки всех импульсов и моментов; поэтому если $\Gamma = (\mathbf{p}, \mathbf{M})$, то $\Gamma^T = (-\mathbf{p}, -\mathbf{M})$.

Поскольку обращение времени переставляет состояния «до» и «после» столкновения, то

$$w(\Gamma', \Gamma'_1; \Gamma, \Gamma_1) = w(\Gamma^T, \Gamma_1^T; \Gamma'^T, \Gamma_1'^T)$$

Отметим, что это соотношение обеспечивает выполнение в состоянии статистического равновесия принципа детального равновесия, согласно которому в равновесии число столкновений с переходом $\Gamma, \Gamma_1 \rightarrow \Gamma', \Gamma'_1$ равно числу столкновений с переходом $\Gamma'^T, \Gamma_1'^T \rightarrow \Gamma^T, \Gamma_1^T$.

Действительно, представив эти числа в виде (2, 1), имеем

$$\begin{aligned} w(\Gamma', \Gamma'_1; \Gamma, \Gamma_1) f_0 f_{01} d\Gamma d\Gamma_1 d\Gamma' d\Gamma'_1 = \\ = f(\Gamma^T, \Gamma_1^T; \Gamma'^T, \Gamma_1'^T) f'_0 f'_{01} d\Gamma^T d\Gamma_1^T d\Gamma'^T d\Gamma_1'^T \end{aligned}$$

где f_0 -равновесная (больцмановская) функция распределения.

Произведение элементов фазового объема $d\Gamma d\Gamma_1 d\Gamma' d\Gamma'_1$ при обращении времени не меняется;

поэтому дифференциалы в обеих сторонах написанного равенства можно опустить.

Далее, при замене t на $-t$ энергия не меняется: $\varepsilon(\Gamma) = \varepsilon(\Gamma^T)$, где $\varepsilon(\Gamma)$ - энергия молекулы как функция величин Γ .

Поскольку равновесная функция распределения (в неподвижном как целое газе) зависит только от энергии,

$$f_0(\Gamma) = \text{const} \cdot e^{-\varepsilon(\Gamma)/T},$$

где T -температура газа, то и $f_0(\Gamma) = f_0(\Gamma^T)$.

Наконец, в силу закона сохранения энергии при столкновении двух молекул $\varepsilon + \varepsilon_1 = \varepsilon' + \varepsilon'_1$. Поэтому

$$f_0 f_{01} = f'_0 f'_{01}$$

и написанное выше равенство сводится к (2, 3). Это утверждение остается, конечно, справедливым и для газа, движущегося с макроскопической скоростью $\mathbf{V}$.

Равновесная функция распределения в таком случае есть

$$f_0(\Gamma) = \text{const} \cdot \exp\left(-\frac{\varepsilon(\Gamma) - pV}{T}\right)$$

и равенство (2,5) продолжает соблюдаться.

В силу сохранения импульса при столкновениях: $\mathbf{p} + \mathbf{p}_1 = \mathbf{p}' + \mathbf{p}'_1$.

Обратим внимание на то, что равенство (2,5) связано только с видом распределения (2,4) или (2,5) как функции величин Γ ; параметры же T и $\mathbf{V}$ могут при этом меняться по объему газа.

вторая формулировка

Принципу детального равновесия можно придать также и несколько иную формулировку.

Для этого произведем наряду с обращением времени еще и инверсию - изменение знака всех Координат.

Если молекулы не обладают достаточной симметрией, то при инверсии они «перейдут» в стереоизомерные молекулы, с которыми они не могут быть совмещены никаким поворотом молекулы как целого (????).

Другими словами, в таких случаях преобразование инверсии означало бы замену газа по существу другим (стереоизомерным) веществом и никаких новых заключений о свойствах его самого нельзя было бы сделать.

Если же симметрия молекул не допускает стереоизомерии, то при инверсии газ остается тем же и величины, описывающие свойства макроскопически однородного газа, должны остаться неизменными.

Обозначим посредством Γ^{TP} совокупность величин, получающихся из Γ одновременным обращением времени и инверсии.

Инверсия меняет знак всех обычных (полярных) векторов, в том числе импульса $\mathbf{p}$, и оставляет неизменными аксиальные векторы, в том числе вектор момента $\mathbf{M}$.

Поэтому, если $\Gamma = (\mathbf{p}, \mathbf{M})$, то $\Gamma^{TP} = (\mathbf{p}, -\mathbf{M})$.

Наряду с равенством (2,3) будем иметь также и равенство

$$w(\Gamma', \Gamma'_1; \Gamma, \Gamma_1) = w(\Gamma^{TP}, \Gamma_1^{TP}; \Gamma'^{TP}, \Gamma_1'^{TP})$$

О переходах, к которым относятся функции w в обеих сторонах равенства (2,3), говорят как об обращенных по времени по отношению друг к другу.

Они не являются в буквальном смысле прямым и обратным, поскольку отличаются значениями Γ (Γ и Γ^T).

Для одноатомного газа, однако, принцип детального равновесия может быть сформулирован также и в терминах прямых и обратных переходов.

Поскольку величинами Γ являются здесь всего три компоненты импульса атома, то $\Gamma = \Gamma^{TP} = \mathbf{p}$ и из (2,7) имеем

$$w(\mathbf{p}', \mathbf{p}'_1; \mathbf{p}, \mathbf{p}_1) = w(\mathbf{p}, \mathbf{p}_1; \mathbf{p}', \mathbf{p}'_1)$$

Здесь мы имеем дело с «детальным равновесием» в буквальном смысле этого слова: каждый микроскопический процесс столкновений балансируется обратным ему процессом.

Функция w удовлетворяет еще одному общему соотношению, не имеющему отношения к симметрии относительно обращения времени.

Вывод этого соотношения более нагляден, если производить его в квантовомеханических терминах, рассматривая переходы между состояниями, образующими дискретный ряд;

речь идет о состояниях пары молекул, движущихся в заданном конечном объеме.

Как известно, амплитуды вероятностей различных процессов столкновения образуют унитарную матрицу $\hat{S}$ (так называемая матрица рассеяния, или S -матрица).

Условие унитарности гласит: $\hat{S}^+ \hat{S} = 1$, или, в явном виде с матричными индексами (нумерующими различные состояния),

$$\sum_n S_{in}^+ S_{nk} = \sum_n S_{ni}^* S_{nk} = \delta_{ik}$$

В частности, при $i = k$

$$\sum_n |S_{ni}|^2 = 1$$

Квадрат $|S_{ni}|^2$ определяет вероятность столкновения с переходом $i \rightarrow n$, и написанное равенство выражает собой просто условие нормировки вероятностей: сумма вероятностей всех возможных переходов из заданного начального состояния равна единице.

Но условие унитарности можно написать и в виде $\hat{S} \hat{S}^+ = 1$ с другим порядком множителей $\hat{S}$ и $\hat{S}^+$.

Тогда получим $\sum_n S_{in} S_{kn}^* = \delta_{ik}$ и при $i = k$

$$\sum_n |S_{in}|^2 = 1$$

т. е. равна единице также и сумма вероятностей всех возможных переходов в заданное конечное состояние.

Исключив из обеих сумм по одному члену с $n = i$ (переход без изменения состояния), напомним

$$\sum_n' |S_{ni}|^2 = \sum_n' |S_{in}|^2$$

Это и есть искомое равенство. В терминах функций w оно запишется в виде

$$\int w(\Gamma', \Gamma'_1; \Gamma, \Gamma_1) d\Gamma' d\Gamma'_1 = \int w(\Gamma, \Gamma_1; \Gamma', \Gamma'_1) d\Gamma' d\Gamma'_1.$$

Usage of detailed balance

It is used in construction of scattering integral and of Lindblad operators, so that each term of these equations is explained by detailed balance condition.

(explain, how exactly.)

Examples of detailed balance in physical systems

5.1.3 Langevin equation: fundamentals, basic processes

Let us discuss in detail the Langevin equation from the point of view of stochastic processes.

Теория

Вывод уравнения Ланжевена

Функция распределения (???)

Получим функцию распределения $n(x; t)$ случайной величины $x(t)$:

$$n(\vec{r}; t) = \int \frac{dq}{2\pi} e^{iqx} \left\langle e^{-iq \left(x(0) + \int_0^t \xi(t') dt' \right)} \right\rangle$$

It is the inverse Fourier of characteristic function.

(???? i don't fully know, why it is so????)

(??? also, why should we use this approach???)

Процесс Винера

Основные свойства процесса Винера

Рассмотрим одномерное уравнение Ланжевена без внешней силы

$$\frac{dx(t)}{dt} = \xi(t).$$

Тут $\xi(t)$ - гауссов белый шум, то есть случайная величина с нулевым средним $\langle \xi_\alpha(t) \rangle = 0$ и парной корреляционной функцией $\langle \xi(t_1) \xi(t_2) \rangle = 2D\delta(t_1 - t_2)$.

Его решение задает так называемый процесс Винера:

$$x(t) = x(0) + \int_0^t dt' \xi(t')$$

Поэтому после усреднения $\langle \xi_\alpha(t) \rangle = 0$ получаем, что

$$\langle x(t) \rangle = x(0).$$

Второй момент находим также перемножением первых. У нас остается только два члена и далее для упрощения подставим свойства ξ :

$$\begin{aligned} \langle x^2(t) \rangle &= x^2(0) + \int_0^t \int_0^t dt_1 dt_2 \langle \xi(t_1) \xi(t_2) \rangle = \\ &= x^2(0) + 2D \int_0^t \int_0^t dt_1 dt_2 \delta(t_2 - t_1) = \\ &= x^2(0) + 2Dt \end{aligned}$$

Функция распределения в процессе Винера

Функцию распределения $n(x; t)$ случайной величины $x(t)$ в момент времени t найдем так:

$$n(\vec{r}; t) = \int \frac{dq}{2\pi} e^{iqx} \langle e^{-iqr(t)} \rangle = \int \frac{dq}{2\pi} e^{iqx} \left\langle e^{-iq \left(x(0) + \int_0^t \xi(t') dt' \right)} \right\rangle = \int \frac{dq}{2\pi} e^{iq(x-x(0))} \left\langle e^{-iq\tau_c \sum_{l=0}^{t/\tau_c} \xi(l\tau_c)} \right\rangle$$

Here we представили интеграл в виде суммы, далее вынесли сумму из экспоненты как произведение, далее применили выведенную формулу для усреднения $\langle e^{-iq\vec{r}(t)} \rangle \approx e^{-q^2 Dt}$, (??? I don't understand this formula, how do we average one exponent??? write the formula for it!!)

$$\left\langle \prod_{l=0}^{t/\tau_c} e^{-iq\tau_c \xi(l\tau_c)} \right\rangle = \prod_{l=0}^{t/\tau_c} \langle e^{-iq\tau_c \xi(l\tau_c)} \rangle = \left(e^{-q^2 \sigma_\xi^2 \tau_c^2 / 2} \right)^{t/\tau_c}$$

And we have:

$$n(\vec{r}; t) = \int \frac{dq}{2\pi} e^{iq(x-x(0)) - q^2 Dt} = \frac{1}{\sqrt{4Dt}} e^{-\frac{(x-x(0))^2}{4Dt}}.$$

Ожидаемо, получили гауссово распределение. Тут мы вычислили гауссов интеграл вида $\int dx e^{Ax - Bx^2} = e^{A^2/(4B)} \sqrt{\frac{\pi}{B}}$.

Modeling of Wiener process

(interesting to write, how to model it? and how does it look like? This is the question for later)

Другое о процессе Винера

Процесс Орнштейна-Уленбека

Основные свойства процесса Орнштейна-Уленбека

Рассмотрим одномерное уравнение Ланжевена с гармонической внешней силой

$$\frac{dx(t)}{dt} = -\mu k x(t) + \xi(t)$$

Тут $\xi(t)$ - гауссов белый шум, то есть случайная величина с нулевым средним $\langle \xi_\alpha(t) \rangle = 0$ и парной корреляционной функцией $\langle \xi(t_1) \xi(t_2) \rangle = 2D\delta(t_1 - t_2)$.

Его решение называется процессом Орнштейна-Уленбека и имеет вид:

$$x(t) = x(0)e^{-\mu kt} + e^{-\mu kt} \int_0^t dt' e^{\mu kt'} \xi(t').$$

Для его получения мы просто решили обычным образом простой диффуз методом вариации постоянной.

Из $\langle \xi_\alpha(t) \rangle = 0$ сразу получаем, что первый момент равен

$$\langle x(t) \rangle = x(0)e^{-\mu kt}.$$

Второй момент тоже находится элементарно, но уже интегрированием коррелятора:

$$\begin{aligned} \langle x^2(t) \rangle &= x^2(0)e^{-2\mu kt} + e^{-2\mu kt} \int_0^t \int_0^t dt_1 dt_2 e^{\mu k(t_1+t_2)} \langle \xi(t_1) \xi(t_2) \rangle = \\ &= x^2(0)e^{-2\mu kt} + 2De^{-2\mu kt} \int_0^t \int_0^t dt_1 dt_2 e^{\mu k(t_1+t_2)} \delta(t_2 - t_1) = \\ &= x^2(0)e^{-2\mu kt} + \frac{D}{\mu k} (1 - e^{-2\mu kt}). \end{aligned}$$

Функция распределения в процессе Орнштейна-Уленбека

Найдем функцию распределения $n(x; t)$ случайной величины $x(t)$ так:

$$\begin{aligned} n(\vec{r}; t) &= \int \frac{dq}{2\pi} e^{iqx} \left\langle \exp \left[-iq \left(x(0)e^{-\mu kt} + e^{-\mu kt} \int_0^t dt' e^{\mu kt'} \xi(t') \right) \right] \right\rangle = \\ &= \int \frac{dq}{2\pi} e^{iq(x - x(0)e^{-\mu kt})} \left\langle e^{-iq\tau_c e^{-\mu kt} \sum_{l=0}^{t/\tau_c} \exp(\mu kl\tau_c) \xi(l\tau_c)} \right\rangle \end{aligned}$$

Here

$$\begin{aligned} \left\langle e^{-iq\tau_c e^{-\mu kt} \sum_{l=0}^{t/\tau_c} \exp(\mu kl\tau_c) \xi(l\tau_c)} \right\rangle &= \left\langle \prod_{l=0}^{t/\tau_c} e^{-iq\tau_c \exp(-\mu kt + \mu kl\tau_c) \xi(l\tau_c)} \right\rangle = \\ &= \prod_{l=0}^{t/\tau_c} \left\langle e^{-iq\tau_c \exp(-\mu kt + \mu kl\tau_c) \xi(l\tau_c)} \right\rangle = \prod_{l=0}^{t/\tau_c} e^{-q^2 \frac{\sigma_\xi^2}{2} \tau_c^2 \exp(-2\mu kt + 2\mu kl\tau_c)} = \\ &= \exp \left[-q^2 D e^{-2\mu kt} \sum_{l=0}^{t/\tau_c} \tau_c e^{2\mu kl\tau_c} \right] = \exp \left[-q^2 D e^{-2\mu kt} \int_0^t dt' e^{2\mu kt'} \right] \end{aligned}$$

(??? same question as before, what is going on exactly??) Тут мы сперва разделили интеграл на сумму, вынесли сумму в произведение, занесли усреднение под каждый множитель, применили $\langle e^{-iq\vec{r}(t)} \rangle \approx e^{-q^2 Dt}$, далее внесли произведение, получили снова интеграл, его вычислили, и в итоге вычислил изначальный гауссов интеграл вида $\int dx e^{Ax - Bx^2} = e^{A^2/(4B)} \sqrt{\frac{\pi}{B}}$.

And finally we have

$$n(r, t) = \int \frac{dq}{2\pi} e^{iq(x - x(0)) - \frac{q^2 D}{2\mu k} (1 - e^{-2\mu kt})} = \frac{1}{\sqrt{2\pi \frac{D}{\mu k} (1 - e^{-2\mu kt})}} \exp \left[-\frac{(x - x(0)e^{-\mu kt})^2}{2 \frac{D}{\mu k} (1 - e^{-2\mu kt})} \right].$$

Вывод в том, что гармоническая сила (как и однородная) не нарушает гауссовости крупномасштабной статистики броуновского движения.

О приложениях уравнения Ланжевена (?)

(потом напишу)

Об уравнении Ланжевена по Тонгу (???)

(??? что-то он тоже написал, но я хз пока, что.)

5.1.4 Boltzmann H-theorem on Non-Decreasing Entropy

В термодинамике и кинетической теории, H-теорема, полученная Больцманом в 1872 году, описывает неубывание энтропии идеального газа в необратимых процессах, исходя из уравнения Больцмана.

На первый взгляд может показаться, что она описывает необратимое возрастание энтропии исходя из микроскопических обратимых уравнений динамики.

В своё время этот результат вызвал бурные споры.

мотивация

???

о чем тут спорить можно? что тут такого интересного?

обзор следствий и применений H-теоремы

(???)

Следствие H-теоремы Больцмана диагональные элементы оператора Ω неотрицательны:

$$\eta_{ikik} \geq 0$$

доказательство возрастание энтропии при переходе к равновесию через кинетическое уравнение

Предоставленный самому себе газ, как и всякая замкнутая макроскопическая система, стремится перейти в равновесное состояние.

Соответственно эволюция неравновесной функции распределения согласно кинетическому уравнению должна сопровождаться возрастанием энтропии газа.

Покажем, что это действительно так.

Как известно, энтропия идеального газа, находящегося в неравновесном макроскопическом состоянии, описываемом функцией распределения f , равна

$$S = \int f \ln \frac{e}{f} dV d\Gamma$$

(см. V, § 40).

Дифференцируя это выражение по времени, пишем

$$\frac{dS}{dt} = \int \frac{\partial}{\partial t} \left(f \ln \frac{e}{f} \right) dV d\Gamma = - \int \ln f \frac{\partial f}{\partial t} dV d\Gamma$$

Поскольку установление статистического равновесия в газе осуществляется столкновениями молекул, то возрастание энтропии должно быть связано именно со столкновительной частью изменения функции распределения.

Изменение же этой функции, связанное со свободным движением молекул, не может изменить энтропии газа.

Действительно, эта часть изменения функции распределения дается (для газа во внешнем поле $U(\mathbf{r})$) первыми двумя членами в правой стороне уравнения

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\mathbf{v} \nabla f - \mathbf{F} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} + \text{St} f$$

Их вклад в производную dS/dt равен

$$- \int \ln f \left[-\mathbf{v} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} - \mathbf{F} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} \right] dV d\Gamma = \int \left[\mathbf{v} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{F} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \right] \left(f \ln \frac{f}{e} \right) dV d\Gamma$$

Но интеграл по dV от члена с производной $\partial/\partial \mathbf{r}$ преобразуется согласно теореме Гаусса в интеграл по поверхности; при интегрировании по всему объему газа он обращается в нуль, поскольку за пределами занимаемого газом объема $f = 0$.

Аналогичным образом, член с производной $\partial/\partial \mathbf{p}$ при интегрировании по d^3p преобразуется в интеграл по бесконечно удаленной поверхности в импульсном пространстве и тоже обращается в нуль.

Таким образом, для изменения энтропии остается

$$\frac{dS}{dt} = - \int \ln f \cdot \text{St } f d\Gamma dV$$

Этот интеграл можно преобразовать с помощью приема, который мы сформулируем в общем виде для интеграла

$$\int \varphi(\Gamma) \text{St } f d\Gamma$$

где $\varphi(\Gamma)$ - любая функция величин Γ .

Представив интеграл столкновений в виде (3,6), пишем

$$\int \varphi(\Gamma) \text{St } f d\Gamma = \int \varphi' w(\Gamma, \Gamma_1; \Gamma', \Gamma'_1) f' f'_1 d^4\Gamma - \int \varphi w(\Gamma', \Gamma'_1; \Gamma, \Gamma_1) f f_1 d^4\Gamma$$

где для краткости обозначено $d^4\Gamma = d\Gamma d\Gamma_1 d\Gamma' d\Gamma'_1$.

Поскольку интегрирование производится здесь по всем переменным $\Gamma, \Gamma_1, \Gamma', \Gamma'_1$, то можно, не меняя интеграла, произвести любое переобозначение переменных.

Взаимно переобозначив Γ, Γ_1 и Γ', Γ'_1 во втором интеграле, получим

$$\int \varphi(\Gamma) \text{St } f d\Gamma = \int (\varphi - \varphi') w(\Gamma, \Gamma_1; \Gamma', \Gamma'_1) f' f'_1 d^4\Gamma$$

Переобозначив теперь $\Gamma, \Gamma' \leftrightarrow \Gamma_1, \Gamma'_1$, взяв полусумму получающихся таким образом интегралов и учтя очевидную симметрию функции по отношению к двум сталкивающимся частицам, получим формулу преобразования

$$\int \varphi(\Gamma) \text{St } f d\Gamma = \frac{1}{2} \int (\varphi + \varphi_1 - \varphi' - \varphi'_1) w' f' f'_1 d^4\Gamma$$

В частности, интеграл $\int \text{St } f d\Gamma = 0$; представив здесь $\text{St } f$ в виде (3, 7), получим

$$\int \text{St } f d\Gamma = \int w' (f' f'_1 - f f_1) d^4\Gamma = 0$$

В применении к интегралу (4,3) формула (4,4) дает

$$\frac{dS}{dt} = \frac{1}{2} \int w' f' f'_1 \ln \frac{f' f'_1}{f f_1} d^4\Gamma dV = \frac{1}{2} \int w' f f_1 x \ln x d^4\Gamma dV$$

где обозначено $x = f' f'_1 / f f_1$. Вычтя из этого выражения половину равного нулю интеграла (4, 5), перепишем его в виде

$$\frac{dS}{dt} = \frac{1}{2} \int w' f f_1 (x \ln x - x + 1) d^4\Gamma dV$$

Функция в скобках в подинтегральном выражении неотрицательна при всех $x > 0$: она равна нулю при $x = 1$ и возрастает по обе стороны от этой точки. По оп ределению положнтельны такАе и множители w', f, f_1 под знаком интеграла. Таким обра 3Ом, мы приходим к требуемому результату

$$\frac{dS}{dt} \geq 0$$

выражающему собой закон неубывания энтропии.

Обратим внимание на то, что в силу неотрицательности подинтегрального выражения в (4, 6) (а тем самым и в (4,3)) положителен не только весь интеграл (4,3) по $d\Gamma dV$, но и интеграл только по $d\Gamma$.

Другими словами, столкновения приводят к возрастанию энтропии в каждом элементе объема газа.

Это, конечно, не значит, что энтропия вообще возрастает в каждом элементе объема, так как она может переноситься из одного участка в другой за счет свободного движения молекул.

важность теоремы и ее применения

важность в том, что казалось бы, из обратимых процессов не должна неубывать энтропия.

однако всё хорошо.

запишу потом это.

5.1.5 Random Forces

(????????????????????)

5.1.6 Approach by Classical Mechanics and BBKY hierarchy

(all about it will be here)

5.2 Kinetics in scope of Random Processes: Fundamentals**5.2.1 Diffusion coefficients, correlators****Definitions**

(I'll write them, see problems for now)

Green's function methods for basic diffusion

(I'll write them, see problems for now)

One can write the probability density function in terms of Green's function

(???)

5.2.2 Problem of First Hit of the Boundary

(?? description about these questions)

5.3 I Equations of Kinetic Theory of Gases by Landau**5.3.1 §1. The distribution function**

This chapter deals with the kinetic theory of ordinary gases consisting of electrically neutral atoms or molecules. The theory is concerned with non-equilibrium states and processes in an ideal gas. An ideal gas, it will be recalled, is one so rarefied that each molecule in it moves freely at almost all times, interacting with other molecules only during close encounters with them. That is to say, the mean distance between molecules, $\bar{r} \sim N^{-1/3}$ (where N is the number of molecules per unit volume), is assumed large in comparison with their size, or rather in comparison with the range d of the intermolecular forces; the small quantity $Nd^3 \sim (d/\bar{r})^3$ is sometimes called the gaseousness parameter.

The statistical description of the gas is given by the distribution function $f(t, q, p)$ of the gas molecules in their phase space. It is, in general, a function of the generalized coordinates (chosen in some manner, and denoted jointly by q) and the corresponding generalized momenta (denoted jointly by p), and in a non-steady state also of the time t . Let $d\tau = dqdp$ denote a volume element in the phase space of the molecule; dq and dp conventionally denote the products of the differentials of all the coordinates and all the momenta respectively. The product $f d\tau$ is the mean number of molecules in a given element $d\tau$ which have values of q and p in given ranges dq and dp . We shall return later to this definition of the mean.

Although the function f will be everywhere understood as the distribution density in phase space, there is advantage in expressing it in terms of suitably chosen variables, which need not be canonically conjugate coordinates and momenta. Let us first of all decide on the choice to be made.

The translational motion of a molecule is always classical, and is described by the coordinates $\mathbf{r} = (x, y, z)$ of its centre of mass and by the components of the momentum $\mathbf{p}$ (or the velocity $\mathbf{v} = \mathbf{p}/\mathbf{m}$) of its motion as a whole. In a monatomic gas, the motion of the particles, which are atoms, is purely translational. In polyatomic gases, the molecules also have rotational and vibrational degrees of freedom.

The rotational motion of a molecule in a gas is almost always classical too. [†] It is described in the first place by the angular momentum vector M of the molecule. For a diatomic molecule, this is sufficient. Such a molecule is a rotator turning in a plane perpendicular to $\mathbf{M}$. In actual physical problems, the distribution function

may be regarded as independent of the angle φ of rotation of the axis of the molecule in this plane, all orientations of the molecule in the plane being equally probable. This is because the angle φ changes rapidly as the molecule rotates, and the result may be understood as follows.

The rate of change of φ (the angular velocity of rotation of the molecule) is $\dot{\varphi} \equiv \Omega = M/I$. Its mean value $\bar{\Omega} \sim \bar{v}/d$, where d is the molecular dimension and $\bar{v}$ the mean linear speed. Different molecules have various values of Ω , distributed in some way about $\bar{\Omega}$. Thus molecules which initially had the same φ very soon acquire different values; there is a rapid "mixing" with regard to angles. Let the distribution of molecules in angle $\varphi = \varphi_0$ (in the range from 0 to 2π) and in Ω at the initial instant $t = 0$ be given by a function $f(\varphi_0, \Omega)$. We separate from it the mean value independent of φ :

$$f = \bar{f}(\Omega) + f'(\varphi_0, \Omega)$$

$$\bar{f}(\Omega) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} f(\varphi_0, \Omega) d\varphi_0$$

so that $f'(\varphi_0, \Omega)$ is a function periodic in φ_0 with period 2π and zero mean. In the course of time, the free rotation of the molecules ($\varphi = \Omega t + \varphi_0$) changes the distribution function:

$$f(\varphi, \Omega, t) = \bar{f}(\Omega) + f'(\varphi - \Omega t, \Omega)$$

In the course of time, f' becomes a more and more rapidly oscillating function of Ω : the characteristic period of oscillation $\Delta\Omega \sim 2\pi/t$, and becomes small in comparison with $\bar{\Omega}$ even during the mean free time of the molecules between collisions. All observable physical quantities, however, involve some averaging of the distribution function with respect to Ω ; the contribution of the rapidly oscillating function f' to such mean values is negligible. This enables us to replace the distribution $f(\varphi, \Omega)$ by the angle-averaged function $\bar{f}(\Omega)$.

The above arguments are, of course, general ones, and apply to any rapidly varying quantities (phases) which take values in finite ranges.

Returning to the rotational degrees of freedom of molecules, let us note that in polyatomic gases the distribution function may also depend on the angles which specify the fixed orientation of the axes of the molecules relative to the vector $\mathbf{M}$. For example, in molecules of the symmetrical-top type this is the precession angle between M and the axis of the top, whereas the distribution function may again be regarded as independent of the rapidly varying angles of rotation of the top about its own axis and precession of this axis about $\mathbf{M}$.[†]

[†] The condition for the rotation to be classical is $\hbar^2/2I \leq T$, where I is the moment of inertia of the molecule and T the temperature of the gas. This condition can be violated in ordinary gases only for hydrogen and deuterium at low temperatures.

The vibrational motion of the atoms within the molecule is practically always quantized, so that the vibrational state of the molecule is specified by the appropriate quantum numbers. Under ordinary conditions (at not too high temperatures), however, the vibrations are not excited at all, and the molecule is at its ground vibrational level.

In this chapter we shall denote by Γ the set of all variables on which the distribution function depends, other than the coordinates of the molecule as a whole (and the time t). We separate from the phase volume element $d\tau$ the factor $dV = dxdydz$, and denote by $d\Gamma$ the remaining factor in terms of the variables used (and integrated over the angles on which f does not depend). The quantities Γ have an important common property: they are integrals of the motion, and remain constant for each molecule during its free motion (in the absence of an external field) between successive collisions; but they are in general altered by each collision. The coordinates x, y, z of the molecule as a whole vary, of course, during its free motion.

For a monatomic gas, the quantities Γ are the three components of the momentum $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$ of the atom, so that $d\Gamma = d^3p$. For a diatomic molecule, Γ includes not only the momentum $\mathbf{p}$ but also the angular momentum $\mathbf{M}$; accordingly, $d\Gamma$ may be expressed as

$$d\Gamma = 2\pi d^3p M dM do_M \quad (1.1)$$

where do_M is a solid-angle element for the direction of the vector $\mathbf{M}$ [†]. For a symmetrical-top molecule, the quantities Γ include also the angle θ between $\mathbf{M}$ and the axis of the top; then

$$d\Gamma = 4\pi^2 d^3p M^2 dM do_M d\cos\theta$$

(one factor of 2π comes from integration over the angle of rotation of the top about its axis, and another from integration over the angle of precessional rotation).

The integral

$$f(t, \mathbf{r}, \Gamma) d\Gamma = N(t, \mathbf{r})$$

is the spatial distribution density of gas particles; NdV is the mean number of molecules in the volume element dV . Here the following comments are needed.

An infinitesimal volume element dV really means one that is not mathematically but physically small, i.e. a region of space which is very small in comparison with the characteristic dimensions L of the problem, but still large in comparison with molecular dimensions. The statement that a molecule is in a given volume element

This expression can be derived by first writing

$$\begin{aligned} d\Gamma &= d^3p \delta(M \cdot \mathbf{n}) d^3M do_n \\ &= d^3p \delta(M \cos\theta) M^2 dM do_M d\cos\theta d\varphi \end{aligned}$$

Where $do_n = d\cos\theta d\varphi$ is a solid-angle element for the direction of the molecule axis θ being the angle between this axis and $\mathbf{M}$. The delta function expresses the fact that $\mathbf{M}$ has only two independent components (corresponding to the number of rotational degrees of freedom of a diatomic molecule): $\mathbf{M}$ is perpendicular to the molecule axis. Integration of this formula over $d\cos\theta d\varphi$ gives (1.1).

dV therefore defines its position, at best, only to within distances of the order of its dimensions. This is a very important point. If the coordinates of the gas particles were specified exactly, then the result of a collision between, say, two atoms of a monatomic gas moving in definite

[†] In the rotation of a spherical-top molecule, such as CH_4 , the two angles remain constant which define the orientation of the molecule relative to $\mathbf{M}$ (i.e. the direction of the angular velocity $\boldsymbol{\Omega}$). In the rotation of an asymmetrical-top molecule, a combination of angles remains constant which represents the rotational energy $E_{\text{rot}} = M_\xi^2/2I_1 + M_\eta^2/2I_2 + M_\zeta^2/2I_3$, where M_ξ, M_η, M_ζ are the components of the constant vector $\mathbf{M}$ along the rotating principal axes of inertia of the molecule.

classical paths would also be entirely definite. If, however, the collision is between atoms in a given physically small volume (as always in the kinetic theory of gases), the uncertainty in the relative position of the atoms means that the result of the collision also is uncertain, and only the probability of one or another outcome can be considered.

We can now specify that the mean number density of particles refers to averaging over the volumes of physically infinitesimal elements thus defined, and correspondingly over times of the order of that taken by the particles to traverse such elements.

Since the dimensions of the volume elements used in defining the distribution function are large in comparison with the molecular dimensions d , the distances L over which this function varies considerably must always be large also, in comparison with d . The ratio between the size of the physically infinitesimal volume elements and the mean intermolecular distance $\bar{r}$ may in general have any value. There is, however, a difference in the nature of the density N determined by the distribution function, according to the value of that ratio. If the element dV is not large compared with $\bar{r}$, the density N is not a macroscopic quantity: the fluctuations of the number of particles present in dV are comparable with its mean value. The density N becomes a macroscopic quantity only if it is defined with respect to volumes dV containing many particles; the fluctuations in the number of particles in these volumes are then relatively small. It is, however, clear that such a definition is possible only if also the characteristic dimensions of the problem $L \gg \bar{r}$.

5.3.2 §2. The principle of detailed balancing

Let us consider collisions between two molecules, one of which has values of Γ in a given range $d\Gamma$, and the other in a range $d\Gamma_1$, and which acquire in the collision values in the ranges $d\Gamma'$ and $d\Gamma'_1$ respectively; for brevity, we shall refer simply to a collision of molecules with Γ and Γ_1 , resulting in Γ' and Γ'_1 . The total number of such collisions per unit time and unit volume of the gas may be written as a product of the number of molecules per unit volume, $f(t, \mathbf{r}, \Gamma)d\Gamma$, and the probability that any of them has a collision of the type concerned. This probability is always proportional to the number of molecules Γ_1 per unit volume, $f(t, \mathbf{r}, \Gamma_1)d\Gamma_1$, and to the ranges $d\Gamma'$ and $d\Gamma'_1$ of the values of Γ for the two molecules after the collision. Thus the number of collisions $\Gamma, \Gamma_1 \rightarrow \Gamma', \Gamma'_1$ per unit time and volume may be written as

$$w(\Gamma', \Gamma'_1; \Gamma, \Gamma_1) f f_1 d\Gamma d\Gamma_1 d\Gamma' d\Gamma'_1; \quad (2.1)$$

here and henceforward, the affixes to f correspond to those of their arguments $\Gamma : f_1 \equiv f(t, \mathbf{r}, \Gamma_1)$, $f' \equiv f(t, \mathbf{r}, \Gamma')$, and so on. The coefficient w is a function of all its arguments Γ . + The ratio of $w d\Gamma' d\Gamma'_1$ to the absolute value of the relative velocity $\mathbf{v} - \mathbf{v}_1$ of the colliding molecules has the dimensions of area, and is the effective collision cross-section:

$$d\sigma = \frac{w(\Gamma', \Gamma'_1; \Gamma, \Gamma_1)}{|\mathbf{v} - \mathbf{v}_1|} d\Gamma' d\Gamma'_1 \quad (2.2)$$

The function w can in principle be determined only by solving the mechanical problem of collision of particles interacting according to some given law. However, certain properties of this function can be elucidated from general arguments. ‡

The collision probability is known to have an important property which follows from the symmetry of the laws of mechanics (classical or quantum) under time reversal; see *QM*, §144. Let Γ^T denote the values of the quantities obtained from Γ by time reversal. This operation changes the signs of all linear and angular momenta; hence, if $\Gamma = (\mathbf{p}, \mathbf{M})$, then $\Gamma^T = (-\mathbf{p}, -\mathbf{M})$. Since time reversal interchanges the states that are "before" and "after" the collision we have

$$w(\Gamma', \Gamma'_1; \Gamma, \Gamma_1) = w(\Gamma^T, \Gamma_1^T; \Gamma'^T, \Gamma'^T_1). \quad (2.3)$$

This relation implies, in a state of statistical equilibrium, the principle of detailed balancing, according to which the number of collisions $\Gamma, \Gamma_1 \rightarrow \Gamma', \Gamma'_1$ is equal, in equilibrium, to the number $\Gamma'^T, \Gamma'^T_1 \rightarrow \Gamma^T, \Gamma^T_1$. For, expressing these numbers in the form (2.1), we have

$$w(\Gamma', \Gamma'_1; \Gamma, \Gamma_1) f_0 f_{01} d\Gamma d\Gamma_1 d\Gamma' d\Gamma'_1 = w(\Gamma^T, \Gamma^T_1; \Gamma'^T, \Gamma'^T_1) f'_0 f'_{01} d\Gamma^T d\Gamma^T_1 d\Gamma'^T d\Gamma'^T_1$$

where f_0 is the equilibrium (Boltzmann) distribution function. The product of phase volume elements $d\Gamma d\Gamma_1 d\Gamma' d\Gamma'_1$ is unaltered by time reversal; the differentials on the two sides of the above equation may therefore be omitted. Next, when t is replaced by $-t$, the energy is unchanged: $\epsilon(\Gamma) = \epsilon(\Gamma^T)$, where $\epsilon(\Gamma)$ is the energy of the molecule as a function of the quantities Γ . Since the equilibrium distribution function (in a gas at rest as a whole) depends only on the energy,

$$f_0(\Gamma) = \text{constant} \times e^{-\epsilon(\Gamma)/T} \quad (2.4)$$

where T is the gas temperature, we have $f_0(\Gamma) = f_0(\Gamma^T)$. Lastly, by the law of conservation of energy in the collision of two molecules $\epsilon + \epsilon_1 = \epsilon' + \epsilon'_1$. Hence

$$f_0 f_{01} = f'_0 f'_{01} \quad (2.5)$$

and the above equation reduces to (2.3).

This assertion remains valid, of course, for a gas moving with a macroscopic velocity $\mathbf{V}$. The equilibrium distribution function is then

$$f_0(\Gamma) = \text{constant} \times \exp\left(-\frac{\epsilon(\Gamma) - \mathbf{p} \cdot \mathbf{V}}{T}\right) \quad (2.6)$$

and equation (2.5) continues to be valid because of the conservation of momentum in collisions: $\mathbf{p} + \mathbf{p}_1 = \mathbf{p}' + \mathbf{p}'_1$.

Note that (2.5) depends only on the form of the distribution (2.4) or (2.6) as a function of Γ ; the parameters $\mathbf{T}$ and $\mathbf{V}$ may vary through the gas volume.

The principle of detailed balancing may also be expressed in a somewhat different form. To do so, we apply not only time reversal but spatial inversion, changing the sign of all coordinates. If the molecules are not sufficiently symmetrical, they become their stereoisomers on inversion, and they cannot be made to coincide with these by any rotation of the molecule as a whole. ‡ In such cases, inversion would mean replacing the gas by an essentially different substance, and no new conclusions would be available as to its properties. If, however, the symmetry of the molecule does not allow stereoisomerism, the gas remains the same on inversion, and the quantities which describe the properties of a macroscopically homogeneous gas must remain unaltered.

Let Γ^{TP} denote the set of quantities obtained from Γ by simultaneous time reversal and inversion. Inversion changes the sign of all ordinary (polar) vectors, including the momentum $\mathbf{p}$, but leaves unchanged the axial vectors, including the angular momentum $\mathbf{M}$. Hence, if $\Gamma = (\mathbf{p}, \mathbf{M})$, then $\Gamma^{TP} = (\mathbf{p}, -\mathbf{M})$. As well as (2.3), we have the equation§

$$w(\Gamma', \Gamma'_1; \Gamma, \Gamma_1) = w(\Gamma^{TP}, \Gamma^{TP}_1; \Gamma^{TP}, \Gamma^{TP}_1). \quad (2.7)$$

⁰† The characteristics of the initial (i) and final (f) states in w are written from right to left, $w(f, i)$ as is customary in quantum mechanics.

‡ It should be emphasized immediately that, although the free motion of molecules is assumed classical, this does not at all mean that their collision cross-section need not be determined quantum-mechanically; in fact, it usually must be so determined. The whole of the derivation of the transport equation given here is independent of the classical or quantum nature of the function w .

Transitions corresponding to the functions w on the two sides of (2.3) are said to be mutually time-reversed. They are not strictly direct and reverse transitions, since Γ and Γ^T are not the same. For a monatomic gas, however, the principle of detailed balancing can also be expressed in relation to direct and reverse transitions. Since the quantities Γ are here just the three momentum components of the atom, $\Gamma = \Gamma^{TP} = \mathbf{p}$, and from (2.7)

$$w(\mathbf{p}', \mathbf{p}'_1; \mathbf{p}, \mathbf{p}_1) = w(\mathbf{p}, \mathbf{p}_1; \mathbf{p}', \mathbf{p}'_1). \quad (2.8)$$

This is detailed balancing in the literal sense: each microscopic collision process is balanced by the reverse process.

The function w satisfies one further general relation which does not depend on the symmetry under time reversal, and which can be most clearly derived in

quantum-mechanical terms, the transitions considered being between states forming a discrete series. These are states of a pair of molecules moving in a given finite volume. The probability amplitudes of various collision processes form a unitary matrix $\hat{S}$, the scattering matrix or S -matrix. The unitarity condition is $\hat{S}^+ \hat{S} = 1$, or, in explicit form with the matrix suffixes which label the various states,

$$\sum_n S_{in}^+ S_{nk} = \sum_n S_{ni}^* S_{nk} = \delta_{ik}$$

In particular, when $i = k$,

$$\sum_n |S_n|^2 = 1$$

The square $|S_{ni}|^2$ gives the probability of a collision with the transition $\mathbf{i} \rightarrow \mathbf{n}, \dagger$ and the above equation is simply the normalization condition for probabilities: the sum of the probabilities for all possible transitions from a given initial state is unity. The unitarity condition may also be written as $\hat{S} \hat{S}^+ = 1$, with the opposite order of the factors $\hat{S}$ and $\hat{S}^+$. We then have $\sum_n S_{in} S_{kn}^* = \delta_{ik}$, and when $i = k$

$$\sum_n |S_{in}|^2 = 1,$$

so that the sum of the probabilities for all possible transitions to a given final state is unity. Subtracting from each sum the one term with $n = i$ (transition without change of state), we can write

$$\sum'_n |S_{ni}|^2 = \sum'_n |S_{in}|^2$$

This is the required equation. In terms of the functions w , it becomes

$$\int w(\Gamma', \Gamma'_1; \Gamma, \Gamma_1) d\Gamma' d\Gamma'_1 = \int w(\Gamma, \Gamma_1; \Gamma', \Gamma'_1) d\Gamma' d\Gamma'_1 \quad (2.9)$$

⁰† Equation (2.6) is obtained from (2.4) by transforming the energy of the molecule from the frame of reference K_0 in which the gas is at rest to the frame K in which it moves with velocity V : $\epsilon_0(\Gamma) = \epsilon(\Gamma) - \mathbf{p} \cdot \mathbf{V} + \frac{1}{2}m\mathbf{V}^2$; see Mechanics (3.5).

‡ Stereoisomers exist for molecules that have no centre of symmetry and no plane of symmetry.

§If the quantities Γ include also variables specifying the rotational orientation of the molecule, they too must be transformed in a certain way in going to Γ' or Γ'^F . For instance, the precession angle of a symmetrical top is given by the product $M.n$, where n is the direction of the axis of the molecule; this quantity changes sign both under time reversal and under inversion.

5.3.3 §3. The Boltzmann transport equation

Let us now go on to derive the basic equation in the kinetic theory of gases, which is satisfied by the distribution function $f(t, \mathbf{r}, \Gamma)$.

If collisions between molecules were entirely negligible, each gas molecule would constitute a closed subsystem, and the distribution function of the molecules would obey Liouville's theorem, according to which

$$df/dt = 0; \quad (3.1)$$

see SP 1, §3. The total derivative here corresponds to differentiation along the phase path of the molecule, which is determined by its equations of motion. Liouville's theorem applies to a distribution function defined as the density in phase space (i.e. in the space of variables that are canonically conjugate generalized coordinates and momenta). This of course does not prevent f itself from being subsequently expressed in terms of any other variables.

In the absence of an external field, the quantities Γ for a freely moving molecule remain constant, and only its coordinates $\mathbf{r}$ vary; then

$$df/dt = \partial f/\partial t + \mathbf{v} \cdot \nabla f \quad (3.2)$$

If, on the other hand, the gas is in, for example, an external field $\mathbf{U}(\mathbf{r})$ acting on the coordinates of the centre of mass of the molecule (a gravitational field, say), then

$$df/dt = \partial f/\partial t + \mathbf{v} \cdot \nabla f + \mathbf{F} \cdot \partial f/\partial \mathbf{p} \quad (3.3)$$

where $\mathbf{F} = -\nabla U$ is the force exerted on the molecule by the field.

When collisions are taken into account, (3.1) is no longer valid, and the distribution function is no longer constant along the phase paths. Instead of (3.1), we have

$$df/dt = C(f) \quad (3.4)$$

where $C(f)$ denotes the rate of change of the distribution function by virtue of collisions: $dV d\Gamma C(f)$ is the change due to collisions, per unit time, in the number of molecules in the phase volume $dV d\Gamma$. Equation (3.4), in the form

$$\partial f/\partial t = -\mathbf{v} \cdot \nabla f + C(f)$$

with df/dt taken from (3.2), gives the total change in the distribution function at a given point in phase space; the term $dV d\Gamma \mathbf{v} \cdot \nabla f$ is the decrease per unit time in the number of molecules in this phase space element because of their free motion.

The quantity $C(f)$ is called the collision integral, and equations of the form (3.4) go by the general name of transport equations. Of course, the transport equation becomes meaningful only when the form of the collision integral has been established. We shall now discuss this topic.

When two molecules collide, their values of Γ are changed. Hence every collision undergone by a molecule transfers it out of a particular range $d\Gamma$; such collisions are referred to as "losses". The total number of collisions $\Gamma, \Gamma_1 \rightarrow \Gamma', \Gamma'_1$ with all possible values of $\Gamma_1, \Gamma', \Gamma'_1$ and given Γ , occurring in a volume dV per unit time, is equal to the integral

^{0†} For large values of the time t , $|S_{ni}|^2$ is proportional to t , and division by t gives the transition probability per unit time; cf. *RQT*, §64. If the wave functions of the initial and final particles are normalized to one particle per unit volume, this "probability" has the same dimensions (volume/time) as the quantity $w d\Gamma d\Gamma_1$ defined by (2.1).

$$dV d\Gamma \int w(\Gamma', \Gamma'_1; \Gamma, \Gamma_1) f f_1 d\Gamma_1 d\Gamma' d\Gamma'_1$$

There are also collisions ("gains") which bring into the range $d\Gamma$ molecules which originally had values outside that range. These are collisions $\Gamma', \Gamma'_1 \rightarrow \Gamma, \Gamma_1$, again with all possible $\Gamma_1, \Gamma', \Gamma'_1$ and given Γ . The total number of such collisions in the volume dV per unit time is

$$dV d\Gamma \int w(\Gamma, \Gamma_1; \Gamma', \Gamma'_1) f' f'_1 d\Gamma_1 d\Gamma' d\Gamma'_1$$

Subtracting the losses from the gains, we thus find that as a result of all collisions the relevant number of molecules is increased, per unit time, by

$$dV d\Gamma \int (w' f' f'_1 - w f f_1) d\Gamma_1 d\Gamma' d\Gamma'_1$$

where for brevity

$$w \equiv w(\Gamma', \Gamma'_1; \Gamma, \Gamma_1), \quad w' \equiv w(\Gamma, \Gamma_1; \Gamma', \Gamma'_1). \quad (3.5)$$

We therefore have the following expression for the collision integral:

$$C(f) = \int (w' f' f'_1 - w f f_1) d\Gamma_1 d\Gamma' d\Gamma'_1 \quad (3.6)$$

In the second term in the integrand, the integration over $d\Gamma' d\Gamma'_1$ relates only to w , since f and f_1 do not depend on these variables. This part of the integral can therefore be transformed by means of the unitarity relation (2.9). The collision integral then becomes

$$C(f) = \int w' (f' f'_1 - f f_1) d\Gamma_1 d\Gamma' d\Gamma'_1 \quad (3.7)$$

in which both terms have the factor w' .[†]

Having established the form of the collision integral, we can write the transport equation as

$$\partial f / \partial t + \mathbf{v} \cdot \nabla f = \int w' (f' f'_1 - f f_1) d\Gamma_1 d\Gamma' d\Gamma'_1 \quad (3.8)$$

This integro-differential equation is also called the Boltzmann equation; it was first derived by Ludwig Boltzmann, the founder of the kinetic theory, in 1872.

The equilibrium statistical distribution must satisfy the transport equation identically. This condition is in fact fulfilled. The equilibrium distribution is stationary and (in the absence of an external field) uniform; the left-hand side of (3.8) is therefore identically zero. The collision integral also is zero, since the integrand vanishes by virtue of (2.5). The equilibrium distribution for a gas in an external field also satisfies the transport equation, of course. We need only recall that the left-hand side of the transport equation is the total derivative df/dt , which is

identically zero for any function f that depends only on integrals of the motion; and the equilibrium distribution is expressed solely in terms of the total energy $\epsilon(\mathbf{\Gamma})$ of the molecule, which is an integral of the motion.

In the above derivation of the transport equation, collisions were regarded as essentially instantaneous and occurring at a particular point in space. It is therefore clear that the equation allows us in principle to follow the variation of the distribution function only over times long

[†] The possibility of transforming the collision integral by means of (2.9) was noted by E. C. G. Stueckelberg (1952).

compared with the duration of collisions, and over distances large compared with the size of the region in which a collision takes place. These distances are of the order of the range of action d of the molecular forces (and for neutral molecules, this is equal to their dimensions); the collision time is of the order of $d/\bar{v}$. Such values give the lower limit of distances and times that can be dealt with by means of the transport equation; the origin of these limitations will be considered in § 16. In practice, however, there is usually no need (and no possibility) for such a detailed account of the behaviour of the system, which would require, in particular, the specification of the initial conditions (coordinates and velocities of the gas molecules) with the same accuracy, which is impracticable. In actual physical problems, there are characteristic lengths L and times T imposed on the system by the conditions of the problem (characteristic gradient lengths for the macroscopic properties of the gas, wavelengths and periods of sound waves propagated in it, and so on). It is then sufficient to follow the behaviour of the system over distances and times small compared with these L and T . That is, the physically infinitesimal volume and time elements need be small only in comparison with L and T . The initial conditions of the problem are also averaged over such elements.

For a monatomic gas, the quantities $\mathbf{\Gamma}$ reduce to the three components of the momentum $\mathbf{p}$, and from (2.8) the functions w' in the collision integral can be replaced by $w = w'(\mathbf{p}', \mathbf{p}'_1; \mathbf{p}, \mathbf{p}_1)$. Then, expressing this function in terms of the differential collision cross-section $d\sigma$ by $w d^3p' d^3p'_1 = v_{\text{rel}} d\sigma$ (where $v_{\text{rel}} = |\mathbf{v} - \mathbf{v}_1|$; see (2.2)), we find

$$C(f) = \int v_{\text{rel}} (f' f'_1 - f f_1) d\sigma d^3p_1 \quad (3.9)$$

The function w , and therefore the cross-section $d\sigma$ defined by (2.2), contain delta-function factors which express the conservation laws for momentum and energy, as a result of which the variables $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}'$ and $\mathbf{p}'_1$ (for a given $\mathbf{p}$) are not in fact independent. However, when the collision integral is expressed in the form (3.9), we can suppose that these delta functions have been removed by appropriate integrations; then $d\sigma$ will be the ordinary scattering cross-section, depending (for a given v_{rel}) only on the scattering angle.

For a qualitative treatment of transport phenomena in gases, the collision integral is roughly estimated by means of the mean free path l , an average distance traversed by a molecule between two successive collisions. † It has, of course, only qualitative significance; even its definition varies according to which transport phenomenon is under consideration.

† This concept is due to R. Clausius (1858).

The mean free path can be expressed in terms of the collision cross-section σ and the number density N of molecules in the gas. If a molecule travels a unit distance in its path, it collides with the molecules present in a volume σ (that of a cylinder with cross-sectional area σ and unit length), the number of which is σN . Hence

$$l \sim 1/N\sigma. \quad (3.10)$$

The collision cross-section $\sigma \sim d^2$, where d is the dimension of the molecule. With $N \sim 1/\bar{r}^3$, $\bar{r}$ being the mean distance between molecules, we find

$$l \sim \bar{r}(\bar{r}/d)^2 = d(\bar{r}/d)^3 \quad (3.11)$$

Since in a gas $\bar{r} \gg d$, the mean free path $l \gg \bar{r}$.

The ratio $\tau \sim l/\bar{v}$ is called the mean free time. For a rough estimate of the collision integral, we can put

$$C(f) \sim -(f - f_0)/\tau \sim -(\bar{v}/l)(f - f_0) \quad (3.12)$$

By writing the difference $f - f_0$ in the numerator we have taken account of the fact that the collision integral is zero for the equilibrium distribution function. The minus sign in (3.12) expresses the fact that collisions are the mechanism for reaching statistical equilibrium, i.e. they tend to reduce the deviation of the distribution function from its equilibrium form. In this sense, τ acts as a relaxation time for the establishment of equilibrium in each volume element of the gas.

5.3.4 §4. The H theorem

A gas left to itself, like any closed macroscopic system, will tend to reach a state of equilibrium. Accordingly, the time variation of a non-equilibrium distribution function in accordance with the transport equation must be accompanied by an increase in the entropy of the gas. We shall show that this is in fact so.

The entropy of an ideal gas in a non-equilibrium macroscopic state described by a distribution function f is

$$S = \int f \log(e | f) dV d\Gamma \quad (4.1)$$

see SP 1, §40. Differentiating this expression with respect to time, we have

$$\begin{aligned} \frac{dS}{dt} &= \int \frac{\partial}{\partial t} \left(f \log \frac{e}{f} \right) dV d\Gamma \\ &= - \int \log f \frac{\partial f}{\partial t} dV d\Gamma \end{aligned} \quad (4.2)$$

Since the establishment of statistical equilibrium in the gas is brought about by collisions of molecules, the increase in the entropy must arise from the collisional part of the change in the distribution function. The change in this function due to the free motion of the molecules, on the other hand, cannot alter the entropy of the gas, since this part of the change in the distribution function is given (for a gas in an external field $U(\mathbf{r})$) by the first two terms on the right-hand side of the equation

$$\partial f / \partial t = -\mathbf{v} \cdot \nabla f - \mathbf{F} \cdot \partial f / \partial \mathbf{p} + C(f).$$

Their contribution to the derivative dS/dt is

$$- \int \log f [-\mathbf{v} \cdot \partial f / \partial \mathbf{r} - \mathbf{F} \cdot \partial f / \partial \mathbf{p}] dV d\Gamma = \int [\mathbf{v} \cdot \partial / \partial \mathbf{r} + \mathbf{F} \cdot \partial / \partial \mathbf{p}] (f \log f / e) dV d\Gamma$$

The integral over dV of the term involving the derivative $\partial / \partial \mathbf{r}$ is transformed by Gauss's theorem into a surface integral; it gives zero on integration through the whole volume of the gas, since $f = 0$ outside the region occupied by the gas. Similarly, the term involving the derivative $\partial / \partial \mathbf{p}$, on integration over $d^3\mathbf{p}$, becomes an integral over an infinitely distant surface in momentum space, and likewise gives zero.

The change in the entropy is therefore expressed by

$$dS/dt = - \int \log f \cdot C(f) d\Gamma dV \quad (4.3)$$

This integral can be transformed by a device which, with a view to later applications, we shall formulate for the general integral $\int \varphi(\Gamma) C(f) d\Gamma$, where $\varphi(\Gamma)$ is any function of the quantities Γ . With the collision integral in the form (3.6), we write

$$\int \varphi(\Gamma) C(f) d\Gamma = \int \varphi w(\Gamma, \Gamma_1; \Gamma', \Gamma'_1) f' f'_1 d^4\Gamma - \int \varphi w(\Gamma', \Gamma'_1; \Gamma, \Gamma_1) f f_1 d^4\Gamma$$

where for brevity $d^4\Gamma = d\Gamma d\Gamma_1 d\Gamma' d\Gamma'_1$. Since the integration here is over all the variables $\Gamma, \Gamma_1, \Gamma', \Gamma'_1$, we can, without altering the integral, rename the variables in any manner. Interchanging Γ, Γ_1 and Γ', Γ'_1 in the second integral, we find

$$\int \varphi(\Gamma) C(f) d\Gamma = \int (\varphi - \varphi') w(\Gamma, \Gamma_1; \Gamma', \Gamma'_1) f' f'_1 d^4\Gamma$$

Interchanging here Γ, Γ' and Γ_1, Γ'_1 , taking half the sum of the resulting integrals, and noting the obvious symmetry of w with respect to the two colliding particles, we obtain the transformation rule

$$\int \varphi(\Gamma) C(f) d\Gamma = \frac{1}{2} \int (\varphi + \varphi_1 - \varphi' - \varphi'_1) w' f' f'_1 d^4\Gamma \quad (4.4)$$

In particular, $\int C(f) d\Gamma = 0$: with $C(f)$ here in the form (3.7), we have

$$\int C(f) d\Gamma = \int w' (f' f'_1 - f f_1) d^4\Gamma = 0 \quad (4.5)$$

Applied to the integral (4.3), the rule (4.4) gives

$$\begin{aligned} dS/dt &= \frac{1}{2} \int w' f' f'_1 \log(f' f'_1 / f f_1) d^4\Gamma dV \\ &= \frac{1}{2} \int w' f f_1 x \log x d^4\Gamma dV \end{aligned}$$

where $x = f' f'_1 / f f_1$. Subtracting from this equation half of the zero integral (4.5), we convert it to

$$dS/dt = \frac{1}{2} \int w' f f_1 (x \log x - x + 1) d^4\Gamma dV \quad (4.6)$$

The function in the parentheses in the integrand is non-negative for all $x > 0$; it is zero when $x = 1$, increasing on either side of that point. By definition, the factors w', f and f_1 in the integrand are also positive. We thus obtain the required result,

$$dS/dt \geq 0 \quad (4.7)$$

expressing the law of increase of entropy; the equality occurs at equilibrium. †

Note that, since the integrand in (4.6) (and therefore in (4.3)) is non-negative, not only the whole integral (4.3) over $d\Gamma dV$ but also that over $d\Gamma$ alone is positive. Thus collisions increase the entropy in each volume element of the gas. This does not, of course, imply that the entropy itself increases in every volume element, since it can be transferred from one region to another by the free motion of the molecules.

5.3.5 §5. The change to macroscopic equations

The Boltzmann transport equation gives a microscopic description of the way in which the state of the gas varies with time. We shall show how the transport equation can be converted into the usual equations of fluid mechanics, which give a less detailed, macroscopic description of this time variation. The description is valid when the macroscopic properties (temperature, density, velocity, etc.) of the gas vary sufficiently slowly through its volume: the distances L

over which they change appreciably must be much greater than the mean free path l of the molecules.

It has already been mentioned that the integral

$$N(t, \mathbf{r}) = \int f(t, \mathbf{r}, \Gamma) d\Gamma \quad (5.1)$$

is the spatial distribution density of gas molecules; the product $\rho = mN$ is correspondingly the mass density of the gas. The macroscopic velocity of the gas is

denoted by $\mathbf{V}$ (in contrast to the microscopic velocities $\mathbf{v}$ of the molecules); it is defined as the mean

$$\mathbf{V} = \bar{\mathbf{v}} = \frac{1}{N} \int \mathbf{v} f d\Gamma \quad (5.2)$$

Collisions do not alter either the number of colliding particles or their total energy and momentum. It is therefore clear that the collisional part of the change in the distribution function also cannot affect the macroscopic quantities in each volume element of the gas—its density, internal energy, and macroscopic velocity $\mathbf{V}$: the collisional parts of the change in the total number, energy and momentum of the molecules in unit volume of the gas are given by the zero integrals

$$\int C(f) d\Gamma = 0, \quad \int \epsilon C(f) d\Gamma = 0, \quad \int \mathbf{p} C(f) d\Gamma = 0 \quad (5.3)$$

These equations are easily derived by applying to the integrals the transformation (4.4) with $\varphi = 1, \epsilon$ and $\mathbf{p}$ respectively; the first integral is zero identically, the other two are zero by virtue of the conservation of energy and momentum in collisions.

Let us now take the transport equation

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} (v_\alpha f) = C(f) \quad (5.4)$$

and integrate over $d\Gamma$ after first multiplying by m, p_β or ϵ . In every case, the right-hand side is zero, and we have the equations

$$\partial \rho / \partial t + \operatorname{div} \rho \mathbf{V} = 0 \quad (5.5)$$

$$\partial (\rho V_\alpha) / \partial t + \partial \Pi_{\alpha\beta} / \partial x_\beta = 0 \quad (5.6)$$

$$\partial (N \bar{\epsilon}) / \partial t + \operatorname{div} \mathbf{q} = 0 \quad (5.7)$$

The first of these is the usual continuity equation of fluid mechanics, expressing the conservation of mass of the gas. The second equation expresses the conservation of momentum; the tensor $\Pi_{\alpha\beta}$ is defined as

$$\Pi_{\alpha\beta} = \int m v_\alpha v_\beta f d\Gamma \quad (5.8)$$

and is the momentum flux tensor; its component $\Pi_{\alpha\beta}$ is the α -component of the momentum transferred in unit time by molecules across unit area perpendicular to the x_β -axis. Lastly, (5.7) is the equation of conservation of energy; the vector $\mathbf{q}$ is defined as

⁰† The proof of the law of increase of entropy by means of the transport equation is due to Boltzmann, and was the first microscopic proof of that law. As applied to gases, the law is often called the H theorem, since Boltzmann used the symbol H for the entropy.

$$\mathbf{q} = \int \epsilon \mathbf{v} f d\Gamma \quad (5.9)$$

and is the energy flux in the gas.

To reduce (5.6) and (5.7) to the usual equations of fluid mechanics, however, we have still to express $\Pi_{\alpha\beta}$ and $\mathbf{q}$ in terms of macroscopic quantities. It has already been mentioned that the macroscopic description of the gas presupposes sufficiently small gradients of its macroscopic properties. We can then suppose, as a first approximation, that in each separate region of the gas thermal equilibrium is reached, whereas the gas as a whole is not in equilibrium. Thus the distribution function f in each volume element is assumed to be a local equilibrium function, equal to the equilibrium function f_0 for the density, temperature and macroscopic velocity that prevail in that volume element. This approximation implies the neglect of all dissipative processes (viscosity and thermal conduction) in the gas. Equations (5.6) and (5.7) then naturally reduce to those for an ideal fluid; this may be proved as follows.

The equilibrium distribution in a region of the gas moving as a whole with velocity $\mathbf{V}$ differs from that in a gas at rest only by a Galilean transformation; on changing to a frame of reference K' that moves with the gas, we obtain the ordinary Boltzmann distribution. The velocities $\mathbf{v}'$ of the molecules in this frame are related to those in the original frame K by $\mathbf{v} = \mathbf{v}' + \mathbf{V}$. We write

$$\begin{aligned} \Pi_{\alpha\beta} &= mN \langle v_\alpha v_\beta \rangle \\ &= mN \langle (V_\alpha + v'_\alpha) (V_\beta + v'_\beta) \rangle \\ &= mN (V_\alpha V_\beta + \langle v'_\alpha v'_\beta \rangle) \end{aligned}$$

the terms $V_\alpha v'_\beta$ and $V_\beta v'_\alpha$ give zero on averaging over the directions of $\mathbf{v}'$, since all directions of the velocity of a molecule in the frame K' are equally probable. For the same reason,

$$\langle v'_\alpha v'_\beta \rangle = \frac{1}{3} \langle v'^2 \rangle \delta_{\alpha\beta}; \quad (5.10)$$

the mean square of the thermal velocity is $\langle v'^2 \rangle = 3T/m$, where T is the temperature of the gas. Finally, since NT is equal to the gas pressure P , we find

$$\Pi_{\alpha\beta} = \rho V_\alpha V_\beta + \delta_{\alpha\beta} P \quad (5.11)$$

the familiar expression for the momentum flux tensor in an ideal fluid; with this tensor, equation (5.6) is equivalent to Euler's equation in fluid mechanics (FM, §7).

In order to transform the integral (5.9), we note that the energy ϵ of a molecule in the frame K is related to its energy ϵ' in the frame K' by

$$\epsilon = \epsilon' + m\mathbf{V} \cdot \mathbf{v}' + \frac{1}{2}m\mathbf{V}^2$$

Substituting this and $\mathbf{v} = \mathbf{v}' + \mathbf{V}$ in $\mathbf{q} = N\bar{\epsilon}\mathbf{v}$, we have

$$\begin{aligned} \mathbf{q} &= NV \left[\frac{1}{2}mV^2 + \frac{1}{3}m\overline{v'^2} + \bar{\epsilon}' \right] \\ &= V \left(\frac{1}{2}\rho V^2 + P + N\bar{\epsilon}' \right) \end{aligned}$$

using (5.10) in averaging the product $\mathbf{v}'(\mathbf{V} \cdot \mathbf{v}')$. But $N\bar{\epsilon}'$ is the thermodynamic internal energy of the gas per unit volume; the sum $N\bar{\epsilon}' + P$ is the heat function W of the gas per unit volume. Thus

$$\mathbf{q} = \mathbf{V} \left(\frac{1}{2} \rho V^2 + W \right), \quad (5.12)$$

in agreement with the known expression for the energy flux in the dynamics of an ideal fluid (*FM*, 86).

Lastly, let us consider the law of conservation of angular momentum in the transport equation. This law should apply exactly only to the total angular momentum of the gas, made up of the orbital angular momentum of the molecules in their translational motion and their intrinsic rotational angular momenta $\mathbf{M}$; the total angular momentum density is given by the sum

$$\int \mathbf{r} \times \mathbf{p} f d\Gamma + \int \mathbf{M} f d\Gamma \quad (5.13)$$

These two terms, however, have different orders of magnitude. The orbital angular momentum of the relative motion of two molecules at a mean distance $\bar{r}$ apart is of the order of $m\bar{v}\bar{r}$, but the intrinsic angular momentum $M \sim m\bar{v}d$, which is small in comparison, since we always have $d \ll \bar{r}$.

Naturally, therefore, the Boltzmann transport equation, which corresponds to the first non-vanishing approximation with respect to the small quantity $d/\bar{r}$, cannot take account of the small changes in the orbital angular momentum due to the exchange between the two parts of the total angular momentum (5.13). This has the result that the Boltzmann equation conserves the total orbital angular momentum of the gas: the equation $\int \mathbf{p} C(f) d\Gamma = 0$ which expresses the conservation of momentum necessarily implies that

$$\int \mathbf{r} \times \mathbf{p} C(f) d\Gamma = \mathbf{r} \times \int \mathbf{p} C(f) d\Gamma = 0 \quad (5.14)$$

The reason for this property is evident: since, in the Boltzmann equation, collisions are regarded as taking place at a point, the sum of the orbital angular momenta of the colliding molecules is conserved, as well as the sum of their momenta. In order to derive an equation for the change in the orbital angular momentum, it would be necessary to take account of terms of the next higher order in $d/\bar{r}$, arising from the fact that the molecules are at a finite distance apart at the time of collision.

However, the actual process of angular momentum exchange between the translational and rotational degrees of freedom can be described in terms of the Boltzmann equation by a relation of the form

$$d\mathfrak{M}/dt = \int \mathbf{M} C(f) d\Gamma \quad (5.15)$$

where $\mathfrak{M}$ is the intrinsic angular momentum density of the molecules. Since the sum of the intrinsic angular momenta of two molecules need not be conserved in a collision, the integral on the right of (5.15) is in general not zero, and gives the rate of change of $\mathfrak{M}$. If a non-zero angular momentum density is created in the gas by some means, its subsequent relaxation is described by (5.15).

5.3.6 §6. The transport equation for a slightly inhomogeneous gas

In order to take account of dissipative processes (thermal conduction and viscosity) in a slightly inhomogeneous gas, we must go to the next approximation beyond that treated in §5. Instead of regarding the distribution function in each region of the gas as just the local-equilibrium function f_0 , we shall now allow for a slight deviation of $\mathbf{f}$ from f_0 , putting

$$f = f_0 + \delta f, \quad \delta f = -(\partial f_0 / \partial \epsilon) \chi(\Gamma) = f_0 \chi / T \quad (6.1)$$

where δf is a small correction ($\ll f_0$). The latter is conveniently represented in the above form, with the factor $-\partial f_0/\partial \epsilon$ separated; for the Boltzmann distribution, this derivative differs from f_0 itself only by a factor $1/T$. The correction δf must in principle be determined by solving the transport equation linearized with respect to the correction. †

The function χ must satisfy not only the transport equation itself but also certain additional conditions. The reason is that f_0 is the equilibrium distribution function corresponding to given values (in the volume element concerned) of the gas particle number, energy and momentum densities, i.e. to given values of the integrals

$$\int f_0 d\Gamma, \quad \int \epsilon f_0 d\Gamma, \quad \int \mathbf{p} f_0 d\Gamma \quad (6.2)$$

The non-equilibrium distribution function (6.1) must yield the same values of these quantities, i.e. the integrals with f and f_0 must be the same. The function χ must therefore satisfy the conditions

$$\int f_0 \chi d\Gamma = 0, \quad \int f_0 \chi \epsilon d\Gamma = 0, \quad \int f_0 \chi \mathbf{p} d\Gamma = 0 \quad (6.3)$$

It must be emphasized that even the concept of the temperature in a nonequilibrium gas becomes determinate only when specific values are assigned to the integrals (6.2). The concept becomes entirely rigorous only when the gas as a whole is in complete equilibrium; to define the temperature in a non-equilibrium gas, a further condition is necessary, which may be the specification of these values.

Let us first of all transform the collision integral in the transport equation (3.8). When the functions (6.1) are substituted, the terms not containing the small correction χ cancel, since the equilibrium distribution function makes the collision integral zero. The first-order terms give

$$C(f) = f_0 I(\chi)/T \quad (6.4)$$

† This method of solving the transport equation is due to D. Enskog (1917). where $I(\chi)$ denotes the linear integral operator

$$I(\chi) = \int w' f_{01} (\chi' + \chi'_1 - \chi - \chi_1) d\Gamma_1 d\Gamma' d\Gamma'_1 \quad (6.5)$$

Here we have used the equation $\mathbf{f}_0 \mathbf{f}_{01} = \mathbf{f}'_0 \mathbf{f}'_{01}$; the factor $\mathbf{f}_0$ can be taken outside the integral, since there is no integration over $d\Gamma$.

The integral (6.5) is identically zero for the functions

$$\chi = \text{constant}, \quad \chi = \text{constant} \times \epsilon, \quad \chi = \mathbf{p} \cdot \delta \mathbf{V} \quad (6.6)$$

where $\delta \mathbf{V}$ is a constant vector; this result for the second and third functions follows from the conservation of energy and momentum in each collision. The functions (6.6), which are independent of time and coordinates, therefore satisfy the transport equation itself.

The origin of these solutions is simple. The transport equation is identically satisfied by the equilibrium distribution function with any (constant) particle density and temperature. It is therefore necessarily satisfied also by the small correction

$$\delta f = (\partial f_0 / \partial N) \delta N = f_0 \delta N / N$$

which arises when the density changes by δN ; this gives the first solution (6.6). Similarly, the equation is satisfied by the increment

$$\delta f = (\partial f_0 / \partial T) \delta T$$

which arises when T changes by a small constant amount δT . The derivative $\partial f_0 / \partial T$ is made up of a term constant $\times f_0$ (arising from differentiation of the normalization factor in f_0) and a term proportional to ϵf_0 ; this gives the second solution (6.6). The third solution expresses Galileo's relativity principle: the equilibrium distribution function must satisfy the transport equation in any other inertial frame. When we change to a frame moving relative to the original one with a small constant velocity $\delta \mathbf{V}$, the velocities $\mathbf{v}$ of the molecules become $\mathbf{v} + \delta \mathbf{V}$, and the distribution function therefore receives the increment

$$\delta \mathbf{F} = (\partial f_0 / \partial \mathbf{v}) \cdot \delta \mathbf{V} = - (f_0 / \mathbf{T}) \mathbf{p} \cdot \delta \mathbf{V}$$

corresponding to the third solution (6.6). The "extra" solutions (6.6) are excluded by applying the three conditions (6.3).

We shall transform the left-hand side of the transport equation in a general manner, which covers both thermal conduction and viscosity. That is, we allow the presence of gradients of all macroscopic properties of the gas, including the macroscopic velocity $\mathbf{V}$.

The equilibrium distribution function in a gas at rest ($\mathbf{V} = \mathbf{0}$) is the Boltzmann distribution, which we write as

$$f_0 = \exp \left(\frac{\mu - \epsilon(\Gamma)}{T} \right), \quad (6.7)$$

where μ is the chemical potential of the gas. The distribution in a moving gas differs from (6.7) only by a Galilean transformation of the velocity, as already noted in §5. In order to write this function explicitly, we separate from the total energy $\epsilon(\Gamma)$ of the molecule the kinetic energy of its translational motion:

$$\epsilon(\Gamma) = \frac{1}{2} m v^2 + \epsilon_{\text{int}}; \quad (6.8)$$

the internal energy ϵ_{int} includes the energy of rotation of the molecule and the vibrational energy. Replacing $\mathbf{v}$ by $\mathbf{v} - \mathbf{V}$, we find the Boltzmann distribution in a moving gas:

$$f_0 = \exp \left(\frac{\mu - \epsilon_{\text{int}}}{T} \right) \exp \left(\frac{m(\mathbf{v} - \mathbf{V})^2}{2T} \right). \quad (6.9)$$

In a slightly inhomogeneous gas, f_0 depends on the coordinates and the time, as a result of the variation through the gas (and in the course of time) of its macroscopic properties: the velocity $\mathbf{V}$, the temperature T and the pressure $\mathbf{P}$ (and therefore μ). Since the gradients of these quantities are assumed small, it is sufficient (in this approximation) to replace f by f_0 on the left of the transport equation.

The calculations can be somewhat simplified by noting the obvious fact that the kinetic coefficients, our real subject of interest, do not depend on the velocity $\mathbf{V}$. It is therefore sufficient to consider any one point in the gas, and to choose the point where $\mathbf{V}$ (but not, of course, its derivatives) is zero.

Differentiating the expression (6.9) with respect to time and then putting $\mathbf{V} = \mathbf{0}$, we obtain

$$\frac{T}{f_0} \frac{\partial f_0}{\partial t} = \left[\left(\frac{\partial \mu}{\partial T} \right)_P - \frac{\mu - \epsilon(\Gamma)}{T} \right] \frac{\partial T}{\partial t} + \left(\frac{\partial \mu}{\partial P} \right)_T \frac{\partial P}{\partial t} + m v \cdot \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial t}.$$

By the familiar formulae of thermodynamics,

$$(\partial \mu / \partial T)_P = -s, \quad (\partial \mu / \partial P)_T = 1/N, \quad \mu = w - Ts$$

Where w , s and $1/N$ are the heat function, entropy and volume per gas particle. Hence

$$\frac{T}{f_0} \frac{\partial f_0}{\partial t} = \frac{\epsilon(\Gamma) - w}{T} \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{1}{N} \frac{\partial P}{\partial t} + m \mathbf{v} \cdot \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial t}. \quad (6.10)$$

Similarly,

$$\frac{T}{f_0} \mathbf{v} \cdot \nabla f_0 = \frac{\epsilon(\Gamma) - w}{T} \mathbf{v} \cdot \nabla T + \frac{1}{N} \mathbf{v} \cdot \nabla P + m v_\alpha v_\beta V_{\alpha\beta}, \quad (6.11)$$

where for brevity

$$V_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial V_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{\partial V_\beta}{\partial x_\alpha} \right), \quad V_{\alpha\alpha} = \text{div } \mathbf{V} \quad (6.12)$$

in the last term in (6.11), we have made the identical substitution

$$v_\alpha v_\beta \partial V_\beta / \partial x_\alpha = v_\alpha v_\beta V_{\alpha\beta}$$

The left-hand side of the transport equation is found by adding the expressions (6.10) and (6.11). All derivatives of macroscopic quantities with respect to time can be expressed in terms of their spatial gradients by means of the equations of an ideal (non-viscous and thermally non-conducting) medium; the inclusion of dissipative terms here would lead to quantities of a higher order of smallness. At the point where $\mathbf{V} = 0$, Euler's equation gives

$$\partial V / \partial t = -(1/\rho) \nabla P = -(1/Nm) \nabla P. \quad (6.13)$$

At this same point, the equation of continuity gives $\partial N / \partial t = -N \text{div } \mathbf{V}$, or

$$\frac{1}{N} \frac{\partial N}{\partial t} = \frac{1}{P} \frac{\partial P}{\partial t} - \frac{1}{T} \frac{\partial T}{\partial t} = -\text{div } V, \quad (6.14)$$

with the equation of state for an ideal gas, $N = P/T$. Lastly, the equation of conservation of entropy, $\partial s / \partial t + \mathbf{V} \cdot \nabla s = 0$, gives $\partial s / \partial t = 0$, or

$$\frac{c_p}{T} \frac{\partial T}{\partial t} - \frac{1}{P} \frac{\partial P}{\partial t} = 0, \quad (6.15)$$

with the use of the thermodynamic formulae

$$(\partial s / \partial T)_P = c_p / T, \quad (\partial s / \partial P)_T = -1/P,$$

c_p being the specific heat, again per molecule; the second of these formulae relates to an ideal gas. Equations (6.14) and (6.15) give

$$\frac{1}{T} \frac{\partial T}{\partial t} = -\frac{1}{c_v} \text{div } V, \quad \frac{1}{P} \frac{\partial P}{\partial t} = -\frac{c_p}{c_v} \text{div } V \quad (6.16)$$

since for an ideal gas $c_p - c_v = 1$.

A straightforward calculation leads to the result

$$\frac{\partial f_0}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla f_0 = \frac{f_0}{T} \left\{ \frac{\epsilon(\Gamma) - w}{T} \mathbf{v} \cdot \nabla T + m v_\alpha v_\beta V_{\alpha\beta} + \frac{w - T c_p - \epsilon(\Gamma)}{c_v} \text{div } \mathbf{v} \right\}. \quad (6.17)$$

It must be emphasized that no specific assumption has so far been made about the temperature dependence of the thermodynamic quantities; only the general equation of state of an ideal gas has been used. For a gas with a classical rotation of molecules, and vibrations not excited, the specific heat is independent of temperature, and the heat function is †

$$w = c_p T \quad (6.18)$$

The last term in (6.17) can then be simplified; equating (6.17) and (6.4), we write the transport equation in the final form

$$\frac{\epsilon(\Gamma) - c_p T}{T} \mathbf{v} \cdot \nabla t + \left[m v_\alpha v_\beta - \delta_{\alpha\beta} \frac{\epsilon(\Gamma)}{c_v} \right] V_{\alpha\beta} = I(\chi). \quad (6.19)$$

In §§7 and 8, this equation will be further studied with reference to thermal conduction and viscosity.

From the law of increase of entropy, it follows that a pressure gradient (in the absence of temperature and velocity gradients) does not bring about dissipative processes; cf. FM, §49. In the transport equation, this condition is necessarily satisfied, as is shown by the absence of the pressure gradient on the left of (6.19).

5.4 Boltzmann Equation

уравнение Больцмана играет центральную роль в кинетике, так что хотелось бы как можно скорее освоиться с его применением.

5.4.1 Meaning and General Properties of the Boltzmann Equation

формализм в подходе Больцмана

Определим динамику функции распределения $f(t, \mathbf{r}, \Gamma)$.

Если столкновениями молекул можно было бы пренебречь вовсе, то каждая молекула газа представляла бы собой замкнутую подсистему и для функции распределения молекул была бы

$$\frac{df}{dt} = 0$$

Полная производная означает здесь дифференцирование вдоль фазовой траектории молекулы, определяемой ее уравнениями движения.

Напомним, что теорема Лиувилля имеет место для функции распределения, определенной именно как плотность в фазовом пространстве (т. е. в пространстве переменных, являющихся канонически сопряженными обобщенными координатами и импульсами).

Это обстоятельство не мешает, конечно, тому, что сама функция f может быть затем выражена и через любые другие переменные.

В отсутствие внешнего поля величины Γ свободно движущейся молекулы остаются постоянными и меняются только ее координаты r ; при этом

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \nabla f$$

Если же газ находится, например, во внешнем поле $U(\mathbf{r})$, действующем на координаты центра инерции молекулы, то

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \nabla f + \mathbf{F} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}}$$

где $\mathbf{F} = -\nabla U$ -сила, действующая на молекулу со стороны поля.

уравнение Больцмана в случае столкновений

Учет столкновений нарушает постоянство функции распределения вдоль фазовых траекторий, то есть вместо $\frac{df}{dt} = 0$, надо писать

$$\frac{df}{dt} = \text{St } f$$

где символ $\text{St } f$ означает скорость изменения функции распределения благодаря столкновениям: $dV d\Gamma \cdot \text{St } f$ есть отнесенное к единице времени изменение за счет столкновений числа молекул в фазовом объеме $dV d\Gamma$.

Распишем полные производные через частные:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\mathbf{v} \nabla f + \text{St } f.$$

Это уравнение определяет полное изменение функции распределения в заданной точке фазового пространства;

член $dV d\Gamma (\mathbf{v} \nabla f)$ есть убыль (в 1 с) числа молекул в заданном элементе фазового пространства, связанная с их свободным движением.

Величину $\text{St } f$ называют интегралом столкновений.

появление интеграла столкновений и его первые преобразования

????? что такое w ?????

кинетическое уравнение приобретает реальный смысл лишь после установления вида интеграла столкновений.

К этому вопросу мы сейчас и перейдем.

При столкновении двух молекул значения их величин Γ меняются.

Поэтому всякое столкновение, испытанное молекулой, выводит ее из заданного интервала $d\Gamma$; о таких столкновениях говорят как об актах «ухода».

Полное число столкновений с переходами $\Gamma, \Gamma_r \rightarrow \Gamma', \Gamma'_3$ со всеми возможными значениями $\Gamma_1, \Gamma', \Gamma'_1$ при заданном Γ , происходящих в единицу времени в объеме dV , равно интегралу

$$dV d\Gamma \int w(\Gamma', \Gamma'_1; \Gamma, \Gamma_1) f f_1 d\Gamma_i d\Gamma' d\Gamma'_1$$

Происходят, однако, и такие столкновения («приход»), в результате которых молекулы, обладавшие первоначально значениями величин Γ , лежащими вне заданного интервала $d\Gamma$, попадают в этот интервал.

Это-столкновения с переходами $\Gamma', \Gamma'_1 \rightarrow \Gamma, \Gamma_1$ снова со всеми возможными $\Gamma_1, \Gamma', \Gamma'_1$ при заданном Γ .

Полное число таких столкновений (в единицу времени в объеме dV) равно

$$dV d\Gamma \int w(\Gamma, \Gamma_1; \Gamma', \Gamma'_1) f' f'_1 d\Gamma_1 d\Gamma' d\Gamma'_i$$

Вычтя число актов ухода из числа актов прихода, найдем таким образом, что в результате всех столкновений рассматриваемое число молекул увеличивается в 1 с на

$$dV d\Gamma \int (w' f' f'_1 - w f f_1) d\Gamma_1 d\Gamma' d\Gamma'_1$$

где для краткости обозначено $w \equiv w(\Gamma', \Gamma'_1; \Gamma, \Gamma_1)$, $w' \equiv w(\Gamma, \Gamma_1; \Gamma', \Gamma'_1)$.

Таким образом, находим следующее выражение для интеграла столкновений:

$$\text{St } f = \int (w' f' f'_1 - w f f_1) d\Gamma_i d\Gamma' d\Gamma'_1$$

Во втором члене в подынтегральном выражении интегрирование по $d\Gamma' d\Gamma'_1$ относится только к функции w ; множители f, f_1 от этих переменных не зависят.

Поэтому эту часть интеграла можно преобразовать с помощью соотношения унитарности (2, 9).

В результате интеграл столкновений примет вид

$$\text{St } f = \int w' (f' f'_1 - f f_1) d\Gamma_1 d\Gamma' d\Gamma'_1$$

в котором оба члена входят с одинаковым коэффициентом w' .

Установив вид интеграла столкновений, мы тем самым получили возможность написать кинетическое уравнение

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \nabla f = \int w' (f' f'_1 - f f_1) d\Gamma_1 d\Gamma' d\Gamma'_1$$

Это интегро-дифференциальное уравнение называют также уравнением Больцмана.

Оно было впервые установлено основателем кинетической теории Людвигом Больцманом в 1872 г.

равновесное состояние - частный случай кинетического уравнения

Равновесное статистическое распределение должно удовлетворять кинетическому уравнению тождественным образом.

Это условие действительно выполняется.

Равновесное распределение стационарно и (в отсутствие внешнего поля) однородно; поэтому (2,5) обращается в нуль подынтегральное выражение.

Удовлетворяет кинетическому уравнению, конечно, и равновесное распределение для газа во внешнем поле.

Достаточно вспомнить, что левая часть кинетического уравнения есть полная производная df/dt , тождественно обращающаяся в нуль для всякой функции f , зависящей только от интегралов движения; равновесное же распределение выражается только через интеграл движения - полную энергию молекулы $\varepsilon(\Gamma)$.

В изложенном выводе кинетического уравнения столкновения происходят в одной точке пространства. Ясно поэтому, что Кинетическое уравнение позволяет в принципе следить за изменением функции распределения лишь за промежутки времени, большие по сравнению с длительностью столкновений, и на рас-

??

вения.

Последние порядка величины радиуса действия молеку-

???

ностей, рассмотрение которых допускается кинетическим уравнением (к происхождению этих ограничений мы вернемся еще в § 16).

Но фактически обычно нет необходимости (да и возможности) в столь детальном описании поведения системы; для этого понадобилось бы, в частности, и задание начальных условий (пространственного распределения молекул газа) с такой же точностью, что фактически неосуществимо.

В реальных физических вопросах существуют характерные параметры длины L и времени T , навязываемые системе условиями задачи (характерные длины градиентов макроскопических величин газа, длины и периоды распространяющихся в нем звуковых волн и т. п.).

В таких задачах достаточно следить за поведением системы на расстояниях и за времена, малые лишь по сравнению с этими L и T . Другими словами, малыми лишь по сравнению с L и T должны быть физически бесконечно малые элементы объема и времени. Усредненными по таким элементам задаются и начальные условия задачи.

интеграл столкновений через сечение столкновений

можно записать так:

$$Stf = \int v_{\text{отн}} (f' f'_1 - f f_1) d\sigma d^3 p_i$$

Для одноатомного газа величины Γ сводятся к трем компонентам импульса атома p , а согласно (2,8) функция w в интеграле столкновений может быть заменена функцией $\omega = w(\mathbf{p}', \mathbf{p}'_1; \mathbf{p}, \mathbf{p}_1)$.

Выразив затем эту функцию через дифференциальное сечение столкновений $d\sigma$ согласно $w d^3 p' d^3 p'_1 = v_{\text{отн}} d\omega$ (где $v_{\text{отн}} = |\mathbf{v} - \mathbf{v}_1|$) получим

$$Stf = \int v_{\text{отн}} (f' f'_1 - f f_1) d\sigma d^3 p_i$$

Функция w , а с нею и сечение $d\sigma$, определенное согласно (2,2), содержат в себе δ -функциональные множители, выражающие законы сохранения импульса и энергии, в силу которых переменные p_1, p', p'_1 (при заданном p) в действительности не независимы.

Но после того, как интеграл столкновений выражен в виде (3,9), можно считать, что эти δ -функции уже устранены соответствующими интегрированиями;

тогда $d\sigma$ будет обычным сечением рассеяния, зависящим (при заданном $v_{\text{отн}}$) только от угла рассеяния.

понятие длины свободного пробега

Для качественного рассмотрения кинетических явлений в газе используется грубая оценка интеграла столкновений с помощью понятия длины свободного пробега l — некоторого среднего расстояния, проходимого молекулой между двумя последовательными столкновениями.

Эта величина имеет, конечно, лишь качественный характер; самое ее определение зависит от того, какое именно кинетическое явление в газе рассматривается.

Длина свободного пробега может быть выражена через сечение столкновений σ и плотность числа молекул в газе N .

Пусть молекула в своем движении прошла 1 см; на этом пути она столкнулась с молекулами, находящимися в объеме σ (объем цилиндра с площадью сечения σ и длиной 1 см); в этом объеме имеется σN молекул.

Ясно поэтому, что

$$l \sim 1/N\sigma$$

Сечение столкновений $\sigma \sim d^2$, где d — молекулярные размеры.

Написав также $N \sim \bar{r}^{-3}$, где $\bar{r}$ — среднее расстояние между молекулами, найдем, что

$$l \sim \bar{r} \left(\frac{\bar{r}}{d} \right)^2 = d \left(\frac{\bar{r}}{d} \right)^3$$

Поскольку в газе $\bar{r} \gg d$, то длина пробега $l \gg \bar{r}$.

Отношение $\tau \sim l\bar{v}$ называют временем свободного пробега.

грубая оценка интеграла столкновений

Для грубой оценки интеграла столкновений можно положить

$$\text{St } f \sim -\frac{f - f_0}{\tau} \sim -\frac{\bar{v}}{l} (f - f_0)$$

Написав в числителе разность $f - f_0$, мы тем самым учли, что интеграл столкновений обращается в нуль для равновесной

функции распределения. Знак минус в (3,12) выражает тот факт, что столкновения являются механизмом установления статистического равновесия, т. е. стремятся уменьшить отклонение функции распределения от равновесной. В этом смысле величина τ играет роль времени релаксации для установления равновесия в каждом элементе объема газа.

Distribution Function

Theory

(???)

Напомним, что под идеальным газом подразумевается газ настолько разреженный, что каждая молекула в нем почти все время движется как свободная, взаимодействуя с другими молекулами лишь при непосредственных столкновениях с ними.

Это значит, другими словами, что среднее расстояние между молекулами $\bar{r} \sim N^{-1/3}$ (N - число молекул в единице объема) предполагается большим по сравнению с их собственными размерами, точнее, по сравнению с радиусом действия межмолекулярных сил d ;

малую величину $Nd^3 \sim (d\bar{r})^3$ иногда называют «параметром газовойности».

определение функции распределения

Статистическое описание газа осуществляется функцией распределения $f(t, q, p)$ молекул газа в их фазовом пространстве.

Она является, вообще говоря, функцией выбранных каким-либо образом обобщенных координат молекулы q , и соответствующих им обобщенных импульсов p , а в нестационарном состоянии - еще и от времени t .

Обозначим посредством $d\tau = dqdp$ элемент объема фазового пространства молекулы; dq и dp условно обозначают соответственно произведения дифференциалов всех координат и всех импульсов.

Произведение $f^2 d\tau$ есть среднее число молекул, находящихся в заданном элементе $d\tau$, т. е. обладающих значениями q и p в заданных интервалах dq и dp .

К смыслу понятия среднего в этом определении мы вернемся еще ниже.

Хотя функция f будет везде подразумеваться определенной как плотность распределения именно в фазовом пространстве, в кинетической теории целесообразно выражать ее через определенным образом выбранные переменные, которые могут и не являться канонически сопряженными обобщенными координатами и импульсами.

Условимся, прежде всего, об этом выборе.

Поступательное движение молекулы всегда классично.

Оно описывается координатами $\mathbf{r} = (x, y, z)$ ее центра инерции и импульсом $\mathbf{p}$ (или скоростью $\mathbf{v} = \mathbf{p}/m$) ее движения как целого.

В одноатомном газе поступательным исчерпывается все движение частиц (атомов).

функция распределения - вращательные и колебательные вклады

В многоатомных газах молекулы обладают еще и вращательными и колебательными степенями свободы.

Вращательное движение молекулы в газе практически всегда тоже классично.

Оно описывается, прежде всего, заданием вектора вращательного момента молекулы M .

Для двухатомной молекулы этого достаточно.

Такая молекула представляет собой ротатор, вращающийся в плоскости, перпендикулярной вектору M .

Что же касается угла φ поворота оси молекулы в этой плоскости, то в реальных физических задачах функцию распределения можно считать независимой от него, т.е. все ориентации молекулы в указанной плоскости - равновероятными.

Это обстоятельство связано с быстротой изменения угла φ при вращении молекулы, и его происхождение можно пояснить следующим образом.

Скорость изменения φ (угловая скорость вращения молекулы есть $\dot{\varphi} \equiv \Omega = M/I$).

Среднее значение этой скорости $\bar{\Omega} \sim \bar{v}/d$, где d - молекулярные размеры, а $\bar{v}$ -среднее значение линейных скоростей.

Но различные молекулы имеют различные значения Ω , распределенные по некоторому закону вокруг $\bar{\Omega}$.

Поэтому молекулы, имевшие в начальный момент одинаковые φ , очень быстро расходятся по значениям φ ; происходит, как говорят, быстрое «размешивание» по углам.

Пусть в начальный момент $t = 0$ распределение молекул по углам $\varphi = \varphi_0$ (в интервале от 0 до 2π) и по Ω дается некоторой функцией $f(\varphi_0, \Omega)$.

Выделим из нее независимое от φ среднее значение

$$f = \bar{f}(\Omega) + f'(\varphi_0, \Omega), \quad \bar{f}(\Omega) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} f(\varphi_0, \Omega) d\varphi_0$$

так что $f'(\varphi_0, \Omega)$ - знакопеременная функция с равным нулю средним значением.

При дальнейшей эволюции за счет свободного вращения молекул ($\varphi = \Omega t + \varphi_0$) функция распределения меняется согласно

$$f(\varphi, \Omega, t) = \bar{f}(\Omega) + f'(\varphi - \Omega t, \Omega)$$

(причем аргумент $\varphi - \Omega t$ подразумевается приведенным к интервалу от 0 до 2π путем вычитания надлежащего целого кратного от 2π).

С течением времени f' становится все более быстро осциллирующей функцией от Ω : характерный период осцилляций $\Delta\Omega \sim 2\pi/t$ и уже за время свободного (между двумя столкновениями) пробега молекул становится малым по сравнению с $\bar{\Omega}$.

Но все наблюдаемые физические величины содержат в себе некоторое усреднение функции распределения по Ω ;

вклад же быстро осциллирующей функции f' в такие средние пренебрежимо мал.

Именно это и позволяет заменить функцию распределения $f(\varphi, \Omega)$ усредненной по углам функцией $\bar{f}(\Omega)$.

Изложенные соображения имеют, очевидно, общий характер и относятся к любым быстро меняющимся величинам (фазам), пробегающим значения в конечных интервалах.

возвращаясь к вращательным степеням свободы молекул, отметим, что в многоатомных газах функция распределения может еще зависеть от углов, определяющих фиксированную ориентацию осей молекулы по отношению к вектору M .

Так, в молекулах типа симметрического волчка это — угол между M и осью волчка (угол прецессии);

от быстро меняющихся же углов вращения волчка вокруг собственной оси и прецессионного вращения этой оси вокруг M функцию распределения снова можно считать не зависящей.

Колебательное движение атомов внутри молекулы практически всегда квантуется, так что колебательное состояние молекулы определяется соответствующими квантовыми числами.

В обычных условиях (при не слишком высоких температурах), однако, колебания вообще не возбуждены и молекула находится на своем основном (нулевом) колебательном уровне.

В дальнейшем мы будем обозначать символом Γ совокупность всех переменных, от которых зависит функция распределения, за исключением координат молекулы как целого и времени t .

Из элемента фазового объема $d\tau$ выделим множитель $dV = dxdydz$, а остальную его часть, преобразованную к используемым переменным (и проинтегрированную по углам, от которых функция f не зависит), обозначим символом $d\Gamma$.

Величины Γ обладают важным общим свойством: это - интегралы движения, остающиеся постоянными для каждой молекулы в течение ее свободного (в отсутствие внешнего поля) движения между двумя последовательными столкновениями; в результате же каждого столкновения эти величины, вообще говоря, меняются.

А координаты x, y, z молекулы как целого, разумеется, меняются в течение ее свободного движения.

элементы фазового объема для разных газов

Для одноатомного газа величинами Γ являются три компоненты импульса атома $p = m\mathbf{v}$, так что $d\Gamma = d^3p$.

Для двухатомной молекулы в Γ входит, помимо импульса p , еще и вращательный момент M ;

соответственно элемент $d\Gamma$ можно представить в виде

$$d\Gamma = 2\pi d^3p M d\phi_M d\phi_M$$

где ϕ_M - элемент телесных углов для направления вектора M .

Для молекулы типа симметричного волчка в число величин входит также и угол θ между M и осью волчка;

Элемент фазового пространства имеет вид:

$$d\Gamma = 4\pi^2 d^3p M^2 dM d\phi_M d\phi_M \cos \theta,$$

в котором один множитель 2π возникает от интегрирования по углу вращения волчка вокруг своей оси, а другой множитель 2π - от интегрирования по углу прецессионного вращения.

Интеграл

$$\int f(t, \mathbf{r}, \Gamma) d\Gamma = N(t, \mathbf{r})$$

есть плотность пространственного распределения частиц газа; $N dV$ есть среднее число молекул в элементе объема dV .

замечания о размерах физически бесконечно малых элементов объема и средним межмолекулярным расстоянием

В этой связи необходимо сделать следующие замечания.

Когда речь идет о бесконечно малом элементе объема dV , то подразумевается, собственно говоря, не математически, а физически малый объем, т.е. участок пространства, размеры которого очень малы по сравнению с характеристическими размерами задачи L , но в то же время велики по сравнению с размерами молекулы.

Это значит, другими словами, что утверждение о нахождении молекулы в данном элементе объема dV определяет расстояний порядка ее размеров.

Это обстоятельство весьма существенно. (!! в самом деле, это принципиально важно для понимания природы столкновений!)

Если бы координаты частиц газа определялись точно, то при столкновении, скажем, двух атомов одноатомного газа, движущихся по определенным классическим траекториям, результат столкновения был бы тоже вполне определенным.

Если же речь идет (Как всегда в кинетической теории газов) о столкновении атомов, происходящем в данном физически малом элементе объема, то ввиду неопределенности точного взаимного расположения атомов результат столкновения тоже будет неопределенным и можно говорить лишь о вероятности того или иного его исхода.

Мы можем теперь уточнить, что, говоря о средней плотности числа частиц, мы имеем в виду усреднение по объемам определенных таким образом физически бесконечно малых элементов и соответственно по временам порядка величины времени пролета частиц через такие элементы.

Поскольку размеры элементов объема, по отношению к которым определена функция распределения, велики по сравнению с молекулярными размерами d , то расстояния L , на которых быть тоже велики по сравнению с d .

Соотношение же между размерами физически бесконечно малых элементов объема и средними межмолекулярным расстоянием $\bar{r}$ может быть, вообще говоря, произвольным.

Существует, однако, различие в характере определяемой функцией распределения плотности N в зависимости от величины этого соотношения.

Если размеры элементов dV не велики по сравнению с $\bar{r}$, то плотность N не является макроскопической величиной: флуктуации числа частиц, находящихся в dV , сравнимы с его средним значением.

Плотность N становится макроскопической величиной, лишь если она определена по отношению к объемам dV , содержащим много частиц; тогда флуктуации числа частиц в этих объемах относительно малы.

Ясно, однако, что такое определение возможно лишь, если и характерные размеры задачи $L \gg \bar{r}$.

место функции распределения в классической и квантовой механике

ответим на вопрос, что конкретно представляет из себя она там?
важная связка.

5.4.2 BBGKY Hierarchy

Обсудим подробно цепочку ББКГИ.

алгоритм вывода через цепочку ББГКИ

Получаем цепочку ББКГ:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial}{\partial t} + \sum_{i=1}^n \frac{\mathbf{p}_i}{m} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} + \sum_{i=1}^n \left(\mathbf{X}_i + \sum_{j=1}^n \mathbf{F}_{ij} \right) \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_i} \right) f^{(n)} = \\ = - \sum_{i=1}^n \iint \mathbf{F}_{i,n+1} \cdot \frac{\partial f^{(n+1)}}{\partial \mathbf{p}_i} d\mathbf{r}_{n+1} d\mathbf{p}_{n+1} \quad (5.1) \end{aligned}$$

обзор параметров системы

Вспомним из механики, как описываем системы:

приведенная функция распределения $f^{(n)}(\mathbf{r}^n, \mathbf{p}^n; t)$ как

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

где $\mathbf{r}^n \equiv \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n$ и $\mathbf{r}^{(N-n)} \equiv \mathbf{r}_{n+1}, \dots, \mathbf{r}_N$.

смыслее в том, что у нее n частиц имеют такие-то координаты и импульсы.

она показывает плотность частиц. то есть доля числа частиц в ф. пр. к этому объему.

$f^{[N]}$ - функция распределения N частиц.

уравнения Гамильтона и Лиувилля в случае наличия силы

Для поиска уравнений движения для $f^{(n)}$, рассмотрим специальный случай, когда общая сила, действующая на частицу i это сумма внешних сил $\mathbf{X}_i$, появляющихся за счет внешнего потенциала $\phi(\mathbf{r}_i)$, и пары сил $\mathbf{F}_{ij}$ за счет взаимодействия с другими всеми частицами j , учитывая что с собой нет взаимодействия $\mathbf{F}_{ii} = 0$.

теперь второе уравнение Гамильтона имеет вид:

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{r}_i} = -\mathbf{X}_i - \sum_{j=1}^N \mathbf{F}_{ij}$$

Уравнение Лиувилля можно записать с учетом вида полной производной по времени,

$$\frac{dB}{dt} = \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial B}{\partial \mathbf{r}_i} \cdot \dot{\mathbf{r}}_i + \frac{\partial B}{\partial \mathbf{p}_i} \cdot \dot{\mathbf{p}}_i \right), \text{ получаем:}$$

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

Умножим на $N!/(N-n)!$ и проинтегрируем по $3(N-n)$ координатам $\mathbf{r}_{n+1}, \dots, \mathbf{r}_N$ и $3(N-n)$ импульсами $\mathbf{p}_{n+1}, \dots, \mathbf{p}_N$.

(???)

переход к цепочке ББГКИ с помощью приближений

Первое приближение - перейти к приведенной функции распределения.

Функция распределения $f^{[N]}$ нулевая, когда r_i находится вне объема, занимаемом системой и должна уменьшаться с ростом $\mathbf{p}_i \rightarrow \infty$, чтобы гарантировать сходимость интеграла по импульсам от ней к единице.

Поэтому $f^{[N]}$ обнуляется на пределах интегрирования, а производная $f^{[N]}$ по каждой компоненте координаты и импульса дадут нулевой вклад после интегрирования по этой компоненте, ибо выразятся через эту же функцию.

???? поэтому при интегрировании исчезают в уравнении Лиувилля все члены с $i > n$.

Поэтому домножим уравнение на $\frac{N!}{(N-n)!}$, проинтегрируем и теперь для приведенной функции распределения $f^{(n)}$ получится уравнение:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial}{\partial t} + \sum_{i=1}^n \frac{\mathbf{p}_i}{m} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} + \sum_{i=1}^n \mathbf{X}_i \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_i} \right) f^{(n)} = \\ = - \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \mathbf{F}_{ij} \cdot \frac{\partial f^{(n)}}{\partial \mathbf{p}_i} - \frac{N!}{(N-n)!} \sum_{i=1}^n \sum_{j=n+1}^N \iint \mathbf{F}_{ij} \cdot \frac{\partial f^{[N]}}{\partial \mathbf{p}_i} d\mathbf{r}^{(N-n)} d\mathbf{p}^{(N-n)} \quad (5.2) \end{aligned}$$

За счет одинаковости частиц, функция $f^{[N]}$ симметрична при перестановке в ней частиц местами и суммы членов от $j = n + 1$ до N в правой части (5.2) могут быть заменены на величину $(N - n)$, умноженную на значение любого одного члена..

Теперь напишем уравнение (5.2) в виде, подчеркивающим связь $f^{(n)}$ с $f^{(n+1)}$:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial}{\partial t} + \sum_{i=1}^n \frac{\mathbf{p}_i}{m} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} + \sum_{i=1}^n \left(\mathbf{X}_i + \sum_{j=1}^n \mathbf{F}_{ij} \right) \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_i} \right) f^{(n)} = \\ = - \sum_{i=1}^n \iint \mathbf{F}_{i,n+1} \cdot \frac{\partial f^{(n+1)}}{\partial \mathbf{p}_i} d\mathbf{r}_{n+1} d\mathbf{p}_{n+1} \quad (5.3) \end{aligned}$$

Данная система называется иерархией Bogolyubov-Born-Green-Kirkwood-Yvon или BBGKY.

Уравнения точны, хотя и ограничены в своей применимости к системам, для которых взаимодействия частиц являются попарно аддитивными.

Однако они не сразу полезны, потому что они просто выражают одну неизвестную функцию, $f^{(n)}$, в терминах другой, $f^{(n+1)}$. Поэтому необходимо некоторое другое соотношение, которое позволит сдвинуться дальше.

На практике самый важный член в BBGKY иерархии это член при $n = 1$

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

приближение для уравнения Власова

Чтобы приближенно решить

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

нужно связать двухчастичную функцию распределения $f^{(2)}$ с одночастичной $f^{(1)}$.

Простейшая связь может быть в том, чтобы не учитывать парную корреляцию этих двух функций, то есть

$$f^{(2)}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, \mathbf{r}', \mathbf{p}'; t) \approx f^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{p}; t) f^{(1)}(\mathbf{r}', \mathbf{p}'; t)$$

В итоге получаем уравнение Власова:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} + [\mathbf{X}(\mathbf{r}, t) + \bar{\mathbf{F}}(\mathbf{r}, t)] \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \right) f^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{p}; t) = 0$$

где $\bar{\mathbf{F}}(\mathbf{r}, t) = \iint \mathbf{F}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t) f^{(1)}(\mathbf{r}', \mathbf{p}'; t) d\mathbf{r}' d\mathbf{p}'$ есть средняя сила, оказываемая другими частицами, находящимися в $\mathbf{r}'$, на выбранную частицу, находящуюся в момент времени t в $\mathbf{r}$.

Уравнение (5.4.2) может быть переписано схематически в виде

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}_1}{m} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_1} + \mathbf{X}_1 \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1} \right) f^{(1)} = \left(\frac{\partial f^{(1)}}{\partial t} \right)_{\text{coll}}$$

где член $(\partial f^{(1)}/\partial t)_{\text{coll}}$ это вероятность изменений $f^{(1)}$ за счет столкновений частиц.

Член столкновения строго задается правой частью (5.4.2), но в уравнении Власова он устраняется заменой истинной внешней силы $\mathbf{X}(\mathbf{r}, t)$ эффективной силой - величиной, заключенной в квадратные скобки в уравнении Власова, - которая частично зависит от самой $f^{(1)}$.

По этой причине уравнение Власова называется "бесстолкновительным" приближением.

В самом известном из всех кинетических уравнений, выведенном Больцманом более века назад, $(\partial f^{(1)}/\partial t)_{\text{coll}}$ вычисляется с помощью двух допущений, что только столкновения двух тел вовлечены и что последовательные столкновения некоррелированы.

Эти допущения в общем случае оправдываются только при низких плотностях:

Второе из этих предположений, предположение о "молекулярном хаосе", формально соответствует предположению, что некоррелированность функций распределения применяется до любого столкновения, и не обязательно после него.

Проще говоря, это означает, что при столкновении двух частиц не сохраняется память о каких-либо предыдущих столкновениях между ними, предположение, которое явно разрушается, когда столкновения являются частыми событиями.

Двойное столкновение в точке $\mathbf{r}$ характеризуется импульсами $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2$ двух частиц до столкновения и их импульсами $\mathbf{p}'_1, \mathbf{p}'_2$ после; импульсы после столкновения связаны с их предшествующими значениями законами классической механики.

С приближениями Больцмана член столкновения в правой части уравнения Власова (???) становится

$$\left(\frac{\partial f^{(1)}}{\partial t} \right)_{\text{coll}} = \frac{1}{m} \iint \sigma(\Omega, \Delta p) \left[f^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{p}'_1; t) f^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{p}'_2; t) - f^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{p}_1; t) f^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{p}_2; t) \right] d\Omega d\mathbf{p}_2 \quad (5.4)$$

где $\Delta p \equiv |\mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_1|$ и $\sigma(\Omega, \Delta p)$ это дифференциальное сечение рассеяния под телесным углом $d\Omega$.

Как показал Больцман, эта форма члена столкновений способна объяснить тот факт, что многочастичные системы необратимо эволюционируют к равновесному состоянию.

Эта необратимость описывается Н-теоремой Больцмана; источником необратимости является предположение о молекулярном хаосе.

Решение уравнения Больцмана приводит к явным выражениям для коэффициентов гидродинамического транспорта в терминах некоторых интегралов столкновения.

Дифференциальное сечение рассеяния и, следовательно, сами интегралы столкновения могут быть оценены численно для данного выбора взаимодействия двух тел, хотя для твердых сфер они имеют простую аналитическую форму.

Однако полученные результаты применимы только к разбавленным газам.

модификация Энского для случая твердых сфер

В случае твердых сфер уравнение Больцмана позднее было модифицировано полуэмпирическим путем Энским таким образом, что расширило область его применимости до значительно более высоких плотностей.

Теория Энского сохраняет два ключевых допущения, связанных с выводом уравнения Больцмана, но она также исправляет двумя способами конечный размер сталкивающихся частиц.

Во-первых, учитывается изменение скорости столкновения при взаимодействии твердой сферы.

Поскольку то же самое взаимодействие также ответственно за увеличение давления над его значением идеального газа, увеличение скорости столкновения относительно его предела низкой плотности может быть вычислено, если известно уравнение состояния твердой сферы.

Во-вторых, "коллизийный перенос" добавляется в теорию за счет переписывания интеграла столкновений в форме, в которой функции распределения для двух сталкивающихся частиц оцениваются не в одной и той же точке $\mathbf{r}$, а в точках, разделенных расстоянием, равным диаметру твердой сферы.

Это важная модификация теории, потому что при высоких плотностях именно взаимодействия, а не смещения частиц обеспечивают главным образом перенос энергии и импульса.

Плотность вероятности фазового пространства системы в термодинамическом равновесии является функцией изменяющихся во времени координат и импульсов, но не зависит от t в каждой точке системы.

фазовое пространство

Мы будем использовать символ $f_0^{[N]}(\mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N)$ для обозначения равновесной плотности вероятности;

из следует $\frac{\partial f^{[N]}}{\partial t} = \{\mathcal{H}, f^{[N]}\}$, что достаточным условием для того, чтобы плотность вероятности описывала систему в равновесии, является то, что она должна быть некоторой функцией гамильтониана.

Интегрирование $f_0^{[N]}$ по подмножеству координат и импульсов в виде

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

дает набор равновесных функций распределения фазового пространства $f_0^{(n)}(\mathbf{r}^n, \mathbf{p}^n)$.

равновесная одночастичная функция распределения

Случай $n = 1$ соответствует равновесной одночастичной функции распределения; при отсутствии внешнего поля распределение не зависит от $\mathbf{r}$ и имеет знакомую максвелловскую форму, т.е.

$$f_0^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \frac{\rho \exp(-\beta |\mathbf{p}|^2/2m)}{(2\pi m k_B T)^{3/2}} \equiv \rho f_M(\mathbf{p})$$

где $f_M(\mathbf{p})$ это Максвелловское распределение импульса, нормированное, то есть

$$\int f_M(\mathbf{p}) d\mathbf{p} = 1$$

Соответствующее распределение скоростей $\mathbf{u}$ есть

$$\phi_M(\mathbf{u}) = \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} \exp(-m\beta|\mathbf{u}|^2/2)$$

переход в тау-приближение

хз нужно знать.

равновесные функции распределения для уравнения Больцмана

Например, это распределение Максвелла для невырожденного газа: ...

Для ферми газа это распределение Ферми

$$f = \left(\exp\left\{ \frac{\frac{m(v-V)^2}{2} - \mu}{T} \right\} + 1 \right)^{-1}$$

интеграл столкновений и его смысл

У интеграла столкновений есть равновесная функция распределения, которое его зануляет.

Например, для свободных электронов это функция Ферми-Дирака

поток импульса из уравнения Больцмана

5.4.3 Boltzmann Equation in the τ -Approximation

обзор применений

вид уравнения в тау-приближении

проводимость Друде в гидродинамическом подходе (???)

учет упругих столкновений на беспорядке

(8 задача из задания. это вроде запись семинара)

Работаем с уравнением Больцмана:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial r_\alpha} + \frac{\partial f}{\partial p_\alpha} F_\alpha = I_1[f] + I_2[f]$$

Рассмотрим интеграл столкновений, он представляет из себя два члена, один - за счет столкновений на примесях, другой - друг на друге.

Здесь интеграл столкновений записан в виде двух: $I_1[f]$ - часть, учитывающая прилет, $I_2[f]$ - разлет. Распишем интеграл столкновений учитывает два направления - прилет и разлет:

$$I_1[f] = \int w(p, p_1, p', p'_1) f(p) f(p'_1) (1 - f(p)) (1 - f(p_1)) d\Gamma_1 d\Gamma' d\Gamma'_1 - \quad (5.5)$$

$$- \int w(p, p_1, p', p'_1) f(p) f(p'_1) (1 - f(p')) (1 - f(p_1')) d\Gamma_1 d\Gamma' d\Gamma'_1 \quad (5.6)$$

$$I_2[f] = \int w(p, p, p') f(p) f(p') (1 - f(p')) - w(p, p', p) f(p) f(p') (1 - f(p')) d\Gamma_1 d\Gamma' d\Gamma'_1$$

$$I_2[f] = \int w(p, p')(f(p) - f(p'))d\Gamma$$

зачуляется он при...

$$\int p_\alpha I_2 d\Gamma \neq 0$$

Если

$$f = \int A(\dots)d\Gamma,$$

то получаем

$$\int A \frac{\partial f}{\partial t} d\Gamma + \int A \frac{\partial f}{\partial t} d\Gamma + \int A \frac{\partial f}{\partial t} d\Gamma = \int A I_1 d\Gamma + \int A I_2 d\Gamma$$

Покомпонентно суть каждого члена следующая:

$$\frac{\partial}{\partial t}(n\langle A \rangle) + \frac{\partial}{\partial r_\alpha} j_{A\alpha} - F_\alpha \int \frac{\partial A}{\partial p_\alpha} f d\Gamma$$

Так как $\int A f d\Gamma = n\langle A \rangle$, потому что $\langle A \rangle = \frac{\int A f d\Gamma}{\int f d\Gamma}$. Касательно последнего члена, используем приближение и интегрируем по частям:

$$\int \frac{\partial f}{\partial p_\alpha} F_\alpha d\Gamma = F_\alpha \int \frac{\partial f}{\partial p_\alpha} A d\tilde{\Gamma} dp_\alpha + F_\alpha [\int f A d\tilde{\Gamma} - \int \dots]$$

Исследуем полученное уравнение. Если подставить $A = 1$, то

$$\frac{\partial}{\partial t}(n\langle A \rangle) + \frac{\partial}{\partial r_\alpha} j_{A\alpha} - F_\alpha \int \frac{\partial A}{\partial p_\alpha} f d\Gamma$$

Если подставить $A = p_\beta$

тензор плотности потока импульса

Тензор плотности потока импульса, как известно, имеет вид:

$$\Pi_{\alpha\beta} = j_{A\alpha} \int p_\beta v_\alpha f d\Gamma$$

Про него знаем, что

$$\Pi_{\alpha\beta} = \int p_\beta v_\alpha f d\Gamma = m \int v_\beta v_\alpha f d\Gamma = \quad (5.7)$$

$$= m \int (V_\beta + u_\beta)(V_\alpha + u_\alpha) f d\Gamma = \quad (5.8)$$

$$= m V_\alpha V_\beta \int f d\Gamma + 0 + 0 + m \int u_\alpha u_\beta f d\Gamma = \quad (5.9)$$

$$= m n V_\alpha V_\beta + m \int u_\alpha u_\beta f d\Gamma \quad (5.10)$$

где была введена тепловая скорость $u : v = V + u$

$$m n V_\alpha V_\beta + m \int u_\alpha u_\beta f d\Gamma = m n V_\alpha V_\beta + m \int u u_\alpha u_\beta f_0(\varepsilon_u) d\Gamma + m \int u u_\alpha u_\beta \delta f d\Gamma$$

где $\varepsilon_u = mu^2/2$.

$$\Pi_{\alpha\beta} = mnV_\alpha V_\beta + p\delta_{\alpha\beta} - \sigma_{\beta\alpha}$$

Здесь вводится сдвиговая вязкость (обычная) через тензор вязких напряжений $\sigma'_{\alpha\beta}$, определяем $\sigma_{\alpha\beta} = \sigma'_{\alpha\beta} - p\delta_{\alpha\beta}$

Еще кстати есть объемная, которую мы не смотрим.

Теперь распишем

$$u^2 f_0 d\Gamma = \frac{2}{m} \int \frac{mu^2}{2} f_0 d\Gamma = \frac{2}{m} \int f_0 d\Gamma \frac{\int \cdot}{\cdot} = \frac{2}{m} n \frac{3}{2} T = \frac{3p}{m}$$

$$F_\alpha \int \frac{\partial f}{\partial p_\alpha} A d\tilde{\Gamma} dp_\alpha = n F_\beta$$

Также известно, что

$$\langle p_\beta \rangle = \langle mv_\beta \rangle = mv_\beta$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(n\langle p_\beta \rangle) = \frac{\partial}{\partial t}(n\langle mnv_\beta \rangle) = \frac{\partial}{\partial t}(\rho v_\beta)$$

тензор плотности потока импульса из уравнения Больцмана

Рассмотрим жидкость, которая зажата вдоль двух пластинок.

$$\Pi_{\alpha\beta} = m \int u_x u_y \delta f d\Gamma$$

$$\Pi_{\alpha\beta} = -\eta \frac{\partial V_{0x}}{\partial y}$$

Запишем уравнение Больцмана:

$$\frac{\partial f}{\partial r_\alpha} v_\alpha = I_1[f] = -\frac{f - f_0}{\tau_{tr}(\varepsilon_u)}$$

Теперь:

$$\frac{\partial f}{\partial r_\alpha} v_\alpha = I_1[f] = -\frac{f - f_0}{\tau_{tr}(\varepsilon_u)}$$

Нам нужно найти δf

различные формы уравнения Больцмана

Подготовимся для применения уравнения Больцмана, для этого познакомимся с разными его формами.

(пока выписки из разных мест)

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

Запишем его в форме

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} = \frac{1}{\tau} (\mathbb{P} - 1)f,$$

Тогда кинетическое уравнение для функции $f(t, \mathbf{p})$ запишется в виде

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

где справа стоит разность между числом частиц, поступающих (в 1 с) в заданный элемент импульс пространства d^3p и покидающих его за то же время.

5.4.4 Other about the Boltzmann Equation

обобщение уравнения Больцмана на неточечные частицы

??? не гуглится, не знаю.
мб больцмана-Энского?
но и не важно.

примеры уравнений Больцмана

Приведем примеры уравнений Больцмана и укажем их особенности для лучшего понимания.

Общий вид уравнения Больцмана следующий:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\mathbf{v} \nabla f + \text{St } f.$$

ур (6.19)???

Без члена с градиентом температуры,

$$mv_{\alpha}v_{\beta} \left(V_{\alpha\beta} - \frac{1}{3}\delta_{\alpha\beta} \text{div } \mathbf{V} \right) + \left(\frac{mv^2}{3} - \frac{\varepsilon(\Gamma)}{c_v} \right) \text{div } \mathbf{V} = I(\chi)$$

Кинетическое уравнение для каждого сорта частиц в плазме (электронов и ионов) имеет вид

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \dot{\mathbf{p}} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = \text{St } f$$

После пренебрежения интегралом столкновений кинетические уравнения для функций распределения электронов (f_e) и ионов (f_i) принимают вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_e}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f_e}{\partial \mathbf{r}} - e \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} [\mathbf{vB}] \right) \frac{\partial f_e}{\partial \mathbf{p}} &= 0 \\ \frac{\partial f_i}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f_i}{\partial \mathbf{r}} + ze \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} [\mathbf{vB}] \right) \frac{\partial f_i}{\partial \mathbf{p}} &= 0 \end{aligned}$$

у максимова даже в (???) линеаризованное уравнение Больцмана принимает вид

$$\Omega \chi + \frac{m}{T} \{u_{\alpha} u_{\beta}\} \{\nabla_{\beta} V_{\alpha}\} = 0$$

вот это я точно не въезжаю.

5.4.5 Collision Integral

Выше мы видели, что по сути кинетическое уравнение напрямую зависит от вида интеграла столкновений и от его преобразований, так что приведем тут весь необходимый анализ.

суть интеграла столкновений

Линеаризация интеграла столкновений по малому отклонению

Обсудим линеаризацию интеграла столкновений по малому отклонению от локально-равновесного распределения

Определим вид интеграла столкновений

$$I_{st} = \int d\Gamma_1 d\Gamma' d\Gamma'_1 w' \{f f_1 - f' f'_1\}$$

в линейном приближении по малому отклонению от равновесного распределения:

$$\begin{aligned} I_{st} &= \int d^3\Gamma w' \{f^0 f_1^0 (1 + \chi) (1 + \chi_1) - f^{0'} f_1^{0'} (1 + \chi') (1 + \chi'_1)\} \approx \\ &\approx f^0 \int d^3\Gamma w' f_1^0 \{\chi + \chi_1 - \chi' - \chi'_1\} \end{aligned}$$

поскольку $f^0 f_1^0 = f^{0'} f_1^{0'}$; напомним, что $d^3\Gamma = d\Gamma_1 d\Gamma' d\Gamma'_1$.

определение $\hat{\Omega}$ как оператора столкновений с точностью до константы (???)

(???) Введем обозначение $I_{st} = f_0 \hat{\Omega} \chi$, где

$$\hat{\Omega} \chi = \int d^3\Gamma w' f_1^0 \{\chi + \chi_1 - \chi' - \chi'_1\}$$

Скалярное произведение уже было определено выше следующим образом:

$$\langle a, b \rangle = \int d\Gamma f_0 a b$$

Поэтому

$$\langle \varphi, \hat{\Omega} \chi \rangle = \int d\Gamma f_0 \varphi \hat{\Omega} \chi$$

самосопряженность $\hat{\Omega}$

Для одноатомных газов $w = w'$. Отсюда следует самосопряженность оператора $\hat{\Omega}$.

В самом деле, представим исследуемое скалярное произведение в виде

$$\begin{aligned} \langle \varphi, \hat{\Omega} \chi \rangle &= \int d^4\Gamma f^0 f_1^0 \varphi w' \{\chi + \chi_1 - \chi' - \chi'_1\} = \\ &= (\Gamma \leftrightarrow \Gamma_1) = \int d^4\Gamma f^0 f_1^0 w' \varphi_1 \{\chi + \chi_1 - \chi' - \chi'_1\} = \\ &= \frac{1}{2} \int d^4\Gamma f^0 f_1^0 w' (\varphi + \varphi_1) \{\chi + \chi_1\} - \frac{1}{2} \int d^4\Gamma f^{0'} f_1^{0'} w' (\varphi + \varphi_1) \{\chi' + \chi'_1\} \end{aligned}$$

Первый интеграл в правой части уравнения выше симметричен относительно замены $\varphi \leftrightarrow \chi$.

В последнем интеграле делаем замену $\Gamma \leftrightarrow \Gamma'$; $\Gamma_1 \leftrightarrow \Gamma'_1$.

Учитывая, что $w = w'$ и $f^0 f_1^0 = f^{0'} f_1^{0'}$, находим

$$\begin{aligned} &\int_1 d^4\Gamma f^0 f_1^0 w' (\varphi' + \varphi'_1) \{\chi + \chi_1\} = \\ &\frac{1}{2} \int d^4\Gamma f^{0'} f_1^{0'} w' (\chi + \chi_1) \{\varphi' + \varphi'_1\} \end{aligned}$$

????? Поэтому последний интеграл также не изменяется при преобразовании $\varphi \leftrightarrow \chi$, что доказывает самосопряженность оператора $\hat{\Omega}$:

$$\langle \varphi, \hat{\Omega} \chi \rangle = \langle \chi, \hat{\Omega} \varphi \rangle$$

неотрицательность диагональных матричных элементов $\hat{\Omega}$

Докажем неотрицательность диагональных матричных элементов этого оператора.

Для этого воспользуемся законом возрастания энтропии (см.???? свойство 3 интеграла столкновений):

$$\int d\Gamma I_{st} \ln f \geq 0$$

который представим в виде

$$\begin{aligned} \int d\Gamma I_{st} \ln f &= \int d\Gamma I_{st} \ln f^0 + \int d\Gamma I_{st} \ln(1 + \chi) \approx \\ &\approx \int d\Gamma I_{st} \chi = \int d\Gamma \chi f_0 \hat{\Omega} \chi = \langle \chi, \hat{\Omega} \chi \rangle \geq 0 \end{aligned}$$

Пусть

$$\hat{\Omega} \psi_n = \Omega_n \psi_n$$

где ψ_n - полный набор ортогональных функций.

Для функции

$$\chi = \sum_m c_m \psi_m; c_m = c_m(r, t), \psi_m = \psi_m(\Gamma)$$

имеем

$$\langle \chi \cdot \hat{\Omega} \chi \rangle = \sum c_n c_m \langle \psi_m, \hat{\Omega} \psi_n \rangle = \sum c_n c_m \Omega_n \langle \psi_m, \psi_n \rangle = \sum_n c_n^2 \langle \psi_n, \psi_n \rangle$$

$$\Omega_n \geq 0$$

Откуда следует, что $\Omega_n \geq 0$, так как $c_n^2 \langle \psi_n, \psi_n \rangle \geq 0$.

Если функция ψ_n - интеграл движения, то собственное значение $\Omega_n = 0$.

??????

собственные значения Ω_n - это частоты релаксации (????)

Покажем, что ненулевые Ω_n имеют смысл частот релаксации.

Пространственно однородное уравнение Больцмана с линеаризованным интегралом столкновений имеет вид

$$\frac{\partial}{\partial t} (f_0(1 + \chi)) = -f_0 \hat{\Omega} \chi$$

Для стационарного локально-равновесного распределения имеем

$$f_0 \frac{\partial}{\partial t} \chi = -f_0 \hat{\Omega} \chi$$

Перепишем его в форме

$$\sum_m \psi_m \frac{\partial c_m}{\partial t} = - \sum_m c_m \Omega_m \psi_m$$

Поскольку ψ_m - ортогональный набор, то

$$\frac{\partial c_m}{\partial t} = -c_m \Omega_m, c_m = c_m(0) e^{-\Omega_m t}$$

Если предположить, что все Ω_n равны, то

$$I_{st} = f_0 \hat{\Omega} \chi = \sum_m f_0 c_m \Omega_m \psi_m = \Omega f_0 \chi = \frac{f - f_0}{\tau}$$

Величина Ω обозначена как τ^{-1} . Такое приближение называется приближением времени релаксации или τ -приближением.

τ -приближение можно применять и в случае неравных друг другу значений Ω_n , если в приличном приближении можно ограничиться одним членом ряда (1.52).

Оператор столкновения и его свойства

тау приближение

одно из часто встречающихся приближений для решения кинетических уравнений это тау приближение.

освоимся с ним, потому что в простейшем случае именно его и нужно использовать.

Examples:

(write later)

примеры интегралов столкновений

Интеграл столкновений при рассеянии электронов на примесях в металле

5.4.6 Symmetry of Kinetic Coefficients and Onsager's Principle

Обсудим подробно симметрию кинетических коэффициентов.

обзор принципа Онсагера симметрии кинетических коэффициентов в кинетике Theory

Коэффициенты теплопроводности и вязкости относятся к категории величин, определяющих процессы релаксации слабо неравновесных систем.

Эти величины - кинетические коэффициенты - удовлетворяют принципу симметрии (принцип Онсагера), который может быть установлен в общем виде, без рассмотрения конкретных релаксационных механизмов.

Но при конкретном вычислении кинетических коэффициентов с помощью кинетических уравнений принцип симметрии не дает каких-либо условий, которые должны были бы дополнительно налагаться на решение уравнений.

При таком вычислении требования этого принципа удовлетворяются, разумеется, автоматически.

Полезно проследить за тем, каким образом это происходит.

Напомним, что в общей формулировке из статистической физики принципа Онсагера фигурирует набор величин x_a , характеризующих неравновесность системы, и набор «термодинамически сопряженных» с ними величин через энтропию S системы: $X_a = -\partial S / \partial x_a$.

Процесс релаксации слабо неравновесной системы описывается уравнениями, определяющими скорости изменения величин x_a в виде линейных функций величин X_a :

$$\dot{x}_a = - \sum_b \gamma_{ab} X_b$$

где γ_{ab} - кинетические коэффициенты.

Согласно принципу Онсагера, если x_a и x_b одинаково ведут себя при обращении времени, то

$$\gamma_{ab} = \gamma_{ba}.$$

При этом скорость изменения энтропии дается квадратичной формой

$$\dot{S} = - \sum_a X_a \dot{x}_a = \sum_{a,b} \gamma_{ab} X_a X_b$$

Первым из этих выражений часто бывает удобным пользоваться для установления соответствия между величинами $\dot{x}_a$ и X_a .

принцип Онсагера в случае теплопроводности

В случае теплопроводности в качестве «скоростей» $\dot{x}_a$ рассматриваем компоненты q'_α вектора диссипативного теплового потока (в каждой заданной точке среды);

индекс a совпадает при этом с векторным индексом α .

Соответствующими величинами X_a будут тогда производные $T^{-2}\partial T/\partial x_\alpha$.

Роль уравнений (5.4.6) играют равенства $q'_\alpha = -\kappa_{\alpha\beta}\partial T/\partial x_\beta$, так что кинетическими коэффициентами γ_{ab} являются величины $T^2\kappa_{\alpha\beta}$.

Согласно принципу Онсагера должно быть

$$\kappa_{\alpha\beta} = \kappa_{\beta\alpha}.$$

принцип Онсагера в случае вязкой жидкости

Аналогичным образом, в случае вязкости в качестве величин $\dot{x}_a$ рассматриваем компоненты тензора вязкого потока импульса $\sigma'_{\alpha\beta}$, а соответствующими X_a являются $-V_{\alpha\beta}/T$ (индексу a отвечает при этом пара тензорных индексов $\alpha\beta$).

Роль уравнения (5.4.6) играют соотношения $\tilde{\sigma}'_{\alpha\beta} = \eta_{\alpha\beta\gamma\delta}V_{\gamma\delta}$, а кинетическими коэффициентами являются величины $T\eta_{\alpha\beta\gamma\delta}$.

Согласно принципу Онсагера должно быть

$$\eta_{\alpha\beta\gamma\delta} = \eta_{\gamma\delta\alpha\beta}.$$

симметрия коэффициентов может быть следствием кинетических уравнений, а не изотропией среды

(? почему кст так, теорема Нетер тут что ли дает симметрию уравнений из изотропии среды мб?)

В рассмотренных в предыдущих параграфах задачах о теплопроводности и вязкости газов указанная симметрия тензоров $x_{\alpha\beta}$ и $\eta_{\alpha\beta\gamma\delta}$ возникала автоматически уже как следствие изотропии среды, безотносительно к решению кинетического уравнения.

Покажем, однако, что эта симметрия возникла бы и в результате решения кинетического уравнения, безотносительно к изотропии газа.

Схема решения задач о теплопроводности и вязкости в слабо неоднородном газе состояла в том, что поправка к равновесной функции распределения ищется в виде

$$\chi = \sum_a g_a(\Gamma) X_a$$

и для функций g_a получаются уравнения вида

$$L_a = I(g_a).$$

Величинами L_a являются в случае теплопроводности компоненты вектора

$$T[\varepsilon(\Gamma) - c_p T] v_\alpha,$$

или в случае вязкости, тензора

$$-T \left[m v_\alpha v_\beta - \frac{\varepsilon(\Gamma)}{c_v} \delta_{\alpha\beta} \right].$$

Решения уравнений (5.4.6) должны удовлетворять дополнительным условиям

$$\int f_0 g_a d\Gamma = 0, \quad \int f_0 g_a \varepsilon d\Gamma = 0, \quad \int f_0 g_a \mathbf{p} d\Gamma = 0$$

С учетом этих условий кинетические коэффициенты $\gamma_{\alpha\beta}$ могут быть записаны в виде интегралов

$$T^2\gamma_{ab} = - \int f_0 L_a g_b d\Gamma$$

Доказательство симметрии $\gamma_{ab} = \gamma_{ba}$ сводится, таким образом, к доказательству равенства интегралов

$$\int f_0 L_a g_b d\Gamma = \int f_0 L_b g_a d\Gamma$$

Оно основано на свойстве «самосопряженности» линеаризованного оператора I , к которому можно прийти следующим образом.

Рассмотрим интеграл

$$\int f_0 \varphi I(\psi) d\Gamma = \int f_0 f_{01} w' \varphi (\psi' + \psi'_1 - \psi - \psi_1) d^4\Gamma$$

где $\psi(\Gamma), \varphi(\Gamma)$ - любые две функции переменных Γ .

Поскольку интегрирование производится по всем переменным $\Gamma, \Gamma_1, \Gamma', \Gamma'_1$ можно, не меняя интеграла, произвести любое их переобозначение.

Произведем переобозначение $\Gamma, \Gamma' \leftrightarrow \Gamma_1, \Gamma'_1$, а затем в каждом из двух получающихся таким образом форм интеграла - еще переобозначение $\Gamma, \Gamma_1 \leftrightarrow \Gamma', \Gamma'_1$.

Взяв сумму всех четырех выражений, имеем

$$\int f_0 \varphi I(\psi) d\Gamma = \frac{1}{4} \int f_0 f_{01} [w'(\varphi + \varphi_1) - w(\varphi' + \varphi'_1)] [(\psi' + \psi'_1) - (\psi + \psi_1)] d^4\Gamma$$

(обозначения w и w' из (3.5)).

Рассмотрим теперь такой же интеграл, в котором функции $\psi(\Gamma)$ и $\varphi(\Gamma)$ заменены соответственно на $\varphi(\Gamma^T)$ и $\psi(\Gamma^T)$ (не меняя при этом переменных в w и w' !).

Произведя в этом интеграле переобозначение $\Gamma^T, \Gamma_1^T, \dots \rightarrow \Gamma, \Gamma_1, \dots$ и воспользовавшись принципом детального равновесия (2.3), получим

$$\int f_0 \psi^T I(\varphi^T) d\Gamma = \frac{1}{4} \int f_0 f_{01} [w(\psi + \psi_1) - w'(\psi' + \psi'_1)] [(\varphi' + \varphi'_1) - (\varphi + \varphi_1)] d^4\Gamma$$

(учтено также, что $f_0(\Gamma^T) = f_0(\Gamma)$).

Раскрыв в (9.8) и (9.9) квадратные скобки и сравнив их почленно, убедимся, что оба интеграла равны друг другу.

При сравнении надо учесть соотношение унитарности (2.9), в силу которого имеем, например,

$$\int f_0 f_{01} w(\psi + \psi_1)(\varphi + \varphi_1) d^4\Gamma = \int f_0 f_{01} w'(\psi + \psi_1)(\varphi + \varphi_1) d^4\Gamma$$

(соотношение (2.9) применено здесь к интегрированию по переменным Γ', Γ'_1 , от которых в подынтегральном выражении зависят только w и w').

Таким образом, приходим к равенству

$$\int f_0 \varphi I(\psi) d\Gamma = \int f_0 \psi^T I(\varphi^T) d\Gamma$$

Отметим, что если принцип детального равновесия справедлив в своей простейшей форме (2.8), $w = w'$, то соотношение (9.10) сводится к буквальной самосопряженности оператора I :

$$\int f_0 \varphi I(\psi) d\Gamma = \int f_0 \psi I(\varphi) d\Gamma$$

где в обоих интегралах фигурируют функции φ и ψ одних и тех же переменных Γ (это сразу очевидно при $w = w'$ из выражения (9.8))

Возвращаясь к кинетическим коэффициентам, произведем в первом интеграле (9.7) переобозначение $\Gamma \rightarrow \Gamma^T$ и учтем, что

$$L_a(\Gamma^T) = \pm L_a(\Gamma)$$

(верхний знак относится к случаю вязкости, нижний - теплопроводности).

Воспользуемся теперь соотношениями (5.4.6) и (9.10).

При этом в (9.10) можно производить интегрирование по Γ^T вместо Γ , значение интеграла от этого, очевидно, не изменится.

Имеем

$$\int f_0 g_b L_a d\Gamma = \pm \int f_0 g_b^T I(g_a) d\Gamma^T = \pm \int f_0 g_a^T I(g_b) d\Gamma^T = \pm \int f_0 g_a^T L_b(\Gamma) d\Gamma^T.$$

Теперь достаточно переобозначить в правой части равенства $\Gamma^T \rightarrow \Gamma$, и с учетом (9.12) мы получим требуемый результат равенства нужных интегралов.

(??) диагональные кинетические коэффициенты положительны, это следует из закона возрастания энтропии

Кинетические коэффициенты должны удовлетворять также и условиям, следующим из закона возрастания энтропии;

в частности, должны быть положительны «диагональные» коэффициенты γ_{aa} .

Поскольку кинетическое уравнение обеспечивает возрастание энтропии, то естественно, что при вычислении с его помощью кинетических коэффициентов эти условия удовлетворяются автоматически.

Возрастание энтропии выражается неравенством

$$-\int \ln f \cdot \text{St } f d\Gamma > 0$$

(до этого соберу эту теорию!!!)

Подставив сюда

$$f = f_0 \left(1 + \frac{\chi}{T}\right), \quad \text{St } f = \frac{f_0}{T} I(\chi),$$

имеем

$$-\int \ln f_0 \text{St } f d\Gamma - \frac{1}{T} \int f_0 \ln \left(1 + \frac{\chi}{T}\right) I(\chi) d\Gamma > 0$$

Первый интеграл обращается в нуль тождественно, а во втором пишем, ввиду малости χ , $\ln(1 + \chi/T) \approx \chi/T$ и находим

$$-\int f_0 \chi I(\chi) d\Gamma > 0$$

Этим неравенством и обеспечиваются необходимые свойства кинетических коэффициентов. В частности, при $\chi = g_a$ оно выражает собой положительность γ_{aa}

пример принципа симметрии: следствие принципа Онсагера из уравнения Больцмана

Покажем на примере тензора $\eta_{ik\alpha\beta}$, каким образом принцип симметрии кинетических коэффициентов Онсагера непосредственно следует из уравнения Больцмана.

Если справедлив принцип детального равновесия $w = w'$, то оператор Ω является самосопряженным:

$$\langle \chi_{\alpha\beta} \Omega \chi_{ik} \rangle = \langle \chi_{ik} \Omega \chi_{\alpha\beta} \rangle$$

поэтому

$$\eta_{ik\alpha\beta} = \eta_{\alpha\beta ik}$$

что является содержанием принципа Онсагера.

(???)

Вследствие H -теоремы Больцмана диагональные элементы оператора Ω неотрицательны:

$$\eta_{ikik} \geq 0$$

Это условие означает, что диагональные кинетические коэффициенты всегда неотрицательны.

Заметим, что положительность кинетических коэффициентов в термодинамике доказывается из постулата возрастания энтропии, а в кинетической теории и закон возрастания энтропии, и положительность кинетических коэффициентов являются следствиями уравнения Больцмана и закона унитарности столкновений.

Итак, задача вычисления любого кинетического коэффициента x сводится к решению уравнения

$$\hat{\Omega}\chi + N = 0$$

причем с точностью до множителя $x = \langle \chi, \Omega \chi \rangle$.

Интегрирование этого уравнения может быть точно проведено в простейших модельных случаях.

В общем случае оно решается приближенно, и наиболее употребительным приближенным методом решения является так называемый метод моментов, или метод Чепмена-Энскога.

5.4.7 Method of Moments (????)

(я не знаю, что это, закоулочек какой-то теории, наверное.)

метод моментов - суть????

хз.

обоснование метода моментов

(оно какое-то есть, пока мне не актуально оно)

Обоснование этого метода проводится с помощью вариационного принципа.

Домножим уравнение (1.59) на $f^0 \chi$ и проинтегрируем по Γ :

$$\langle \chi, \Omega \chi \rangle + \langle N, \chi \rangle = 0$$

Рассмотрим класс функций, определенных условием

$$\langle \varphi, \Omega \varphi \rangle + \langle N, \varphi \rangle = 0$$

Легко проверить, что таких функций бесконечно много, поскольку любая функция

$$-\psi \frac{\langle N\psi \rangle}{\langle \psi, \Omega\psi \rangle}$$

удовлетворяет этому уравнению:

$$\frac{\langle N\psi \rangle^2}{\langle \psi, \Omega\psi \rangle^2} \langle \psi, \Omega\psi \rangle - \frac{\langle N\psi \rangle^2}{\langle \psi, \Omega\psi \rangle} = 0$$

Покажем, что из всех функций, удовлетворяющих условию (1.60), максимальное значение для функционала $\langle \varphi, \Omega\varphi \rangle$ даст точное решение кинетического уравнения (1.59). В самом деле, из закона возрастания энтропии следует, что

$$A = \langle (\varphi - \chi), \Omega(\varphi - \chi) \rangle \geq 0$$

Раскроем это выражение, считая оператор Ω самосопряженным и учитывая соотношения (1.59) и (1.60):

$$\begin{aligned} \langle \varphi, \Omega\varphi \rangle - \langle \varphi, \Omega\chi \rangle - \langle \chi, \Omega\varphi \rangle + \langle \chi, \Omega\chi \rangle &= \\ = \langle \varphi, \Omega\varphi \rangle + \langle \chi, \Omega\chi \rangle - 2\langle \varphi, \Omega\chi \rangle &= \\ = \langle \varphi, \Omega\varphi \rangle + \langle \chi, \Omega\chi \rangle + 2\langle \varphi, N \rangle &= \\ = \langle \chi, \Omega\chi \rangle - \langle \varphi, \Omega\varphi \rangle \geq 0 \end{aligned}$$

Знак равенства имеет место при условии $\chi = \varphi$.

Отсюда следует, что уравнение (1.59) можно представить как решение вариационной задачи на условный экстремум функционала $\langle \varphi, \Omega\varphi \rangle$ при условии (1.60).

Приближенное решение уравнения (1.59) будем искать в виде конечного разложения:

$$\varphi = \sum_{n=1}^{n=n_0} c_n \psi_n(\Gamma),$$

Покажем, что из всех функций, удовлетворяющих условию (1.60), максимальное значение для функционала $\langle \varphi, \Omega\varphi \rangle$ даст точное решение кинетического уравнения (1.59).

В самом деле, из закона возрастания энтропии следует, что

$$A = \langle (\varphi - \chi), \Omega(\varphi - \chi) \rangle \geq 0$$

Раскроем это выражение, считая оператор Ω самосопряженным и учитывая соотношения (1.59) и (1.60):

$$\begin{aligned} \langle \varphi, \Omega\varphi \rangle - \langle \varphi, \Omega\chi \rangle - \langle \chi, \Omega\varphi \rangle + \langle \chi, \Omega\chi \rangle &= \\ = \langle \varphi, \Omega\varphi \rangle + \langle \chi, \Omega\chi \rangle - 2\langle \varphi, \Omega\chi \rangle &= \\ = \langle \varphi, \Omega\varphi \rangle + \langle \chi, \Omega\chi \rangle + 2\langle \varphi, N \rangle &= \\ = \langle \chi, \Omega\chi \rangle - \langle \varphi, \Omega\varphi \rangle \geq 0 \end{aligned}$$

Знак равенства имеет место при условии $\chi = \varphi$.

Отсюда следует, что уравнение (1.59) можно представить как решение вариационной задачи на условный экстремум функционала $\langle \varphi, \Omega\varphi \rangle$ при условии (1.60).

Приближенное решение уравнения (1.59) будем искать в виде конечного разложения:

$$\varphi = \sum_{n=1}^{n=n_0} c_n \psi_n(\Gamma),$$

Приближенное решение уравнения (1.59) будем искать в виде конечного разложения:

$$\varphi = \sum_{n=1}^{n=n_0} c_n \psi_n(\Gamma)$$

где $\{\psi_n(\Gamma)\}$ - некоторый набор линейно независимых функций.

Тогда, как следствие вариационного принципа, наилучшим приближением функции такого вида к точному решению будет функция, коэффициенты c_n которой приводят к максимальному значению величины:

$$\langle \varphi, \Omega \varphi \rangle = \sum_{n=1}^{n=n_0} c_n c_m \Omega_{mn}$$

и удовлетворяют условию (1.60):

$$\sum_{n,m} c_n c_m \Omega_{mn} + \sum_k c_k N_k = 0$$

где $\Omega_{mn} = \langle \psi_m, \Omega \psi_n \rangle$, $N_k = \langle \psi_k, N \rangle$. Коэффициенты c_n будем искать методом неопределенных множителей Лагранжа.

Для этого составим функцию

$$\Phi = \sum_{n,m} c_n c_m \Omega_{mn} - \lambda \left\{ \sum_{n,m} c_n c_m \Omega_{mn} + \sum_k c_k N_k \right\}$$

Согласно методу Лагранжа,

$$\frac{\partial \Phi}{\partial c_n} = 2(1 - \lambda) \sum_m c_m \Omega_{mn} - \lambda N_k = 0$$

Умножим последнее выражение на c_k и просуммируем по $k = 1 \div n_0$:

$$2(1 - \lambda) \sum_{km} c_k c_m \Omega_{km} - \lambda \sum_k c_k N_k = 0$$

Используя то, что обе суммы в последнем выражении равны между собой с точностью до знака (см.

(1.61)) и не равны нулю, получаем

$$2(1 - \lambda) + \lambda = 0; \quad \lambda = 2$$

Найденное значение λ подставим в выражение (1.62).

То-гда

$$\sum_m c_m \Omega_{kn} + N_k = 0$$

Таким образом, для определения n_0 коэффициентов c_k мы имеем систему линейных алгебраических неоднородных уравнений.

Если число коэффициентов n_0 стремится к бесконечности, то система уравнений (1.63) эквивалентна исходному интегральному уравнению (1.59) и определяет точное решение задачи в виде разложения по полному набору функций $\{\psi_n(\Gamma)\}$. В случае конечного числа n_0 эта система уравнений определяет приближенное решение уравнения (1.59), причем, как следует из вариационного принципа, это решение дает значение кинетического коэффициента $k_{n_0} = \langle \varphi, \Omega \varphi \rangle$, которое меньше точного значения этого коэффициента.

Вариационный принцип не дает возможности определить точность вычисления кинетического коэффициента, но гарантирует, что

$$k_1 \leq k_2 \leq \dots \leq k_{n_0} \leq \dots k_\infty$$

Приближенное решение тем ближе к точному значению (при заданном n_0), чем меньше недиагональные матричные элементы Ω_{mn} по сравнению с диагональными.

В частности, если система функций $\{\psi_n(\Gamma)\}$ совпадает с системой собственных функций оператора столкновений, т.е.

$$\hat{\Omega}\psi_n = \Omega_n\psi_n$$

то матрица Ω_{mn} диагональна и метод моментов сразу приводит к точному решению задачи:

$$c_k = -\frac{N_k}{\Omega_k}$$

Обычно решение задачи на собственные значения оператора неизвестно, и в качестве функций ψ_n выбирают набор ортогональных полиномов от скорости, причем в качестве ψ_1 берут неоднородность N , так что

$$N_k = \langle \psi_k, N \rangle = \langle N, N \rangle \delta_{k1}$$

Практика показывает, что метод моментов дает хорошее приближение уже для достаточно небольшого n_0 .

Физической причиной этого является то, что в нейтральных газах потенциал взаимодействия молекул - короткодействующий и вероятность столкновения слабо зависит от относительной скорости сталкивающихся частиц.

Обычно уже одномоментное приближение оказывается достаточно удовлетворительным, двухмоментное приближение меняет кинетические коэффициенты не более чем на 10%, а последующие приближения дают поправку не более 1%.

Исключением из этого правила является применение метода моментов к плазме.

В этом случае хороший результат получается только при $n \approx 10$.

Это связано с тем, что вероятность столкновения при кулоновском взаимодействии сильно зависит от относительной скорости сталкивающихся частиц ($\sim 1/v_{\text{оти}}^4$ - формула Резерфорда).

метод моментов а.к.а. метод Чепмена-Энскогo

(????)

Одномоментное приближение

(всё тот же максимум)

Повторим решение задачи

$$\hat{\Omega}\chi + N = 0$$

в одномоментном приближении.

Ищем χ в виде $\chi = cN$. Умножим исходное уравнение на Nf^0 и проинтегрируем по всем Γ :

$$c\Omega_{NN} + \langle N, N \rangle = 0$$

Отсюда следует, что

$$c = -\frac{\langle N, N \rangle}{\Omega_{NN}}.$$

Интеграл столкновений равен

$$I_{st} = f^0 \hat{\Omega}\chi = -f^0 N = -\frac{1}{c} f^0 \chi = -\frac{1}{c} (f - f^0)$$

пгкуда

$$\tau = -c = \frac{\langle N, N \rangle}{S_{NN}}.$$

13 этом приближении оператор Ω сводится к умножению Па τ^{-1} .

Раньше мы показали, что тензор вязких напряжений равен

$$\begin{aligned}\sigma_{ik} &= \eta_{ik\alpha\beta} \{ \nabla_\beta V_\alpha \} \\ \eta_{ik\alpha\beta} &= -\frac{m^2}{T} \langle \{ u_i u_k \} \chi_{\alpha\beta} \rangle\end{aligned}$$

где $\chi_{\alpha\beta}$ удовлетворяет условию

$$\Omega_{\chi_{\alpha\beta}} + \{ u_\alpha u_\beta \} = 0$$

В τ -приближении

$$\frac{1}{\tau} \chi_{\alpha\beta} + \{ u_\alpha u_\beta \} = 0$$

Следовательно,

$$\chi_{\alpha\beta} = -\tau \{ u_\alpha u_\beta \}$$

thus

$$\eta_{ik\alpha\beta} = \frac{m^2 \tau}{T} \langle \{ u_i u_k \}, \{ u_\alpha u_\beta \} \rangle = \frac{m^2 \tau}{T} \int d^3 \mathbf{v} f^0 \{ u_i u_k \} \{ u_\alpha u_\beta \}.$$

Для вычисления этого интеграла следует заметить, что он обращается в нуль, если хотя бы одна из компонент повторяется нечетное число раз.

В силу симметрии подынтегрального выражения интеграл можно представить в виде

$$\eta_{ik\alpha\beta} = A \delta_{ik} \delta_{\alpha\beta} + B \delta_{i\alpha} \delta_{k\beta} + C \delta_{i\beta} \delta_{k\alpha}$$

Поскольку

$$\{ u_i u_k \} = u_i u_k - \frac{1}{3} \delta_{ik} u^2 = 0$$

то

$$\eta_{ii\alpha\beta} = 3A \delta_{\alpha\beta} + B \delta_{\alpha\beta} + C \delta_{\alpha\beta}$$

или

$$3A + B + C = 0$$

Из явного вида интеграла следует (симметрия кинетических коэффициентов), что $\eta_{ik\alpha\beta} = \eta_{\alpha\beta ik}$; поэтому $B = C$.

Тогда получаем, что

$$B = C = -\frac{3}{2}A$$

и

$$\eta_{ik\alpha\beta} = B \left(-\frac{2}{3} \delta_{ik} \delta_{\alpha\beta} + \delta_{i\alpha} \delta_{k\beta} + \delta_{i\beta} \delta_{k\alpha} \right).$$

Упростим правую часть соотношения (1.64) по парам индексов i, α и k, β :

$$\begin{aligned}\langle \{ u_i u_k \}, \{ u_i u_k \} \rangle &= \left\langle \left(u_i u_k - \frac{1}{3} \delta_{ik} u^2 \right), \left(u_i u_k - \frac{1}{3} \delta_{ik} u^2 \right) \right\rangle = \\ &= \left\langle u^4 + \frac{1}{3} u^4 - \frac{2}{3} u^4 \right\rangle = \frac{2}{3} u^4\end{aligned}$$

С другой стороны, из (1.65) следует, что $\eta_{ikik} = 10B$.

Отсюда следует, что

$$\frac{m^2 \tau}{T} \int d^3 \mathbf{u} f^0 \frac{2}{3} u^4 = 10B$$

Поскольку

$$\langle u^k \rangle = u_T^k (k+1)!!$$

То

$$B = \frac{m^2 \tau}{T} n \left(\frac{T}{m} \right)^2 \frac{2}{30} \times 3 \times 5 = \tau T n = \tau p$$

Таким образом,

$$\begin{aligned} \eta_{ik\alpha\beta} &= \tau p \left(-\frac{2}{3} \delta_{ik} \delta_{\alpha\beta} + \delta_{i\alpha} \delta_{k\beta} + \delta_{i\beta} \delta_{k\alpha} \right) \\ \sigma_{ik} &= \tau p \left(-\frac{2}{3} \delta_{ik} \delta_{\alpha\beta} + \delta_{i\alpha} \delta_{k\beta} + \delta_{i\beta} \delta_{k\alpha} \right) \{ \nabla_\beta V_\alpha \} = \\ &= \tau p \left(-\frac{2}{3} \delta_{ik} \delta_{\alpha\beta} + \delta_{i\alpha} \delta_{k\beta} + \delta_{i\beta} \delta_{k\alpha} \right) \frac{1}{2} \left(\nabla_\beta V_\alpha + \nabla_\alpha V_\beta - \frac{2}{3} \delta_{\alpha\beta} \operatorname{div} \mathbf{V} \right) = \\ &= \eta \left(\nabla_i V_k + \nabla_k V_i - \frac{2}{3} \delta_{ik} \operatorname{div} \mathbf{V} \right) \end{aligned}$$

Обратим внимание, что выражение для коэффициента вязкости в точности совпадает с выражением, которое может быть получено из элементарных соображений.

Критерий устойчивости системы из принципа Онзагера

матрица кинетических коэффициентов должна быть положительно определенной – это гарантирует возрастание энтропии. Это первая часть теоремы Онзагера.

в термоэлектрических явлениях это полезно будет.

пока там пишу, сюда мб вернусь.

Обоснование τ -приближения

(????)

интеграл столкновений обеспечивает неубывание энтропии

Почему интеграл столкновений обеспечивает неубывание энтропии, хотя уравнение Лиувилля для системы частиц обратимо?

пример: вычисление теплопроводности методом Чепмана-Энскога

В качестве примера вычислим вкратце коэффициент теплопроводности методом Чепмана-Энскога.

Подробное решение и дополнительные соображения можно посмотреть в соответствующем разделе про газы.

Будем считать, что газ как целое покоится, а его неравновесность обусловлена исключительно неоднородным стационарным распределением температуры $T(\mathbf{R})$, то есть в газе создан градиент температуры.

В этом случае неоднородность

$$N = \left(\frac{mu^2}{2T} - \frac{5}{2} \right) (u_\alpha \nabla_\alpha) \frac{1}{T} \ln T$$

и линеаризованное уравнение Больцмана имеет вид

$$\Omega\chi = -\left(\frac{mu^2}{2T} - \frac{5}{2}\right)u_\alpha \frac{1}{T}\nabla_\alpha \ln T.$$

Ищем решение этого уравнения в виде

$$\chi = \chi_\alpha \nabla_\alpha \ln T.$$

Тогда

$$\Omega\chi_\alpha + \left(\frac{mu^2}{2T} - \frac{5}{2}\right)u_\alpha = 0.$$

Пусть решение уравнения (1.66) известно.

Вычислим поток энергии

$$q_\alpha = \int d\Gamma f \frac{mu^2}{2} u_\alpha = \int d\Gamma f_0 (1 + \chi) \frac{mu^2}{2} u_\alpha$$

Поскольку при локально-равновесном распределении тепловой поток отсутствует, то

$$\begin{aligned} q_\alpha &= \int d\Gamma f_0 \chi \frac{mu^2}{2} u_\alpha = \int d\Gamma f_0 \chi \left(\frac{mu^2}{2} - \frac{5}{2}T\right) u_\alpha = \\ &= \int d\Gamma f_0 \left(\frac{mu^2}{2} - \frac{5}{2}T\right) u_\alpha \chi_\beta \nabla_\beta \ln T = \\ &= \int d\Gamma f_0 \left(\frac{mu^2}{2T} - \frac{5}{2}\right) u_\alpha \chi_\beta \nabla_\beta T = \\ &= \left\langle \left(\frac{mu^2}{2T} - \frac{5}{2}\right) u_\alpha, \chi_\beta \right\rangle \nabla_\beta T = -\kappa_{\alpha\beta} \nabla_\beta T \end{aligned}$$

Здесь, добавляя в интеграл член $\frac{5}{2}T$, мы воспользовались тем, что $\langle \chi, u_\alpha \rangle = 0$. Поэтому коэффициент теплопроводности

$$\kappa_{\alpha\beta} = -\left\langle \left(\frac{mu^2}{2T} - \frac{5}{2}\right) u_\alpha, \chi_\beta \right\rangle.$$

В τ -приближении уравнение (1.67) переписывается как

$$\frac{1}{\tau}\chi_\alpha + \left(\frac{mu^2}{2T} - \frac{5}{2}\right)u_\alpha = 0$$

и имеет решение

$$\chi_\alpha = \tau \left(\frac{mu^2}{2T} - \frac{5}{2}\right)u_\alpha.$$

Вычисление интеграла производится элементарно

$$\kappa_{\alpha\beta} = \tau \int d\Gamma f_0 \left(\frac{mu^2}{2T} - \frac{5}{2}\right)^2 u_\alpha u_\beta = A\delta_{\alpha\beta}$$

След тензора

$$\begin{aligned} \kappa_{\alpha\alpha} &= 3A = \tau \int d\Gamma f_0 \left(\frac{mu^2}{2T} - \frac{5}{2}\right)^2 u^2 = \\ &= \tau n \left\{ \left(\frac{m}{2T}\right)^2 \frac{1}{n} \int d\Gamma f_0 u^6 - 2\frac{m}{T} \frac{5}{2} \frac{1}{n} \int d\Gamma f_0 u^4 + \frac{25}{4} \frac{1}{n} \int d\Gamma f_0 u^2 \right\} = \\ &= \tau n \left\{ \frac{1}{4} \left(\frac{m}{T}\right)^2 \left(\frac{T}{m}\right)^3 7!! + \frac{5}{2} \left(\frac{m}{T}\right) \left(\frac{T}{M}\right)^2 5!! + \frac{25}{4} \left(\frac{T}{M}\right) 3!! \right\} = \frac{p\tau}{m} \frac{15}{2}. \end{aligned}$$

Поэтому

$$A = \frac{p\tau}{m} \frac{5}{2} = \frac{p\tau c_p}{m}$$

Следовательно,

$$\kappa_{\alpha\beta} = \kappa \delta_{\alpha\beta}, \kappa = \frac{p\tau c_p}{m}$$

Так как далее в каждой кинетической задаче

обобщение на квантовый случай

переход к методу моментов

(нужна теория типа векторного анализа, это в дополнениях нужно прописать!!!!)

(также до этого упущен кусок нужной теории!!!)

Часто кинетическое уравнение решается с помощью так называемого метода моментов, или метода Чепмена-Энскога.

Пусть температура газа однородна, то есть $\nabla T = 0$.

Тогда неравновесность газа обусловлена неоднородным распределением скорости потока V .

В этом случае???????

$$N = \frac{m}{T} \left(u_\alpha u_\beta - \frac{1}{3} \delta_{\alpha\beta} u^2 \right) \nabla_\beta V_\alpha$$

Любой тензор второго ранга есть суперпозиция своих неприводимых частей $T^{(0)}, T_\gamma^{(1)}, \{T_{\alpha\beta}\}$, определенных следующим образом:

$$\begin{aligned} T_{\alpha\beta} &= \delta_{\alpha\beta} T^{(0)} + e_{\alpha\beta\gamma} T_\gamma^{(1)} + \{T_{\alpha\beta}\}; \\ T^{(0)} &= \frac{1}{3} T_{\gamma\gamma}; \\ T_\gamma^{(1)} &= \frac{1}{2} e_{\gamma\delta\omega} T_{\delta\omega}; \\ \{T_{\alpha\beta}\} &= \frac{1}{2} \left(T_{\alpha\beta} + T_{\beta\alpha} - \frac{2}{3} \delta_{\alpha\beta} T_{\gamma\gamma} \right). \end{aligned}$$

Применим это представление к тензору $\nabla_\beta V_\alpha$:

$$\nabla_\beta V_\alpha = \frac{1}{3} \delta_{\alpha\beta} \operatorname{div} \mathbf{V} + e_{\alpha\beta\gamma} (\operatorname{rot} V)_\gamma + \{\nabla_\beta V_\alpha\}$$

Поскольку некоторые выражения зануляются, (???)

$$\begin{aligned} \left(u_\alpha u_\beta - \frac{1}{3} \delta_{\alpha\beta} u^2 \right) \delta_{\alpha\beta} &= 0 \\ \left(u_\alpha u_\beta - \frac{1}{3} \delta_{\alpha\beta} u^2 \right) e_{\alpha\beta\gamma} &= u_\alpha u_\beta e_{\alpha\beta\gamma} = -u_\alpha u_\beta e_{\beta\alpha\gamma} = -u_\beta u_\alpha e_{\beta\alpha\gamma} = -u_\alpha u_\beta e_{\alpha\beta\gamma} = 0 \end{aligned}$$

то число частиц

$$\begin{aligned} N &= \frac{m}{T} \left(u_\alpha u_\beta - \frac{1}{3} \delta_{\alpha\beta} u^2 \right) \{\nabla_\beta V_\alpha\} = \\ &= \frac{m}{T} \{u_\alpha u_\beta\} \{\nabla_\beta V_\alpha\} \end{aligned}$$

так как $u_\alpha u_\beta - \delta_{\alpha\beta} u^2$ и $\{\nabla_\beta V_\alpha\}$ - симметричные тензоры.

Таким образом, линеаризованное уравнение Больцмана принимает вид (???????)

$$\Omega \chi + \frac{m}{T} \{u_\alpha u_\beta\} \{\nabla_\beta V_\alpha\} = 0$$

Оператор Ω действует только на Γ и не действует на координаты.
Поэтому легко избавиться от функции $\{\nabla_\beta V_\alpha\}$.

Ищем решение в виде

$$\chi = \frac{m}{T} \{\nabla_\beta V_\alpha\} \chi_{\alpha\beta}$$

для него

$$\Omega \chi_{\alpha\beta} + \{u_\alpha u_\beta\} = 0$$

Если решение χ известно, то

$$\begin{aligned} \sigma_{ik} &= p\delta_{ik} - \Pi_{ik} = p\delta_{ik} - \int d\Gamma f^0 (1 + \chi) m u_i u_k = \\ &= p\delta_{ik} - \int d\Gamma f^0 m u_i u_k - \int d\Gamma f^0 \chi m u_i u_k \end{aligned}$$

Второй интеграл уже считался выше (???) и равен $p\delta_{ik}$.

Поэтому

$$\sigma_{ik} = - \int d\Gamma f^0 \chi m u_i u_k$$

В силу известного свойства скалярного произведения $\langle u^2 \chi \rangle = 0$, можно в подынтегральном выражении заменить $u_i u_k$ на $\{u_i u_k\}$.

Поэтому

$$\begin{aligned} \sigma_{ik} &= - \int d\Gamma f^0 \chi m \{u_i u_k\} = -m \langle \{u_i u_k\} \chi \rangle = \\ &= -\frac{m^2}{T} \{\nabla_\beta V_\alpha\} \langle \{u_i u_k\} \chi_{\alpha\beta} \rangle = \eta_{ik\alpha\beta} \{\nabla_\beta V_\alpha\}; \\ \eta_{ik\alpha\beta} &= -\frac{m^2}{T} \langle \{u_i u_k\} \chi_{\alpha\beta} \rangle = \frac{m^2}{T} \langle \chi_{\alpha\beta} \Omega \chi_{ik} \rangle \end{aligned}$$

Выражение (1.58) определяет связь между тензором вязких напряжений и градиентом скорости.

(!!!)

Следовательно, тензор $\eta_{ik\alpha\beta}$ является обобщенным кинетическим коэффициентом вязкости.

Ниже мы увидим, что в изотропном случае он сводится к скаляру - коэффициенту первой вязкости η .

5.4.8 Vlasov Equation

Обсудим подробно уравнение Власова.

??? обзор применений уравнения Власова

Уравнение Власова не подходит для жидкостей, однако оно широко используется в физике плазмы, где дальнедействующий характер кулоновского потенциала оправдывает обработку взаимодействий в среднем поле.

(потом конкретно напишу)

??? коэффициенты гидродинамического переноса из уравнения Власова

Из полученных кинетических уравнений можно вычислить коэффициенты гидродинамического переноса, но для реальных жидкостей уравнение Власова не очень применимо, так говорят.

?? границы применимости уравнения Власова

сделанные приближения редко подходят для жидкостей, поскольку????? корреляции между частицами в основном учены слишком грубо.

?? Другие аппроксимации для цепочки ББКГ

еще другие есть, кроме Власова, пока этим заниматься не буду

??? связь аппроксимации Власова и среднего поля

говорят, это типичная аппроксимации среднего поля, но почему?
потом напишу.

5.4.9 Transition to Macroscopic Equations**Theory**

Кинетическое уравнение Больцмана дает микроскопическое описание эволюции состояния газа.

Покажем, каким образом производится переход от кинетического уравнения к обычным уравнениям гидродинамики, осуществляющим менее детальное, макроскопическое описание этой эволюции.

Такое описание применимо в условиях, когда макроскопические свойства газа (его температура, плотность, скорость и т. п.) достаточно медленно меняются вдоль его объема: расстояния L , на которых происходит существенное изменение этих свойств, должны быть велики по сравнению с длиной свободного пробега молекул l . Мы уже упоминали, что интеграл

$$N(t, \mathbf{r}) = \int f(t, \mathbf{r}, \Gamma) d\Gamma$$

есть плотность распределения молекул газа в пространстве; произведение $\rho = mN$ есть соответственно массовая плотность газа. Скорость макроскопического движения газа обозначим через $\mathbf{V}$ (в отличие от микроскопических скоростей молекул $\mathbf{v}$); она определяется как среднее значение

$$\mathbf{V} = \bar{\mathbf{v}} = \frac{1}{N} \int \mathbf{v} f d\Gamma$$

Столкновения не меняют ни числа сталкивающихся частиц ни их суммарных энергии и импульса.

Ясно поэтому, что столкновительная часть изменения функции распределения не может привести к изменению также и макроскопических величин в каждом элементе объема газа-его плотности, внутренней энергии макроскопической скорости $\mathbf{V}$.

Действительно, столкновительные части изменения полных числа, энергии и импульса молекул в единице объема газа даются равными нулю интегралами

$$\int St f d\Gamma = 0, \quad \int \varepsilon St f d\Gamma = 0, \quad \int \mathbf{p} St f d\Gamma = 0$$

В этих равенствах легко убедиться, применив к интегралам преобразование (4,4) соответственно с $\varphi = 1, \varepsilon$ или $\mathbf{p}$ (первый интеграл обращается в нуль тождественно, а второй и третий в силу сохранения энергии и импульса при столкновениях).

Напишем теперь кинетическое уравнение

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} (v_\alpha f) = \text{St } f$$

и проинтегрируем его по $d\Gamma$, предварительно умножив на m, p_β или ε .

уравнения перехода к макросостояниям

Во всех трех случаях правая сторона уравнения обратится в нуль и мы получим следующие уравнения:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div } \rho \mathbf{V} &= 0 \\ \frac{\partial}{\partial t} \rho V_\alpha + \frac{\partial \Pi_{\alpha\beta}}{\partial x_\beta} &= 0 \\ \frac{\partial}{\partial t} N \bar{\varepsilon} + \text{div } \mathbf{q} &= 0\end{aligned}$$

Первое из них есть обычное гидродинамическое уравнение непрерывности, выражающее собой сохранение массы газа.

Второе уравнение выражает сохранение импульса.

Тензор $\Pi_{\alpha\beta}$ определен как

$$\Pi_{\alpha\beta} = \int m v_\alpha v_\beta f d\Gamma$$

и представляет собой тензор плотности потока импульса: его компонента $\Pi_{\alpha\beta}$ есть α -я компонента импульса, переносимого молекулами в 1 с через единичную площадку, перпендикулярную оси x_β .

Наконец, (5,7) есть уравнение сохранения энергии; вектор $\mathbf{q}$ определен как

$$\mathbf{q} = \int \varepsilon \mathbf{v} f d\Gamma$$

и представляет собой плотность потока энергии в газе.

Для приведения (5,6) Н(5,7)К Виду обычных гидродинамических уравнений надо, однако, еще выразить $\Pi_{\alpha\beta}$ и q через макроскопические величины.

Мы уже упоминали, что макроскопическое описание газа предполагает достаточную малость градиентов его макроскопических характеристик.

В таком случае в первом приближении можно считать, что в каждом отдельном участке газа успевает установиться тепловое равновесие, между тем как весь газ в целом не находится в равновесии.

Другими словами, в каждом элементе объема функция распределения f принимается локс совпадающей с равновесной функцией f_0 с теми плотностью, температурой и макроскопической скоростью, которые имеются в данном элементе.

Такое приближение означает пренебрежение всеми диссипативными про- что уравнения (5,6 – 7) сводятся при этом к уравнениям гидродинамики идеальной жидкости.

Убедимся в этом.

Равновесное распределение в участке газа, движущемся как целое со скоростью $\mathbf{V}$, отличается от равновесного распределения распределения в неподвижном газе лишь преобразованием Галилея. Перейдя в систему отсчета K' , движущуюся вместе с газом, мы получим обычное распределение Больцмана.

Скорости $\mathbf{v}'$ молекул в этой системе связаны с их скоростями в исходной системе K посредством $\mathbf{V} = \mathbf{v}' + \mathbf{V}$.

Пишем

$$\Pi_{\alpha\beta} = mN \langle v_\alpha v_\beta \rangle = mN \langle (V_\alpha + v'_\alpha) (V_\beta + v'_\beta) \rangle = mN (V_\alpha V_\beta + \langle v'_\alpha v'_\beta \rangle)$$

члены $V_\alpha v'_\beta$ и $V_\beta v'_\alpha$ обращаются в нуль при усреднении по направлению K' равновероятны.

По этой же причине

$$\langle v'_\alpha v'_\beta \rangle = \frac{1}{3} \langle v'^2 \rangle \delta_{\alpha\beta}$$

средний же квадрат тепловой скорости $\langle v'^2 \rangle = 3T/m$, где T - температура газа.

Наконец, заметив, что NT есть давление газа $\hat{P}$, получим

$$\Pi_{\alpha\beta} = \rho V_\alpha V_\beta + \delta_{\alpha\beta} P$$

т. е. известное выражение для тензора потока импульса в идеальной жидкости; уравнение (5,6) с этим тензором эквивалентно гидродинамическому уравнению Эйлера (см. VI, § 7).

Для преобразования интеграла (5,9) замечаем, что энергия молекулы ε в системе отсчета K связана с ее энергией ε' в системе K' посредством

$$\varepsilon = \varepsilon' + m \mathbf{V} \mathbf{v}' + \frac{1}{2} m V^2$$

Подставив это выражение и $\mathbf{v} = \mathbf{v}' + \mathbf{V}$ в $\mathbf{q} = N \overline{\varepsilon \mathbf{v}}$, получим

$$\mathbf{q} = N \mathbf{V} \left[\frac{m V^2}{2} + \frac{m}{3} \overline{v'^2} + \overline{\varepsilon'} \right] = \mathbf{V} \left(\frac{\rho V^2}{2} + P + N \overline{\varepsilon'} \right)$$

Но $N \overline{\varepsilon'}$ есть термодинамическая внутренняя энергия газа, отнесенная к единице объема; сумма же $N \overline{\varepsilon'} + P$ есть тепловая функция W того же количества газа.

Таким образом,

$$\mathbf{q} = \mathbf{V} \left(\frac{\rho V^2}{2} + W \right)$$

в согласии с известным выражением потока энергии в гидродинамике идеальной жидкости (см.

VI, § 6).

Наконец, остановимся на законе сохранения момента импульса в кинетическом уравнении.

Строгий закон сохранения должен иметь место лишь для полного момента газа, складывающегося из орбитального момента молекул в их поступательном движении и их собственных вращательных моментов M ; плотность полного момента дается суммой двух интегралов

$$\int [\mathbf{r} \mathbf{p}] f d\Gamma + \int M f d\Gamma$$

Но эти два члена имеют различный порядок величины.

Орбитальный момент относительного движения двух молекул, находящихся на среднем расстоянии $\bar{r}$ друг от друга, порядка величины $m \bar{v}$; собственный же момент молекулы $M \sim m \bar{v} d$, т. е. мал по сравнению с орбитальным моментом (поскольку всегда $d \ll \bar{r}$).

Естественно поэтому, что кинетическое уравнение Больцмана, отвечающее первому исчезающему приближению по малой величине d/r , не может учесть малых изменений орбитального момента, связанных с обменом между двумя частями полного момента (5,13).

С этим связано то обстоятельство, что уравнение Больцмана сохраняет полный орбитальный момент газа: из равенства $\int \mathbf{p} \cdot \mathbf{St} f d\Gamma = 0$, выражающего сохранение импульса, автоматически следует, что и

$$\int [\mathbf{r} \mathbf{p}] \cdot \mathbf{St} f d\Gamma = \left[\mathbf{r} \int \mathbf{p} \cdot \mathbf{St} f d\Gamma \right] = 0$$

Происхождение этого свойства очевидно: поскольку в уравнении Больцмана столкновения рассматриваются как происходящие в одной точке, то вместе с суммой импульсов сталкивающихся молекул сохраняется также и сумма их орбитальных моментов.

Чтобы получить уравнение, описывающее изменение орбитального момента, надо было бы учесть члены следующего порядка по d/r , связанные с тем, что в момент соударения молекулы находятся на конечном расстоянии друг от друга.

В то же время, однако, самый процесс обмена моментом между поступательными и вращательными степенями свободы

может быть описан в рамках уравнения Больцмана соотношением вида

$$\frac{d\mathfrak{M}}{dt} = \int \mathbf{M} \cdot \mathbf{St} f d\Gamma$$

где $\mathfrak{M}$ -плотность собственного момента вращения молекул.

Поскольку при столкновении молекул сумма их собственных моментов не обязана сохраняться,

интеграл в правой стороне (5,15) вообще говоря,

отличен от нуля и определяет скорость изменения величины $\mathfrak{M}$).

Если в газе каким-либо искусственным способом создана отличная от нуля плотность момента, то его дальнейшая релаксация будет определяться уравнением (5, 15).

примеры

5.5 Thermalization: Basics

5.5.1 General Understanding of Thermalization 1

Как конкретно нагретое тело сообщает холодному, что у неё такая то температура?

Типа может быть излучаются фотоны и они поглощаются? А может быть есть столкновения частиц и взаимодействия по закону Кулона, и вот, кинетическая энергия становится больше? Но тогда тоже по сути у нас ведь взаимодействие по закону Кулона, просто с виртуальными фотонами. Получается, частота фотона соответствует энергии частиц, а они сами распределены соответственно температуре нагретого тела?

А причем тут вообще распределение Гиббса???? Мб ответ в связи кин энергии и распр Гиббса?

И причем тут вообще операторы Линдблада? Казалось бы, ничего и не указывает на их существование в принципе.

Короче, вопрос в том, как конкретно это происходит? Можно формулами написать?
(?????????????)

Origin of Lindblad operators

(??? write it, I don't know. see another section of this note about it)

5.5.2 General Understanding of Thermalization 2

5.5.3 Overview of Models of Thermalization

(there are a lot of them, I'll write later)

6 Fundamental Laws of Kinetics for Non-physical Systems

(if one decides to apply this knowledge not to atoms, molecules, gases, one should understand fundamentals better, such that the limits of applications of general relation in kinetics are known.)

6.1 General Ideas about Applications of Kinetics

(discussion of what can be applied, and what can't. and how something can be applied?)

6.2 Exact Applications or Attempts of Application of Kinetics

(applications themselves are in the latter parts of this note)

6.2.1 Does Kinetics Work for Dynamics of Society?

(??? good fundamental question)

6.2.2 Does Kinetics Work for Dynamics of Animal Evolution?

(??? good fundamental question)

7 Diffusion Approximation and Models

Обсудим диффузионное приближение, решим многие модельные примеры и также приведем избранные его применения. Большая часть примеров будет находиться в соответствующих разделах про приложение кинетики к тем или иным явлениям.

7.1 Diffusion and Brownian Motion: Basics

7.1.1 Overview of Parameters of Brownian Motion

обзор свойств

В двумерной жидкости нет к-та самодиффузии:

$$D = \int_0^{\infty} \langle \mathbf{v}(t) \mathbf{v}(0) + \mathbf{v}(0) \mathbf{v}(t) \rangle dt.$$

$\int \frac{1}{t^{d/2}} dt$ расходится на верхнем пределе, при $d < 3$.

среднеквадратичное отклонение броуновской частицы

Найдем среднеквадратичное отклонение броуновской частицы, исходя из уравнения Ланжевена.

Уравнение Ланжевена описывает броуновское движение тяжелой частицы массы M в газе легких частиц с учетом случайной силы $\mathbf{F}^{(rd)}$, действующей на тяжелую частицу со стороны молекул газа:

$$M \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \mathbf{F}^{(rd)}(t) + \mathbf{F}(t)$$

где $\mathbf{F}(t)$ - регулярная внешняя сила, которая также может действовать на частицу. В частности, $\mathbf{F}^{(rd)}(t)$ ответственна за трение.

Усредним это уравнение (по времени или по ансамблю), так что

$$M \frac{d\langle \mathbf{v} \rangle}{dt} = \langle \mathbf{F}^{(c\pi)}(t) \rangle + \mathbf{F}(t)$$

Мы знаем, что если $\mathbf{F} = \text{const}$, то и $\langle \mathbf{v} \rangle = \text{const}$, причем $\langle \mathbf{v} \rangle = b\mathbf{F}$, где b - подвижность тяжелой частицы. Из гидродинамики известно, что в гидродинамическом режиме для плотных газов и жидкостей (?????)

$$b = 1/(6\pi\eta R),$$

где η - вязкость газа и R - радиус тяжелой частицы, а в свободно-молекулярном режиме для разреженных газов

$$b = 1/(m\nu_{\text{эфф}}),$$

где эффективная частота столкновений тяжелой частицы с легкими частицами

$$\nu_{\text{эфф}} = \langle v_a^2 \nu(v_a) \rangle / \langle v_a^2 \rangle,$$

и где частота столкновений $\nu(v_a) = n_{\text{газа}} v_a \sigma_t$, а v_a и m - скорость и масса легких частиц).

Но если $\langle \mathbf{v} \rangle = \text{const}$, то суммарная средняя сила должна занулиться:

$$\langle \mathbf{F}^{(cl)}(t) \rangle + \mathbf{F}(t) = 0,$$

то есть должно быть $\langle \mathbf{F}^{(cl)}(t) \rangle = -\mathbf{F}(t) = -\langle \mathbf{v} \rangle / b$. По этой причине запишем случайную силу в виде

$$\mathbf{F}^{(cl)}(t) = -\frac{\mathbf{v}(t)}{b} + \mathbf{f}^{(cl)}(t)$$

тогда по определению $\langle \mathbf{f}^{(cl)}(t) \rangle \equiv 0$, причем это должно быть верно и для общего случая $\mathbf{F}(t) \neq \text{const}$, поскольку $\mathbf{F}^{(cl)}(t)$ не должна зависеть от того, какова регулярная сила $\mathbf{F}(t)$, по крайней мере пока $\langle \mathbf{v} \rangle \ll v_T^{(a)}$ - тепловой скорости легких частиц.

Таким образом, мы получаем следующее уравнение движения тяжелой частицы в газе:

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\gamma \mathbf{v} + \frac{1}{M} \{ \mathbf{f}^{(cl)}(t) + \mathbf{F}(t) \},$$

где $\gamma = 1/(bM) = \frac{m}{M} \nu_{\text{эфф}}$ - коэффициент трения (для случая тяжелой частицы в разреженном газе).

Пусть $\tau_{\text{ст}}$ - характерное время самого столкновения, и пусть $\tau_{\text{ст}} \ll \ll 1/\nu_{\text{эфф}}$, где $1/\nu_{\text{эфф}}$ - характерное время между двумя соседними столкновениями. В таком случае естественно считать столкновения статистически независимыми. Тогда корреляция значений случайной силы $\mathbf{f}^{(cl)}(t)$ должна иметь место только на временах порядка $\tau_{\text{ст}}$.

Однако такие масштабы времен недоступны для нашего статистического описания движения тяжелой частицы, так что этот масштаб времен можно считать нулевым, и тогда естественно считать случайную силу δ -коррелированной, то есть считать, что коррелятор случайной силы имеет вид

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

где κ - коэффициент, который нам нужно будет ещё определить. Физически эта запись и означает, что корреляция случайной силы имеет место только во время самого столкновения, масштаб которого мы считаем бесконечно малым по отношению ко времени между двумя соседними столкновениями.

Будем далее считать, что сила $\mathbf{F}(t)$ носит осциллирующий характер, так что при усреднении по времени $\langle \mathbf{F}(t) \rangle = 0$, и обозначим полную суммарную силу, действующую на частицу, как $\mathbf{f}^{(\text{полн})}(t) = \mathbf{f}^{(\text{сл})}(t) + \mathbf{F}(t)$, так что

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\gamma \mathbf{v} + \frac{1}{M} \mathbf{f}^{(\text{полн})}(t).$$

Решение этого уравнения имеет очевидный вид

$$\mathbf{v}(t) = \mathbf{v}_0 e^{-\gamma(t-t_0)} + \frac{1}{M} e^{-\gamma t} \int_{t_0}^t e^{\gamma t'} \mathbf{f}^{(\text{полн})}(t') dt'$$

где $\mathbf{v}_0 = \mathbf{v}(t_0)$, причем видно, что при $(t - t_0) \rightarrow +\infty$ влияние начальной скорости $\mathbf{v}_0$ полностью исчезает, так что при временах $t - t_0 \gg 1/\gamma$ можно считать, что

$$\mathbf{v}(t) = \frac{1}{M} e^{-\gamma t} \int_{-\infty}^t e^{\gamma t'} \mathbf{f}^{(\text{полн})}(t') dt'.$$

Подставим скорость и силу в форме интеграла Фурье, $\mathbf{v}(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathbf{v}_\omega e^{-i\omega t} \frac{d\omega}{2\pi}$, $\mathbf{f}^{(\text{полн})}(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathbf{f}_\omega^{(\text{полн})} e^{-i\omega t} \frac{d\omega}{2\pi}$:

$$\mathbf{v}_\omega e^{-i\omega t} = \frac{e^{-\gamma t}}{M} \int_{-\infty}^t e^{\gamma t'} \mathbf{f}_\omega^{(\text{полн})} e^{-i\omega t'} dt' = \frac{e^{-\gamma t}}{M} \mathbf{f}_\omega^{(\text{полн})} \frac{e^{\gamma t - i\omega t}}{\gamma - i\omega} \equiv \frac{e^{-i\omega t}}{M(\gamma - i\omega)} \mathbf{f}_\omega^{(\text{полн})}$$

Мы здесь пренебрегаем начальным временем, записывая его в виде $-\infty$. На самом деле правильнее считать, что $t_0 = 0$, тогда получится то же самое, разве что нужно подразумевать, что все члены с t_0 очень малы, поэтому мы их отбрасываем.

Откуда

$$\mathbf{v}_\omega = \frac{\mathbf{f}_\omega^{(\text{полн})}}{M(\gamma - i\omega)},$$

и так как $r = \int v(t) dt$, то после интегрирования $\mathbf{r}(t) = \int d\omega \mathbf{r}_\omega e^{-i\omega t} = \int_{-\infty}^t d\omega \int_{-\infty}^t \mathbf{v}_\omega e^{-i\omega t} = \int \frac{\mathbf{v}_\omega}{-i\omega} \frac{d\omega}{2\pi}$. Когда $t_0 \rightarrow -\infty$ подставляем, у нас добавляется еще один член, который по смыслу - начальная координата, а так как мы из нуля начинаем двигаться, то она по итогу интеграла по ω обнуляется (???? именно по этому ведь?) Получаем:

$$\mathbf{r}_\omega = \frac{\mathbf{v}_\omega}{-i\omega} = -\frac{\mathbf{f}_\omega^{(\text{полн})}}{i\omega M(\gamma - i\omega)} \equiv \chi(\omega) \mathbf{f}_\omega^{(\text{полн})},$$

где

$$\chi(\omega) := -\frac{1}{i\omega M(\gamma - i\omega)} \equiv \frac{-1 + i\gamma/\omega}{M(\gamma^2 + \omega^2)}$$

Здесь мы ввели смещение тяжелой частицы согласно $\mathbf{v}(t) = \dot{\mathbf{r}}(t)$.

Для фурье-компонент имеется соотношение:

$$\mathbf{v}(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathbf{v}_\omega e^{-i\omega t} \frac{d\omega}{2\pi} = \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathbf{r}_\omega e^{-i\omega t} \frac{d\omega}{2\pi} = \int_{-\infty}^{+\infty} (-i\omega) \mathbf{r}_\omega e^{-i\omega t} \frac{d\omega}{2\pi},$$

тут учтено, что $\mathbf{v}_0 = 0$.

Если мы усредним соотношение $\mathbf{r}_\omega = \chi(\omega) \mathbf{f}_\omega^{(\text{полн})}$ (при наличии сторонней силы), то оно будет выражать связь между фурье-компонентой сторонней силы и фурье-компонентой средней скорости (или смещения) под действием этой силы, причем $\chi(\omega)$ играет роль динамического отклика (динамической восприимчивости) системы (тяжелой частицы на эту силу). С другой стороны, если нет сторонней силы, то возникающее движение частицы под действием случайной силы есть не что иное, как тепловые флуктуации координат частицы, и в этом случае $\chi(\omega)$ выражает связь между спектральной характеристикой флуктуаций координат (или скорости) и спектром случайной силы. Поскольку в обоих случаях фигурирует одна и та же величина $\chi(\omega)$, то это означает наличие тесной связи между линейным откликом системы на внешнюю силу и спектром тепловых флуктуаций.

Для выяснения этой связи рассмотрим какую-то одну случайную величину

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

Тогда

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

Для того, чтобы коррелятор в условиях однородности времени зависел бы только от разности времен $t - t'$, необходимо, чтобы в интеграле было бы $\omega' = -\omega$, и это может быть достигнуто только, лишь если

$$\langle x_\omega x_{\omega'} \rangle = 2\pi (x^2)_\omega \delta(\omega + \omega') \sim \delta(\omega + \omega').$$

Тогда

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

Это соотношение выражает собой теорему Винера-Хинчина (???? напишу в оптике, действительно ли все так просто?), причем для вещественной величины $x(t)$ естественно должно быть

$$(x^2)_\omega = (x^2)_{-\omega}.$$

Посмотрим частные случаи.

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

Если $(x^2)_\omega = \text{const} = A$, то $\langle x(t)x(t') \rangle = A \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega(t-t')} \frac{d\omega}{2\pi} = A\delta(t-t')$. Последнее

условие верно и в обратную сторону.

Случайная величина с такой δ -функциональной функцией корреляции и с такой постоянной спектральной плотностью $(x^2)_\omega$ определяет так называемый белый шум.

Обобщение этих формул на случай нескольких случайных величин очевидно.

Флуктуации скорости тяжелой частицы и действующей случайной силы

Опишем флуктуации скорости тяжелой частицы и случайной силы, действующей на броуновскую частицу, движение которой описывается уравнением Ланжевена.

Если мы рассматриваем движение только под действием случайной силы, то

$$(v_i v_k)_\omega = -i\omega \chi(\omega) \cdot i\omega \chi(-\omega) (f_i^{(\text{сл})} f_k^{(\text{сл})})_\omega = \omega^2 \chi(\omega) \chi^*(\omega) (f_i^{(\text{сл})} f_k^{(\text{сл})})_\omega \equiv \omega^2 |\chi(\omega)|^2 (f_i^{(\text{сл})} f_k^{(\text{сл})})_\omega$$

тогда

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

Учитывая, что для равновесного теплового движения тяжелой частицы (почему??)

$$\langle v_i(t) v_k(t) \rangle = (T/M) \delta_{ik},$$

и что для δ -коррелированной случайной силы должно быть

$$(f_i^{(\text{сл})} f_k^{(\text{сл})})_\omega = \kappa \delta_{ik}$$

получим, что

$$\begin{aligned} \frac{T}{M} \delta_{ik} &= \kappa \delta_{ik} \int_{-\infty}^{+\infty} \omega^2 |\chi(\omega)|^2 \frac{d\omega}{2\pi} \\ \frac{T}{M} &= \kappa \int_{-\infty}^{+\infty} \omega^2 \frac{1 + \gamma^2/\omega^2}{M^2 (\gamma^2 + \omega^2)^2} \frac{d\omega}{2\pi} = \frac{\kappa}{2\pi M^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{\gamma^2 + \omega^2} = \frac{\kappa}{2\pi M^2} \cdot \frac{\pi}{\gamma} = \frac{\kappa}{2\gamma M^2}. \end{aligned}$$

Поэтому должно выполняться соотношение

$$\kappa = 2\gamma MT.$$

Таким образом, видим временной коррелятор случайной силы:

$$\langle f_i^{(\text{сл})}(t) f_k^{(\text{сл})}(t') \rangle = 2\gamma MT \delta_{ik} \delta(t-t') = \frac{2T}{b} \delta_{ik} \delta(t-t') = 2T m \nu_{\text{эфф}} \delta_{ik} \delta(t-t').$$

Для спектральных плотностей флуктуаций скоростей и координат теперь можно написать, что

$$\begin{aligned} (v_i v_k)_\omega &= \omega^2 |\chi(\omega)|^2 \cdot 2\gamma MT \delta_{ik}, \\ (x_i x_k)_\omega &= |\chi(\omega)|^2 \cdot 2\gamma MT \delta_{ik}, \end{aligned}$$

причем

$$|\chi|^2 = \frac{1}{[M^2 \omega^2 (\gamma^2 + \omega^2)]}, \quad \text{Im } \chi = \frac{\gamma}{[M \omega (\gamma^2 + \omega^2)]},$$

так что

$$|\chi|^2 = \frac{\text{Im } \chi}{M \omega \gamma}.$$

Заметим, что выполняется соотношение:

$$(v_i v_k)_\omega = 2T\omega \operatorname{Im} \chi(\omega) \cdot \delta_{ik},$$

или что то же самое, $(x_i x_k)_\omega = \frac{2T}{\omega} \operatorname{Im} \chi(\omega) \cdot \delta_{ik}$. Эта формула составляет содержание флуктуационно-диссипативной теоремы (ФДТ) в применении к данному случаю. (???? а в общем случае я еще не понял, что это такое????)

Временной коррелятор скоростей и смещений

Временной же коррелятор скоростей броуновской частицы есть

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

причем

$$\int_{t'}^{+\infty} \langle v_i(t) v_k(t') \rangle dt = \delta_{ik} T / (M\gamma) = \delta_{ik} T b \equiv D \delta_{ik}$$

Теперь рассмотрим смещение частицы за время t , именно, $\Delta \mathbf{r}(t) = \mathbf{r}(t_0 + t) - \mathbf{r}(t_0)$, где t_0 - произвольно выбранный начальный момент времени.

Для квадрата смещения имеем, что

$$(\Delta \mathbf{r}(t))^2 = (\mathbf{r}(t_0 + t) - \mathbf{r}(t_0))^2 = \mathbf{r}^2(t_0 + t) + \mathbf{r}^2(t_0) - 2(\mathbf{r}(t_0 + t) \cdot \mathbf{r}(t_0)),$$

откуда (????? это не очень понял, но не особо думал про это. откуда вторая строчка????)

$$\begin{aligned} \langle (\Delta \mathbf{r}(t))^2 \rangle &= \langle \mathbf{r}^2(t_0 + t) \rangle + \langle \mathbf{r}^2(t_0) \rangle - 2 \langle (\mathbf{r}(t_0 + t) \cdot \mathbf{r}(t_0)) \rangle = \\ &= 2 \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} (1 - e^{-i\omega t}) (\mathbf{r}^2)_\omega = \\ &= 2 \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} (1 - e^{-i\omega t}) \frac{6T}{\omega} \operatorname{Im} \chi(\omega) = \\ &= \frac{6T\gamma}{M\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega (1 - e^{-i\omega t})}{\omega^2 (\omega + i\gamma)(\omega - i\gamma)} = \\ &= \frac{6T\gamma}{M\pi} \cdot (2\pi i) \cdot (-1) \left\{ \frac{1 - e^{-\gamma t}}{(-\gamma^2)(-2i\gamma)} + \frac{1}{2} \cdot \frac{it}{\gamma^2} \right\} = \\ &= \frac{6Tt}{M\gamma} \left(1 - \frac{1 - e^{-\gamma t}}{\gamma t} \right). \end{aligned}$$

При вычислении этого интеграла мы замкнули контур интегрирования в нижней полуплоскости и учли полный вычет при $\omega = -i\gamma$ и полувычет при $\omega = 0$.

Вспоминая, что $\gamma = 1/(bM)$, находим, что $1/(M\gamma) = b$.

И поскольку $bT = D$, окончательно получаем, что

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

В случае $\gamma t \ll 1$ получаем, что $\langle (\Delta \mathbf{r}(t))^2 \rangle \approx 6Dt \cdot (\gamma t)/2 = 6bT/(bM) \cdot t^2/2 = (3T/M)t^2 = \langle v^2 \rangle t^2$.

Это есть случай свободного движения частицы с тепловой средней скоростью.

В обратном случае $\gamma t \gg 1$ очевидно, что $\langle (\Delta \mathbf{r}(t))^2 \rangle \approx 6Dt$.

Очевидно, что $\langle \Delta x_\alpha(t) \Delta x_\beta(t) \rangle \approx 2Dt \delta_{\alpha\beta}$.

Это есть случай диффузионного движения.

временной коррелятор скоростей в гидродинамике

Найдем временной коррелятор скоростей броуновской частицы.

Покажем, что он имеет именно универсальную степенную асимптотику на больших временах: $\propto 1/t^{d/2}$, где d - это размерность пространства.

Рассмотрим флуктуации скорости течения жидкости в гидродинамике, и для этого выпишем первые два гидродинамических уравнения - уравнение непрерывности и уравнение Навье-Стокса (без внешней силы):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(\rho \mathbf{u}) = 0,$$

$$\rho \frac{d\mathbf{u}}{dt} \equiv \rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\nabla P + \eta \Delta \mathbf{u} + \left(\zeta + \frac{\eta}{3} \right) \text{grad div } \mathbf{u}.$$

Нас будут интересовать здесь небольшие отклонения от равновесия (при $\mathbf{u}_{\text{равн.}} \equiv 0$), и поэтому линеаризуем эти уравнения, записав их в виде

$$\frac{\partial \delta \rho}{\partial t} + \rho \text{div } \mathbf{u} = 0, \quad \rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = -\nabla P + \eta \Delta \mathbf{u} + \left(\zeta + \frac{\eta}{3} \right) \text{grad div } \mathbf{u}$$

Разделим скорость на продольную и поперечную части, согласно определению $\mathbf{u} = \mathbf{u}^{(l)} + \mathbf{u}^{(t)}$, так что $\text{div } \mathbf{u}^{(t)} = 0$, $\text{rot } \mathbf{u}^{(l)} = 0$.

Тогда получаем, что $\frac{\partial \delta \rho}{\partial t} + \rho \text{div } \mathbf{u}^{(l)} = 0$,

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}^{(l)}}{\partial t} = -\nabla P + \eta \Delta \mathbf{u}^{(l)} + \left(\zeta + \frac{\eta}{3} \right) \text{grad div } \mathbf{u}^{(l)},$$

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}^{(t)}}{\partial t} = \eta \Delta \mathbf{u}^{(t)}.$$

Уравнение для поперечных компонент оказалось независимым от остальных и совпадающим с уравнением диффузии.

Только его мы и рассмотрим, обозначив $\nu = \eta/\rho$.

Для корреляционной функции флуктуаций поперечной скорости имеем уравнение

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle u_i^{(t)}(\mathbf{r}, t) u_k^{(t)}(0, 0) \rangle - \nu \Delta \langle u_i^{(t)}(\mathbf{r}, t) u_k^{(t)}(0, 0) \rangle = 0$$

Умножив его на $e^{i\omega t}$ и проинтегрировав по t от 0 до $+\infty$ (одностороннее преобразование Фурье!) получим уравнение

$$-i\omega \langle u_i^{(t)}(\mathbf{r}) u_k^{(t)}(0) \rangle_\omega - \nu \Delta \langle u_i^{(t)}(\mathbf{r}) u_k^{(t)}(0) \rangle_\omega = \langle u_i^{(t)}(\mathbf{r}) u_k^{(t)}(0) \rangle$$

где справа стоит одновременная корреляционная функция.

После преобразования Фурье по координатам очевидно получим, что

$$\langle u_i^{(t)} u_k^{(t)} \rangle_{\omega \mathbf{k}} = \frac{\langle u_i^{(t)} u_k^{(t)} \rangle_{\mathbf{k}}}{\nu k^2 - i\omega}$$

$$\langle u_i^{(t)} u_k^{(t)} \rangle_{\omega \mathbf{k}} = \langle u_i^{(t)} u_k^{(t)} \rangle_{\omega \mathbf{k}} + \langle u_i^{(t)} u_k^{(t)} \rangle_{-\omega \mathbf{k}} = \frac{2\nu k^2 \langle u_i^{(t)} u_k^{(t)} \rangle_{\mathbf{k}}}{\nu^2 k^4 + \omega^2}.$$

Поскольку $\langle u_i(\mathbf{r}) u_k(0) \rangle = \delta_{ik} \frac{TV}{mN} \delta(\mathbf{r}) \equiv \frac{T}{\rho} \delta_{ik} \delta(\mathbf{r})$, то её фурье-образ $\langle u_i u_k \rangle_{\mathbf{k}} = \frac{T}{\rho} \delta_{ik}$ и, соответственно,

$$\langle u_i^{(t)} u_k^{(t)} \rangle_{\mathbf{k}} = \frac{T}{\rho} (\delta_{ik} - k_i k_k / k^2).$$

Окончательно получим, что (при $t > 0$)

$$\begin{aligned} \langle u_i^{(t)} u_k^{(t)} \rangle_{\omega \mathbf{k}} &= \frac{2T}{\rho} \left(\delta_{ik} - \frac{k_i k_k}{k^2} \right) \frac{\nu k^2}{\nu^2 k^4 + \omega^2} \\ \langle u_i^{(t)}(\mathbf{r}, t) u_k^{(t)}(0, 0) \rangle &= \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{2T}{\rho} \left(\delta_{ik} - \frac{k_i k_k}{k^2} \right) \frac{\nu k^2 e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - i\omega t}}{\nu^2 k^4 + \omega^2} = \\ &= \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{T}{\rho} \left(\delta_{ik} - \frac{k_i k_k}{k^2} \right) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \nu k^2 t} \end{aligned}$$

Получаем итоговое выражение с помощью обратного преобразования Фурье

$$\begin{aligned} \langle u_i^{(t)}(0, t) u_k^{(t)}(0, 0) \rangle &= \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{T}{\rho} \left(\delta_{ik} - \frac{k_i k_k}{k^2} \right) e^{-\nu k^2 t} = \\ &= \frac{T}{\rho} \delta_{ik} \left(1 - \frac{1}{d} \right) \frac{(\sqrt{\pi})^d}{(2\pi)^d (\sqrt{\nu t})^d} = \\ &= \frac{(d-1)T}{d\rho} \frac{\delta_{ik}}{(4\pi\nu t)^{d/2}} \sim \frac{1}{t^{d/2}}. \end{aligned}$$

Здесь d - размерность пространства (важны лишь значения $d = 3$ и $d = 2$).

Result: В двумерном случае коррелятор ведет себя как $\sim 1/t$, и интеграл от него логарифмически расходится на больших временах.

Уравнение Фоккера-Планка для броуновского движения

Рассмотрим в качестве фоккер-планковской переменной координату частицы $\mathbf{r}$, которая мало меняется в процессе одного столкновения с легким газом, а в качестве функции распределения по координате возьмем плотность частиц $n(\mathbf{r}, t)$.

Тогда, согласно общему принципу написания уравнения Фоккера-Планка, его вид в этом конкретном случае должен быть таким:

$$\frac{\partial n(t, \mathbf{r})}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left\{ \tilde{A}_\alpha n + \frac{\partial (B_{\alpha\beta} n)}{\partial x_\beta} \right\},$$

где

$$B_{\alpha\beta} = \frac{\sum x_\alpha x_\beta}{2\delta t} = D\delta_{\alpha\beta},$$

$$j_\alpha^{(0)} = -\tilde{A}_\alpha n^{(0)} - \frac{\partial (B_{\alpha\beta} n^{(0)})}{\partial x_\beta} = \left(-\tilde{A}_\alpha - \frac{\partial B_{\alpha\beta}}{\partial x_\beta} \right) n^{(0)} - B_{\alpha\beta} \frac{\partial n^{(0)}}{\partial x_\beta} = 0,$$

если $n^{(0)}(\mathbf{r}, t) = n_0 e^{-U(\mathbf{r})/T}$ равновесное распределение плотности частиц в потенциальном поле.

Поэтому

$$\tilde{A}_\alpha = (B_{\alpha\beta}/T) \nabla_\beta U(\mathbf{r}) = (D/T) \nabla_\alpha U(\mathbf{r}) = b \nabla_\alpha U(\mathbf{r}),$$

и мы опять получаем уравнение Смолуховского

$$\frac{\partial n}{\partial t} - \operatorname{div}(bn \nabla U) - D \Delta n = 0,$$

которое играет в этом случае роль уравнения Фоккера-Планка.

коэффициент самодиффузии интегрально выражается через временной коррелятор скорости частиц

Показать, что в жидкости коэффициент самодиффузии в общем случае интегрально выражается через временной коррелятор скорости частиц.

коэффициента самодиффузии в двумерной однокомпонентной жидкости нет

Можно ли определить коэффициент самодиффузии в двумерной однокомпонентной жидкости?

нет, см семинары шелкачева.

7.1.2 Fokker–Planck Equation (!!!)

Суть

(??? копия того, что также в 1 части)

Уравнение Фоккера-Планка имеет вид:

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

где

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

обзор применений уравнения Фоккера-Планка

введение по Ландау

Значительную категорию кинетических явлений составляют процессы, в которых средние изменения величин (от которых зависит функция распределения) в каждом элементарном акте малы по сравнению с их характерными значениями.

Времена релаксации таких процессов велики по сравнению с временами элементарных актов, составляющих их микроскопический механизм; в этом смысле такие процессы можно назвать медленными. Типичный пример такого рода дает задача о релаксации по импульсам небольшой примеси тяжелого газа в легком (который сам по себе предполагается находящимся в равновесии).

Ввиду малой концентрации тяжелых частиц, их столкновениями друг с другом можно пренебречь и рассматривать их столкновения лишь с частицами основного (легкого) газа. Но при столкновении тяжелой частицы с легкими ее импульс испытывает лишь относительно малое изменение. Будем для определенности говорить именно об этом примере и выведем кинетическое уравнение, которому удовлетворяет в таком случае функция распределения частиц примеси по импульсам, $f(t, \mathbf{p})$.

вывод уравнения Фоккера-Планка из уравнения Больцмана (???)

Обозначим через $w(\mathbf{p}, \mathbf{q})d^3q$ отнесенную к единице времени вероятность изменения импульса $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} - \mathbf{q}$ тяжелой частицы при элементарном акте - ее столкновении с легкой частицей.

Тогда кинетическое уравнение для функции $f(t, \mathbf{p})$ запишется в виде

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

где справа стоит разность между числом частиц,

поступающих (в 1 с) в заданный элемент импульс пространства d^3p и покидающих его за то же время.

Согласно сделанным предположениям, функция $w(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ быстро убывает с увеличением $\mathbf{q}$,

так что основную роль в интеграле играют значения $\mathbf{q}$, малые по сравнению со средним импульсом частиц.

Это обстоятельство позволяет произвести в подынтегральном выражении разложение

$$w(\mathbf{p} + \mathbf{q}, \mathbf{q})f(t, \mathbf{p} + \mathbf{q}) \approx w(\mathbf{p}, \mathbf{q})f(t, \mathbf{p}) + \mathbf{q} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} w(\mathbf{p}, \mathbf{q})f(t, \mathbf{p}) + \frac{1}{2} q_\alpha q_\beta \frac{\partial^2}{\partial p_\alpha \partial p_\beta} w(\mathbf{p}, \mathbf{q})f(t, \mathbf{p})$$

В результате кинетическое уравнение примет вид

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

где (кст, почему такие обозначения, что тильда?)

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

Таким образом, кинетическое уравнение из интегро-дифференциального становится дифференциальным.

Величины $\tilde{A}_\alpha$ и $B_{\alpha\beta}$ можно записать в символическом виде, более ясно выражающем их смысл:

$$\tilde{A}_\alpha = \frac{\sum q_\alpha}{\delta t}, \quad B_{\alpha\beta} = \frac{\sum q_\alpha q_\beta}{2\delta t}$$

где знак $\sum$ означает суммирование по (большому) числу столкновений, происходящих за время δt .

(???????) Выражение в правой части (21.2) имеет вид дивергенции в импульсном пространстве,

$$-\partial s_\alpha / \partial p_\alpha,$$

от вектора

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

Другими словами, (21.2) имеет, как и следовало,

вид уравнения непрерывности в импульсном пространстве; тем самым автоматически соблюдается сохранение числа частиц при процессе.

Вектор же s является плотностью потока частиц в импульсном пространстве.

Согласно формулам (21.4) коэффициенты в кинетическом уравнении выражаются через средние характеристики столкновений, и в этом смысле их вычисление представляет собой механическую задачу.

Фактически, однако, нет необходимости в отдельном вычислении коэффициентов A_α и $B_{\alpha\beta}$; они могут быть выражены друг через друга из условия обращения потока в нуль в статистическом равновесии.

В данном случае равновесная функция распределения есть

$$f = \text{const} \cdot \exp\left(-\frac{\mathbf{p}^2}{2MT}\right)$$

где M - масса частиц тяжелого газа, а T - температура основного (легкого) газа.

Подстановка этого выражения в уравнение $s = 0$ дает:

$$MTA_\alpha = B_{\alpha\beta}p_\beta$$

Таким образом, кинетическое уравнение принимает вид

$$\frac{\partial f(t, \mathbf{p})}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial p_\alpha} \left[B_{\alpha\beta} \left(\frac{p_\beta}{MT} f + \frac{\partial f}{\partial p_\beta} \right) \right].$$

Отметим, что коэффициенты в двух первых членах разложения интеграла столкновений оказываются одинакового порядка величины; это связано с тем, что усреднение первых степеней знакопеременных величин q_α в (21.4) связано с бобльшим погашением, чем при усреднении квадратичных выражений.

Дальнейшие же члены разложения будут уже все малы по сравнению с двумя первыми.

Единственный вектор, от которого могут зависеть коэффициенты $B_{\alpha\beta}$, - импульс тяжелых частиц $\mathbf{p}$.

Но если скорости этих частиц, $\mathbf{p}/M$, в среднем малы по сравнению со скоростями легких частиц, то при столкновениях их можно считать неподвижными; в этом приближении величины $B_{\alpha\beta}$ не будут зависеть от $\mathbf{p}$.

Другими словами, тензор $B_{\alpha\beta}$ сведется к постоянному скаляру B :

$$B_{\alpha\beta} = B\delta_{\alpha\beta}, \quad B = \frac{1}{6} \int q^2 w(0, \mathbf{q}) d^3q$$

а уравнение (21.7) примет вид

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

Обратим внимание на формальное сходство уравнения (21.7) с уравнением диффузии во внешнем поле, в особенности наглядное в записи (21.9).

Напомним, что уравнение диффузии имеет вид

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \text{div}(D\nabla c - bc\mathbf{F})$$

где c - концентрация примеси, $\mathbf{F}$ - сила, действующая на частицу примеси со стороны внешнего поля, D - коэффициент диффузии, b - подвижность.

Описываемые уравнением (21.9) процессы можно назвать диффузией в импульсном пространстве, причем B играет роль коэффициента диффузии; связь между коэффициентами при обоих членах в правой части (21.9) аналогична известному соотношению Эйнштейна между коэффициентом диффузии и подвижностью: $D = bT$.

Кинетическое уравнение вида (21.2), в котором коэффициенты определены через усредненные характеристики элементарных актов, согласно (21.4), называют уравнением Фоккера-Планка (A.D).

Fokker, 1914; M.

Planck, 1917).

Специфические свойства

переменных p_α как импульсов частиц в изложенном выводе не играли роли.

Ясно поэтому, что уравнение такого же типа будет справедливо и для функций распределения f по другим переменным, если только выполнены условия, лежащие в основе вывода: относительная малость изменения величин в элементарных актах и линейность по f интегрального оператора, выражающего изменение функции благодаря этим актам.

Упомянем, для примера, еще случай, когда легкий газ составляет небольшую примесь к тяжелому газу.

При столкновениях с тяжелыми частицами импульс легкой частицы сильно меняется по направлению, но лишь незначительно по абсолютной величине.

Хотя для функции распределения частиц примесного газа По вектору импульса p уравнение (21.7) в этих условиях будет уже неприменимо, аналогичное уравнение можно установить для распределения по одной лишь абсолютной величине p .

Если функция распределения по-прежнему отнесена к элементу импульсного пространства d^3p (так что число частиц с величиной p в интервале dp есть $f(t, p) \cdot 4\pi p^2 dp$), то уравнение Фоккера-Планка будет иметь место для функции $4\pi p^2 f$, отнесенной к элементу dp :

$$\frac{\partial f p^2}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial p} \left\{ f p^2 A + B \frac{\partial}{\partial p} f p^2 \right\}$$

или

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{1}{p^2} \frac{\partial}{\partial p} p^2 \left\{ f A + \frac{B}{p^2} \frac{\partial}{\partial p} f p^2 \right\}$$

Где

$$B = \frac{1}{2} \frac{\sum (\delta p)^2}{\delta t}$$

переменных p_α как импульсов частиц в изложенном выводе не играли роли.

Ясно поэтому,

что уравнение такого же типа будет справедливо и для функций распределения f по другим переменным,

если только выполнены условия,

лежащие в основе вывода: относительная малость изменения величин в элементарных актах и линейность по f интегрального оператора,

выражающего изменение функции благодаря этим актам.

Упомянем,

для примера,

еще случай,

когда легкий газ составляет небольшую примесь к тяжелому газу.

При столкновениях с тяжелыми частицами импульс легкой частицы сильно меняется по направлению,

но лишь незначительно по абсолютной величине.

Хотя для функции распределения частиц примесного газа По вектору импульса p уравнение (21.7) в этих условиях будет уже неприменимо,

аналогичное уравнение можно установить для распределения по одной лишь абсолютной величине p .

Если функция распределения по-прежнему отнесена к элементу импульсного пространства d^3p (так что число частиц с величиной p в интервале dp есть $f(t, p) \cdot 4\pi p^2 dp$),

то уравнение Фоккера-Планка будет иметь место для функции $4\pi p^2 f$, отнесенной к элементу dp :

$$\frac{\partial f p^2}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial p} \left\{ f p^2 A + B \frac{\partial}{\partial p} f p^2 \right\}$$

или

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{1}{p^2} \frac{\partial}{\partial p} p^2 \left\{ f A + \frac{B}{p^2} \frac{\partial}{\partial p} f p^2 \right\}$$

где

$$B = \frac{1}{2} \frac{\sum (\delta p)^2}{\delta t}$$

Выражение в фигурных скобках представляет собой радиальный поток s в импульсном пространстве.

Он должен обращаться в нуль равновесным распределением

$$f = \text{const} \cdot \exp \left(-\frac{p^2}{2mT} \right)$$

(где m - масса легкой частицы,
а T - температура основного,
тяжелого газа).

Это условие связывает величины A и B ,

и в результате кинетическое уравнение (21.10) принимает вид

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{1}{p^2} \frac{\partial p^2 s}{\partial p}, \quad s = -B \left(\frac{p}{mT} f + \frac{\partial f}{\partial p} \right)$$

Вывод уравнения Фоккера-Планка по Белану из каких-то матем преобразований (????)

Плотность распределения координаты частицы равна

$$n(\vec{r}; t) \equiv \langle \delta(\vec{r} - \vec{r}(t)) \rangle$$

где $\vec{r}(t)$ - решение уравнения Ланжевена (17) для заданной реализации белого шума $\vec{\xi}(t)$. Рассмотрим приращение

$$\begin{aligned} n(\vec{r}; t + \Delta t) - n(\vec{r}; t) &= \langle \delta(\vec{r} - \vec{r}(t + \Delta t)) \rangle - \langle \delta(\vec{r} - \vec{r}(t)) \rangle = \\ &= \langle \delta(\vec{r} - \vec{r}(t) - \Delta \vec{r}(t)) \rangle - \langle \delta(\vec{r} - \vec{r}(t)) \rangle = \\ &= \langle \Delta r_i(t) \partial_{r_i} \delta(\vec{r} - \vec{r}(t)) \rangle + \frac{1}{2} \langle \Delta r_i(t) \Delta r_j(t) \partial_{r_i} \partial_{r_j} \delta(\vec{r} - \vec{r}(t)) \rangle + \dots \\ &= \partial_{r_i} \langle \Delta r_i(t) \delta(\vec{r} - \vec{r}(t)) \rangle + \frac{1}{2} \partial_{r_i} \partial_{r_j} \langle \Delta r_i(t) \Delta r_j(t) \delta(\vec{r} - \vec{r}(t)) \rangle + \dots \end{aligned}$$

где $\Delta \vec{r}(t) \equiv \vec{r}(t + \Delta t) - \vec{r}(t) = \mu \vec{f}(\vec{r}(t), t) \Delta t + \int_t^{t+\Delta t} d\tau \vec{\xi}(\tau) + o(\Delta t)$. Рассмотрим средние значения вида $\langle \Delta r_{i_1}(t) \Delta r_{i_2}(t) \dots \Delta r_{i_k}(t) \delta(\vec{r} - \vec{r}(t)) \rangle$, стоящие в правой части Ур. (49).

$$\begin{aligned}
\langle \Delta r_i(t) \delta(\vec{r} - \vec{r}(t)) \rangle &= \left\langle \left(\mu f_i(\vec{r}(t), t) \Delta t + \int_t^{t+\Delta t} d\tau \xi_i(\tau) \right) \delta(\vec{r} - \vec{r}(t)) \right\rangle + o(\Delta t) = (50) \\
&= \mu \Delta t \langle f_i(\vec{r}(t), t) \delta(\vec{r} - \vec{r}(t)) \rangle + \left\langle \int_t^{t+\Delta t} d\tau \xi_i(\tau) \delta(\vec{r} - \vec{r}(t)) \right\rangle + o(\Delta t) = \\
&= \mu \Delta t \langle f_i(\vec{r}, t) \delta(\vec{r} - \vec{r}(t)) \rangle + \left\langle \int_t^{t+\Delta t} d\tau \xi_i(\tau) \right\rangle \langle \delta(\vec{r} - \vec{r}(t)) \rangle + o(\Delta t) = \\
&= \mu \Delta t f_i(\vec{r}, t) \langle \delta(\vec{r} - \vec{r}(t)) \rangle + o(\Delta t) = \mu \Delta t f_i(\vec{r}, t) n(\vec{r}; t) + o(\Delta t) \\
\langle \Delta r_i(t) \Delta r_j(t) \delta(\vec{r} - \vec{r}(t)) \rangle &= \\
&= \left\langle \left(\mu f_i(\vec{r}(t), t) \Delta t + \int_t^{t+\Delta t} d\tau \xi_i(\tau) \right) \left(\mu f_j(\vec{r}(t), t) \Delta t + \int_t^{t+\Delta t} d\tau \xi_j(\tau) \right) \delta(\vec{r} - \vec{r}(t)) \right\rangle + o(\Delta t) \\
&= \left\langle \delta(\vec{r} - \vec{r}(t)) \int_t^{t+\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} d\tau d\tau' \xi_i(\tau) \xi_j(\tau') \right\rangle + \mu \Delta t \left\langle f_i(\vec{r}(t), t) \delta(\vec{r} - \vec{r}(t)) \int_t^{t+\Delta t} d\tau \xi_j(\tau) \right\rangle + \\
&+ \mu \Delta t \left\langle f_j(\vec{r}(t), t) \delta(\vec{r} - \vec{r}(t)) \int_t^{t+\Delta t} d\tau \xi_i(\tau) \right\rangle + o(\Delta t) = \\
&= \langle \delta(\vec{r} - \vec{r}(t)) \rangle \int_t^{t+\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} d\tau d\tau' \langle \xi_i(\tau) \xi_j(\tau') \rangle + \mu \Delta t \langle f_i(\vec{r}(t), t) \delta(\vec{r} - \vec{r}(t)) \rangle \int_t^{t+\Delta t} d\tau \langle \xi_j(\tau) \rangle + \\
&+ \mu \Delta t \langle f_j(\vec{r}(t), t) \delta(\vec{r} - \vec{r}(t)) \rangle \int_t^{t+\Delta t} d\tau \langle \xi_i(\tau) \rangle + o(\Delta t) = \\
&= 2D \delta_{ij} \langle \delta(\vec{r} - \vec{r}(t)) \rangle \int_t^{t+\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} d\tau d\tau' \delta(\tau' - \tau) + o(\Delta t) = 2D \delta_{ij} n(\vec{r}; t) \Delta t + o(\Delta t).
\end{aligned}$$

Средние значения при пространственных производных более высокого порядка в (49) оказываются нелинейны по Δt . Поделив Ур. (49) на $\Delta t \rightarrow +0$, с учетом (53) и (60) приходим к уравнению Фоккера-Планка (39).

примеры частных случаев уравнения Фоккера-Планка

(пока что выписки, позже создам их наборчик как примеров, также отсылки тут)

Тогда уравнение (5.45) приобретает вид

$$\dot{\theta}_i = \omega_i - Kr \sin \theta_i + \xi_i$$

где $\omega_i = \Omega_i - \Omega_0$ Введем функцию распределения осцилляторов по фазе и расстройке частоты

$$\rho(\theta, \omega, t) = \langle \delta(\theta - \theta_\omega(t)) \rangle_\xi$$

где $\theta_\omega(t)$ - решение уравнения (5.46) для осциллятора с собственной частотой ω при конкретной реализации случайного процесса ξ .

Эволюция данной функции описывается уравнением Фоккера-Планка

$$\partial_t \rho = -\partial_\theta[(\omega - Kr \sin \theta)\rho] + D\partial_\theta^2 \rho$$

Стационарное решение этого уравнения, удовлетворяющее периодическому граничному условию $\rho(\theta, \omega) = \rho(\theta + 2\pi, \omega)$, имеет вид

$$\rho(\theta, \omega) = \rho(0, \omega) \exp\left(\frac{-Kr + \omega\theta + Kr \cos \theta}{D}\right) \left(1 + \frac{(\exp(-\frac{2\pi\omega}{D}) - 1) \int_0^\theta \exp\left(\frac{-\omega\varphi - Kr \cos \varphi}{D}\right) d\varphi}{\int_0^{2\pi} \exp\left(\frac{-\omega\varphi - Kr \cos \varphi}{D}\right) d\varphi}\right)$$

где $\rho(0, \omega)$ определяется условием нормировки

$$\int_0^{2\pi} \rho(\theta, \omega) d\theta = 1$$

соответствие между уравнением Ланжевена и Фоккера-Планка

7.1.3 Kinetic Equation for a Weakly Inhomogeneous Gas

Теория

Для того чтобы включить в рассмотрение диссипативные процессы (теплопроводность и вязкость) в слабо неоднородном газе, надо обратиться к следующему (после рассмотренного в предыдущем параграфе) приближению.

Учтем теперь небольшое отличие f от равновесной f_0 , т. е. напишем f в виде

$$f = f_0 + \delta f, \quad \delta f = -\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \chi(\Gamma) = \frac{1}{T} f_0 \chi$$

где δf - малая поправка ($\delta f \ll f_0$).

Последнюю целесообразно представлять в написанном здесь виде, вынеся из нее множитель $-\partial f_0/\partial \varepsilon$; для распределения Больцмана эта производная отличается лишь множителем $1/T$ от самой функции f_0 .

Поправка δf должна в принципе определяться путем решения линеаризованного по отношению к ней кинетического уравнения.

Помимо самого кинетического уравнения, функция χ должна удовлетворять еще и определенным дополнительным условиям, отвечающая заданным (в рассматриваемом элементе объема) плотностям числа частиц, энергии и импульса газа, т. е. заданным значениям интегралов

$$\int f_0 d\Gamma, \quad \int \varepsilon f_0 d\Gamma, \quad \int \mathbf{p} f_0 d\Gamma$$

Неравновесная функция распределения (6,1) должна приводить к тем же значениям этих величин, т. е. интегралы с f и f_0 должны быть одинаковыми.

Это значит, другими словами, что функция χ должна удовлетворять условиям

$$\int f_0 \chi d\Gamma = 0, \quad \int f_0 \chi \varepsilon d\Gamma = 0, \quad \int f_0 \chi \mathbf{p} d\Gamma = 0$$

Подчеркнем, что само понятие температуры в неравновесном газе становится определенным лишь в результате приписывания интегралам (6,2) определенных значений.

Это понятие имеет безусловный характер лишь в полностью равновесном состоянии газа в целом; для определения же температуры в неравновесном газе требуется дополнительное условие, каковым и служит задание указанных значений.

Интеграл столкновений после подстановки вше

Преобразуем, прежде всего, интеграл столкновений в кинетическом уравнении (3,8).

При подстановке в него функций в виде (6,1) члены, не содержащие малой поправки χ , взаимно сокращаются, поскольку равновесная функция распределения обращает интеграл столкновений в нуль.

Члены первого порядка дают

$$\text{St}f = \frac{f_0}{T}I(\chi)$$

где $I(\chi)$ обозначает линейный интегральный оператор

$$I(\chi) = \int w' f_{01} (\chi' + \chi'_1 - \chi - \chi_1) d\Gamma_1 d\Gamma' d\Gamma'_1$$

Здесь использовано равенство $f_0 f_{01} = f'_0 f'_{01}$; множитель f_0 может быть вынесен из-под знака интеграла, поскольку по $d\Gamma$ не производится интегрирования.

Обратим внимание на то, что интеграл (6,5) тождественно обращается в нуль для функций

$$\chi = \text{const}, \quad \chi = \text{const} \cdot \varepsilon, \quad \chi = \mathbf{p}\delta\mathbf{V}$$

(где $\delta\mathbf{V}$ -постоянный вектор); обращение в нуль для второй и третьей из этих функций связано с сохранением энергии и импульса в каждом столкновении.

Будучи независимыми от времени и координат, функции (6,6) удовлетворяют, следовательно, и всему кинетическому уравнению.

Эти решения имеют простое происхождение.

Кинетическому уравнению тождественно удовлетворяет равновесная функция распределения с любыми (постоянными) плотностью частиц и температурой.

Поэтому ему автоматически удовлетворяет и малая поправка

$$\delta f = \frac{\partial f_0}{\partial N} \delta N = f_0 \frac{\delta N}{N}$$

возникающая при изменении плотности на δN ; отсюда возникает первое из решений (6,6).

Аналогичным образом удовлетворяет уравнению и добавка

$$\delta f = \frac{\partial f_0}{\partial T} \delta T$$

возникающая в результате изменения T на малую постоянную величину δT . Производная же $\partial f_0 / \partial T$ складывается из члена вида $\text{const} \cdot f_0$ (происходящего от дифференцирования нормировочного множителя в f_0) и из члена, пропорционального εf_0 отсюда и возникает второе из решений (6,6).

Третье же из этих решений возникает как выражение галилеевского принципа относительности: равновесная функция распределения должна удовлетворять кинетическому уравнению также и после перехода к любой другой инерциальной системе отсчета.

Переход в другую систему

При переходе к системе, движущейся относительно первоначальной с малой постоянной скоростью $\delta\mathbf{V}$, скорости молекул $\mathbf{v}$ заменяются на $\mathbf{v} + \delta\mathbf{V}$ так что функция распределения получает приращение

$$\delta f = \frac{\partial f_0}{\partial v} \delta\mathbf{V} = -\frac{f_0}{T} \mathbf{p}\delta\mathbf{V}$$

чему и отвечает третье из решений (6,6).

(??) «Паразитные» решения (6,6) исключаются наложением трех условий (6,3)

Преобразование левой стороны кинетического уравнения произведем сразу в общем виде, охватывающем как задачу о теплопроводности, так и задачу о вязкости.

Другими словами, допускаем существование градиентов всех макроскопических характеристик газа, в том числе его макроскопической скорости V .

Функция распределения в однородном газе (???)

Равновесная функция распределения V неподвижном ($V = 0$) газе есть распределение Больцмана, которое напомним в виде

$$f_0 = \exp\left(\frac{\mu - \varepsilon(\mathbf{F})}{T}\right)$$

где μ -химический потенциал газа.

Распределение же в движущемся газе отличается от (6,7) (как уже было отмечено в § 5) лишь галилеевским преобразованием скорости.

Для того, чтобы написать эту функцию в явном виде, выделим из полной энергии из полной энергии молекулы $\varepsilon(\Gamma)$ кинетическую энергию ее поступательного движения:

$$\varepsilon(\Gamma) = \frac{mv^2}{2} + \varepsilon_{\text{вн}};$$

здесь внутренняя энергия $\varepsilon_{\text{вн}}$ включает в себя энергию вращения молекулы и колебательную энергию.

Заменив $\mathbf{v}$ на $\mathbf{v} - \mathbf{V}$, получим распределение Больцмана в движущемся газе:

$$f_0 = \exp\left(\frac{\mu - \varepsilon_{\text{вн}}}{T}\right) \exp\left(-\frac{m(\mathbf{v} - \mathbf{V})^2}{2T}\right)$$

Уравнение на функцию распределения в слабо неоднородном газе

В слабо неоднородном газе f_0 зависит от координат и времени, причем эта зависимость возникает за счет меняющихся вдоль газа (и со временем) его макроскопических характеристик - скорости $\mathbf{V}$, температуры T и давления P (а с ними и μ).

Поскольку градиенты этих величин предполагаются малыми, в левой стороне кинетического уравнения достаточно (в рассматриваемом приближении) подставить f_0 вместо f .

Вычисления можно несколько упростить, учтя очевидную независимость интересующих нас в конечном счете кинетических коэффициентов от скорости V .

Поэтому достаточно рассмотреть какую-либо одну точку в газе и выбрать в качестве таковой ту, в которой скорость $\mathbf{V}$ (но, конечно, не ее производные) равна нулю.

Продифференцировав выражение (6,9) по времени и положив затем $\mathbf{V} = 0$, получим

$$\frac{T}{f_0} \frac{\partial f_0}{\partial t} = \left[\left(\frac{\partial \mu}{\partial T} \right)_P - \frac{\mu - \varepsilon(\Gamma)}{T} \right] \frac{\partial T}{\partial t} + \left(\frac{\partial \mu}{\partial P} \right)_T \frac{\partial P}{\partial t} + m\mathbf{v} \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial t}$$

Подставим согласно известным термодинамическим формулам $\left(\frac{\partial \mu}{\partial T} \right)_P = -s$, $\left(\frac{\partial \mu}{\partial P} \right)_T = \frac{1}{N}$, $\mu = w - Ts$, где w , s и $1/N$ -тепловая функция, энтропия и объем, отнесенные к одной частице газа.

Поэтому

$$\frac{T}{f_0} \frac{\partial f_0}{\partial t} = \frac{\varepsilon(\Gamma) - w}{T} \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{1}{N} \frac{\partial P}{\partial t} + m \mathbf{v} \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial t}$$

Аналогичным образом найдем

$$\frac{T}{f_0} \mathbf{v} \nabla f_0 = \frac{\varepsilon(\Gamma) - w}{T} \mathbf{v} \nabla T + \frac{1}{N} \mathbf{v} \nabla P + m v_\alpha v_\beta V_{\alpha\beta}$$

где для краткости введено обозначение

$$V_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial V_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{\partial V_\beta}{\partial x_\alpha} \right), \quad V_{\alpha\alpha} = \operatorname{div} \mathbf{V}$$

в последнем члене в (6,11) произведена тождественная замена

$$v_\alpha v_\beta \frac{\partial V_\beta}{\partial x_\alpha} = v_\alpha v_\beta V_{\alpha\beta}$$

Левая сторона кинетического уравнения получается сложением выражений 6.10), 6.11).

При этом все производные по времени от макроскопических величин могут быть выражены через их пространственные градиенты согласно гидродинамическим уравнениям идеальной (т. е. невязкой и нетеплопроводящей) среды; учет диссипативных членов здесь привел бы к величинам высшего порядка малости.

Гидродинамические уравнения

В точке, в которой $V = 0$, уравнение Эйлера дает

$$\frac{\partial \mathbf{V}}{\partial t} = -\frac{1}{\rho} \nabla P = -\frac{1}{Nm} \nabla P$$

В той же точке из уравнения непрерывности имеем $\partial N / \partial t = -N \operatorname{div} \mathbf{V}$, или

$$\frac{1}{N} \frac{\partial N}{\partial t} = \frac{1}{P} \frac{\partial P}{\partial t} - \frac{1}{T} \frac{\partial T}{\partial t} = -\operatorname{div} \mathbf{V}$$

(использовано уравнение состояния идеального газа $N = P/T$).

Уравнение сохранения энтропии

Наконец, уравнение сохранения энтропии, $\partial s / \partial t + \mathbf{V} \nabla s = 0$, дает $\partial s / \partial t = 0$, или

$$\frac{c_p \partial T}{T} \frac{\partial T}{\partial t} - \frac{1}{P} \frac{\partial P}{\partial t} = 0$$

где использованы термодинамические формулы

$$\left(\frac{\partial s}{\partial T} \right)_P = \frac{c_p}{T}, \quad \left(\frac{\partial s}{\partial P} \right)_T = -\frac{1}{P}$$

(c - теплоемкость, тоже отнесенная к одной молекуле); вторая из этих формул относится к идеальному газу.

Напомним, что уже из закона возрастания энтропии следует, что градиент движения (в отсутствие градиентов температуры и скорости) не приводит к возникновению диссипативных процессов (ср. VI, § 49).

Итог уравнений выше (????)

Из равенств F.14), (6, 14 – 15) находим

$$\frac{1}{T} \frac{\partial T}{\partial t} = -\frac{1}{c_v} \operatorname{div} \mathbf{V}, \quad \frac{1}{P} \frac{\partial P}{\partial t} = -\frac{c_p}{c_v} \operatorname{div} \mathbf{V}$$

(учтено, что для идеального газа $c_p - c_v = 1$).

Простое вычисление приводит теперь к результату

$$\frac{\partial f_0}{\partial t} + \mathbf{v} \nabla f_0 = \frac{f_0}{T} \left\{ \frac{\varepsilon(\Gamma) - w}{T} \mathbf{v} \nabla T + m v_\alpha v_\beta V_{\alpha\beta} + \frac{w - T c_p - \varepsilon(\Gamma)}{c_v} \operatorname{div} \mathbf{V} \right\}$$

Подчеркнем, что до сих пор не делалось никаких специфических предположений о характере температурной зависимости термодинамических величин; использовалось лишь общее уравнение состояния идеального газа.

Случай вращения молекул

Для газа же с классическим вращением молекул и невозбужденными колебаниями теплоемкость не зависит от температуры и тепловая функция

$$w = c_p T$$

Тогда последний член в (6,17) упрощается; приравняв (6,17) и (6,4), напомним окончательно кинетическое уравнение в виде

$$\frac{\varepsilon(\Gamma) - c_p T}{T} \mathbf{v} \nabla T + \left[m v_\alpha v_\beta - \delta_{\alpha\beta} \frac{\varepsilon(\Gamma)}{c_v} \right] V_{\alpha\beta} = I(\chi)$$

7.1.4 Random Walk of a Particle: Jump Diffusion

обзор теории

равновероятное блуждание на прямой

.

Асимптотическое поведение на больших временах, связь с уравнением диффузии

Обобщение на случай произвольной размерности пространства

Уравнение управления вероятностями или “master equation”

сохранение полной вероятности

.

Переход от блуждания на прямой к блужданию на кольце

Дискретное преобразование Фурье и решение “master equation ”

.

Обратное преобразование Фурье, переход от суммирования к интегрированию по первой зоне Бриллюэа

.

Асимптотическое поведение на больших временах

Обобщение решения задачи на случай произвольной размерности пространства

Функция Грина уравнения диффузии

Theory

???

функция распределения при прыжковой диффузии

Рассмотрим движение частицы на прямой, когда она может находиться только в узлах, которые будем нумеровать целым n .

Частица с вероятностью λ в единицу времени прыгает на правый соседний узел, а с вероятностью μ - на левый соседний.

Найти поведение функции распределения $p(n)$ на временах $t \gg 1/(\lambda + \mu)$, если в начальный момент времени частица находилась в узле $n = 0$. указание: возможно рассмотреть технически более простой, но также показательный частный случай $\mu = \lambda$.

7.1.5 Typical Brownian Motion

Броуновское движение в двух словах

Суть броуновского движения в том, что??? средний квадрат смещения x линейно растет со временем τ , и коэффициент пропорциональности D - это коэффициент диффузии:

$$\langle x^2 \rangle = 2D\tau$$

(само уравнение????)

Формула Эйнштейна для коэффициента диффузии D сферических броуновских частиц:

$$D = \frac{RT}{6N_A\pi a\xi}$$

в которой R - универсальная газовая постоянная, T - абсолютная температура, N_A - постоянная Авогадро, a - радиус частиц, ξ - динамическая вязкость.

(тут место про то, как ее применять)

При выводе закона Эйнштейна предполагается, что смещения частицы в любом направлении равновероятны и что можно пренебречь инерцией броуновской частицы по сравнению с влиянием сил трения (это допустимо для достаточно больших времён).

Формула для коэффициента D основана на применении закона Стокса для гидродинамического сопротивления движению сферы радиусом a в вязкой жидкости.

О случае вращения

Среднеквадратичный угол поворота броуновской частицы φ (относительно произвольной фиксированной оси) также пропорционален времени наблюдения:

$$\langle \varphi^2 \rangle = 2D_r \tau$$

Здесь D_r - вращательный коэффициент диффузии, который для сферической броуновской частицы равен

$$D_r = \frac{RT}{8N_A \pi a^3 \xi}$$

Среднеквадратичное смещение в классическом и квантовом пределе

Соотношение Эйнштейна

7.1.6 Brownian Motion by Kolokolov (???)

(мб буду их разбирать, но мб и удалю. скорее всего потом впишу методы на эти темы, хорошо их иметь собранными.)

Одномерное уравнение диффузии

Одномерное уравнение диффузии на бесконечной прямой

Функция Грина для уравнения диффузии

Асимптотический по времени вид функции распределения

Обобщение на многомерный случай.

Диффузия в ограниченной области.

Возможные граничные условия для уравнения диффузии и их физическая интерпретация.

Отражающие граничные условия.

Блуждание частицы, на полупрямой.

Построение функции Грина методом изображений.

Блуждание частицы, на отрезке с отражающими краями.

Разделение переменных в уравнении диффузии и построение функции Грина.

Блуждание частицы внутри поглощающего шара.

Сведение трехмерной задачи к одномерной.

Асимптотическое поведение в пределе больших времен, роль различных гармоник.

Блуждание частицы внутри поглощающей полусферы.

Колоколов.3.3

Частица совершает броуновское движение на отрезке $[0, L]$ с поглощающими краями. Изначально частица была расположена в точке $x = a$, принадлежащей отрезку. Вычислите функцию распределения $P(x, t)$ в произвольный момент времени.

Колоколов.3.? асимптотический закон зависимости числа броуновских частиц от времени в шаре

В шаре радиуса R в очень вязкой жидкости находятся N броуновских частиц. Стенки шара являются для частиц поглощающими (частица, попав на них обратно в объём не возвращается).

Найти асимптотический закон зависимости числа броуновских частиц от времени и распределение их плотности на больших времена, если коэффициент диффузии этих частиц D . Решите аналогичную задачу для случая поглощающей полусферы.

(??? вроде по гауссу будут распределены, нет? интересно подумать про это.)

Колоколов.з.? частица рядом с поглощающей сферой

Пусть броуновская частица в начальный момент времени находилась на расстоянии l от поверхности абсолютно поглощающей сферы, радиус которой a .

Определим вероятность того, что частица не поглотилась сферой в пределе больших времен.

Сравнить результаты с результатами для одномерной задачи: когда броуновская частица в начальный момент времени находилась на расстоянии l от поглощающей стенки.

Граничное условие, задающее постоянную пристеночную концентрацию.

????

7.1.7 Other about the Fokker–Planck Equation (?)

(там куча статей про это написано, так что точно на раздел хватит информации.)

УФП для условной вероятности (???)

УФП справедливо для условной плотности вероятности: $f(x, t) = p(x, t|x_0, t_0)$, (то есть значение функции $f(x, t)$ вероятностно попадает в плоскость, образованную пространственной осью x и временной осью t , в интервалы $x - x_0$ и $t - t_0$ соответственно) при любом начальном значении x_0 и t_0 и начальном условии $p(x, t_0|x_0, t_0) = \delta(x - x_0)$, где $\delta(x - x_0)$ - функция Дирака.

Это условие гласит, что в один и тот же момент времени t_0 функция претерпевает скачок.

Если пространственные координаты равны, то функция устремляется в бесконечность.

Поэтому, в силу ограниченности функции, необходимо использовать определение

$$p(x, t) = \int p(x, t; x_0, t_0) dx_0 = \int p(x, t|x_0, t_0) p(x_0, t_0) dx_0.$$

Тогда, УФП справедливо для вероятности $p(x, t)$ с начальным условием $p(x, t)|_{t=t_0} = p(x, t_0)$, которое менее сингулярно, чем $p(x, t_0|x_0, t_0) = \delta(x - x_0)$.

эквивалентность процесса УФП и ОДУ Ито (????)

Стохастический процесс, описываемый условной вероятностью, удовлетворяющий УФП, эквивалентен ОДУ Ито

$$dx(t) = A(x(t), t)dt + \sqrt{B(x(t), t)}dW(t)$$

и что эти два описания должны рассматриваться как взаимно дополняющие друг друга.

а хз вообще, тупо заготовка в будущем подумать, пока вообще не актуально.

7.1.8 Derivation of Einstein Relation and Smolukhovsky equation

соотношение Эйнштейна: вывод

(write what we want to derive!!!)

Пусть в газе находятся тяжелые сферические частицы с достаточно малой концентрацией n . Если их концентрация неоднородная, то в результате хаотического теплового (диффузионного) движения возникнет поток этих частиц равный $\mathbf{i} = -D\nabla n$, где D называется коэффициентом диффузии. Предположим теперь, что на частицы действует некоторая внешняя сила $\mathbf{F}$ (к примеру, электрическая сила, если частицы заряжены). Под действием такой силы частицы также будут двигаться, но в силу сопротивления движению со стороны частиц газа это движение будет не ускоренным, а движением с постоянной средней скоростью $\mathbf{u} = b\mathbf{F}$, где коэффициент b называется подвижностью частиц. В результате возникнет поток частиц $n b \mathbf{F}$.

Суммарный поток частиц за счет внешней силы и диффузионного движения будет равен

$$\mathbf{i} = -D\nabla n + n b \mathbf{F}$$

Предположим, что у нас имеется потенциальное внешнее поле, действующее на частицы, так что $\mathbf{F} = -\nabla U$, и установилось равновесие между диффузионным движением и движением во внешнем поле. Тогда, во-первых, концентрация должна следовать барометрической формуле $n = n_0 e^{-U/T}$, и, во-вторых, суммарный поток частиц должен быть равен нулю:

$$\mathbf{i} = 0 = -D\nabla n + n b \mathbf{F} = (D n_0 / T) \nabla U e^{-U/T} - n_0 b \nabla U e^{-U/T}.$$

Отсюда получаем условие $D = bT$, которое называется соотношением Эйнштейна.

Это открывает путь определения коэффициента диффузии через вычисление коэффициента подвижности.

определение коэффициентов подвижности и диффузии

По сути для вывода коэффициентов нужно найти силу сопротивления, а далее приравнять ее к внешней силе, выраженной через подвижность.

Рассмотрим сначала случай свободно-молекулярного (кнудсеновского режима) $R \ll \ell$, когда длина пробега частиц газа ℓ (за счет собственных столкновений) много больше радиуса тяжелой частицы ($\text{Kn} = \ell/R \gg 1$).

Вводим внешнюю силу $\mathbf{F}$, под действием которой частица движется в газе с постоянной скоростью $\mathbf{u} = b\mathbf{F}$.

Движение с постоянной скоростью означает, что внешняя сила $\mathbf{F}$ компенсируется силой сопротивления со стороны частиц газа равной $\mathbf{F}_{\text{сопр.}}$, так что суммарная сила, действующая на тяжелую частицу равна нулю: $\mathbf{F} + \mathbf{F}_{\text{сопр.}} = 0$.

Вычислим эту силу сопротивления.

Функция распределения легких частиц газа (a) нормированная по импульсам имеет вид равновесной функции $f_a^{(0)}(\mathbf{v}) = \frac{n_a}{(2\pi m T)^{3/2}} e^{-m\mathbf{v}^2/(2T)}$.

Перейдем в систему отсчета, движущуюся со скоростью тяжелой частицы $\mathbf{u}$.

В этой системе отсчета функция распределения легких частиц газа $f_a(\mathbf{v})$, где $\mathbf{v}$ - скорость частиц в новой системе отсчета, имеет вид

$$f_a(\mathbf{v}) = f_a^{(0)}(\mathbf{v} + \mathbf{u}) = \frac{n_a}{(2\pi m T)^{3/2}} e^{-m(\mathbf{v}+\mathbf{u})^2/(2T)} \approx f_a^{(0)}(\mathbf{v}) \left(1 - \frac{m(\mathbf{v} \cdot \mathbf{u})}{T} \right)$$

(при условии, что приобретенная скорость тяжелой частицы мала, $u \ll v_{Ta}$, где $v_{Ta} \sim \sqrt{T/m}$ - тепловая скорость молекул легкого газа).

Сила сопротивления со стороны частиц газа равна импульсу, передаваемому тяжелой частице со стороны легких частиц в единицу времени.

Тяжелую частицу считаем неподвижной во время столкновения с легкими частицами.

Пусть $\mathbf{v}$ - скорость налетающей легкой частицы до столкновения, а $\mathbf{v}'$ - скорость частицы после столкновения, причем пусть угол между векторами $\mathbf{v}$ и $\mathbf{v}'$ равен θ (угол рассеяния).

В силу упругости соударения $|\mathbf{v}| = |\mathbf{v}'|$.

Передаваемый импульс в среднем равен

$$\begin{aligned}\Delta p &= \overline{m(\mathbf{v} - \mathbf{v}')} = m(\mathbf{v} - \mathbf{v}'_{\parallel} - \mathbf{v}'_{\perp}) = \\ &= m(\mathbf{v} - \mathbf{v}'_{\parallel}) = m(\mathbf{v} - \mathbf{v} \cos \theta) = m\mathbf{v}(1 - \cos \theta) \quad (7.1)\end{aligned}$$

Здесь продольность и поперечность подразумеваются по отношению к направлению скорости $\mathbf{v}$, и очевидно, что при усреднении по многим столкновениям $\overline{\mathbf{v}'_{\perp}} = 0$.

Умножая передаваемый импульс на плотность потока легких частиц со скоростью $\mathbf{v}$ и на сечение $d\sigma(\theta)$ такого столкновения и интегрируя, получим

$$\begin{aligned}\mathbf{F}_{\text{сопр.}} &= \int d^3p f_a(\mathbf{v}) \mathbf{v} \cdot m\mathbf{v}(1 - \cos \theta) \cdot d\sigma(\theta) = \\ &= \int d^3p f_a^{(0)}(\mathbf{v} + \mathbf{u}) \mathbf{v} \cdot m\mathbf{v} \sigma_t(v) = \\ &= m \int f_a^{(0)}(\mathbf{v}) \left(1 - \frac{m(\mathbf{v} \cdot \mathbf{u})}{T}\right) \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} \sigma_t(v) d^3p = -\frac{m^2}{T} \int f_a^{(0)}(\mathbf{v}) (\mathbf{v} \cdot \mathbf{u}) \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} \sigma_t(v) d^3p = \\ &= -\frac{m^2}{3T} \int f_a^{(0)}(\mathbf{v}) \mathbf{u} v^3 \sigma_t(v) d^3p = \\ &= -\frac{n_a m^2 \langle v^3 \sigma_t(v) \rangle}{3T} \mathbf{u}\end{aligned}$$

где введены обозначения $\sigma_t(v) = \int (1 - \cos \theta) d\sigma(\theta)$, $\langle v^3 \sigma_t(v) \rangle = \frac{\int f_a^{(0)}(\mathbf{v}) v^3 \sigma_t(v) d^3p}{\int f_a^{(0)}(\mathbf{v}) d^3p}$.

Записывая теперь

$$\mathbf{F}_{\text{сопр.}} + \mathbf{F} = -\frac{n_a m^2 \langle v^3 \sigma_t(v) \rangle}{3T} \mathbf{u} + \frac{\mathbf{u}}{b} = 0,$$

получим подвижность b тяжелой частицы и её коэффициент диффузии в виде

$$b = \frac{3T}{n_a m^2 \langle v^3 \sigma_t(v) \rangle}, \quad D = bT = \frac{3T^2}{n_a m^2 \langle v^3 \sigma_t(v) \rangle} \underbrace{=}_{\sigma_t = \text{const}} \frac{3\lambda}{8} \sqrt{\frac{\pi T}{2m}}.$$

По порядку величины

$$D \sim \frac{(mv_T^2)^2}{m^2 n_a v_T^3 \sigma} = \frac{v_T}{n_a \sigma} \sim \frac{v_T}{n_a R^2} \sim v_T \lambda,$$

где $\lambda = 1/(n_a \sigma)$ - длина свободного пробега тяжелых частиц относительно их столкновений с легким газом.

Введя частоту столкновений $\nu(v) = n_a v \sigma_t$ и учитывая, что $\langle v^2 \rangle = 3T/m$, выражение для подвижности можно представить в виде

$$b = \{m \langle v^2 \nu(v) \rangle / \langle v^2 \rangle\}^{-1} \equiv (m \nu_{\text{эфф}})^{-1},$$

где $\nu_{\text{эфф}} = \langle v^2 \nu(v) \rangle / \langle v^2 \rangle$ - эффективная частота столкновений.

Теперь рассмотрим обратный предельный случай $R \gg \ell$, соответствующий гидродинамическому режиму ($\text{Kn} \ll 1$).

В этом случае надо решать задачу о силе сопротивления шарiku, движущемуся в вязком газе, решая соответствующие гидродинамические уравнения.

Эту задачу точно решил Стокс в девятнадцатом веке, и ответ следующий:

$$F_{\text{сопр.}} = -6\pi\eta R u,$$

где η - вязкость газа.

Мы не будем разбирать решение этой задачи, тем более что нужен нам лишь численный коэффициент 6π .

Буквенный ответ может быть легко получен из соображений размерности, поскольку $\eta = nT\tau \sim \frac{nmv_T^2}{nv_T\sigma_a} \sim mv_T/\sigma_a$, где здесь σ_a - сечение столкновений частиц легкого газа между собой, и поэтому $[\eta] = \text{Г/см} \cdot \text{сек}^2$.

Сила должна быть пропорциональна скорости тяжелой частицы u и вязкости газа, которая линейно входит в уравнение Навье Стокса, которые в свою очередь нужно решать с граничным условием обращения скорости потока газа в ноль на поверхности тяжелой частицы.

Это есть существенное отличие от свободно-молекулярного режима, при котором наличие тяжелой частицы не влияет на функцию распределения частиц газа.

Поскольку $[F] = \text{Г} \cdot \text{см/сек}^2$, то единственно возможная зависимость от радиуса частицы - линейная.

Поэтому

$$b = (6\pi\eta R)^{-1},$$

и

$$D = bT = T/(6\pi\eta R)$$

Фоккер-планковские процессы и диффузия в фазовом пространстве

Обсудим очень важную категорию кинетических процессов, которые описываются единой методикой с помощью так называемого кинетического уравнения Фоккера-Планка.

Речь будет идти о той значительной категории кинетических явлений, в которых в процессе одного элементарного акта столкновений (в процессе одного столкновения) какие-то переменные, от которых зависит функция распределения, меняются слабо по сравнению с их характерными значениями.

Типичный пример такого рода дает задача о релаксации по импульсам небольшой примеси тяжелого газа в легком (который сам по себе предполагается находящимся в равновесии).

Ввиду малой концентрации тяжелого газа столкновения тяжелых частиц между собой маловероятны, и надо рассматривать только столкновения тяжелых частиц с легкими.

Но при столкновении с легкой частицей импульс тяжелой частицы меняется очень мало ($\Delta p \ll p$), и в этом смысле процесс изменения импульса тяжелой частицы при столкновении с легкой представляет собой типичный фоккер-планковский процесс.

Точно таким же процессом, кстати, является и изменение координаты тяжелой частицы с точки зрения легких частиц, тепловые скорости которых велики по сравнению с тепловыми скоростями тяжелых частиц.

В нулевом приближении последние можно считать как бы неподвижными, а изменение координат тяжелых частиц при столкновениях с легкими являются малыми по сравнению с любыми другими характерными расстояниями и, таким образом, диффузию по координате тоже можно отнести к процессам такого типа.

Есть много и других примеров таких процессов.

Общий вывод уравнения Фоккера-Планка

Перейдем к выводу уравнения Фоккера-Планка, описывающего такие процессы, но при этом для конкретности будем иметь в виду именно случай небольшой тяжелой примеси в газе легких частиц и искать уравнение для функции распределения тяжелых частиц по импульсам $f(t, \mathbf{p})$ (сначала в пространственно-однородном случае и в отсутствие внешних сил - обобщение на пространственно-неоднородный случай и присутствие внешних сил тривиально и содержится только в изменении левой части уравнения).

Отметим, что вывод и вид полученного нами уравнения отнюдь не будет ограничен только этим конкретным примером.

Итак, рассматриваем примесные тяжелые частицы в газе из легких и ищем их функцию распределения $f(t, \mathbf{p})$.

Нам важно написать столкновительную часть (правую часть) кинетического уравнения.

Обозначим через $w(\mathbf{p}, \mathbf{q})d^3q$ отнесенную к единице времени вероятность изменения импульса тяжелой частицы $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} - \mathbf{q}$ (из начального состояния в конечное) при элементарном акте её столкновения с легкой частицей.

Тогда очень легко записать (подобно уравнению Чепмена-Колмогорова или кинетическому уравнению Паули) кинетическое уравнение (для простоты пока в однородном случае без внешних сил) для функции распределения $f(t, \mathbf{p})$:

$$\frac{\partial f(t, \mathbf{p})}{\partial t} = \int d^3q \left\{ \underbrace{w(\mathbf{p} + \mathbf{q}, \mathbf{q})f(t, \mathbf{p} + \mathbf{q})}_{\text{член прихода: } \mathbf{p} + \mathbf{q} \rightarrow \mathbf{p}} - \underbrace{w(\mathbf{p}, \mathbf{q})f(t, \mathbf{p})}_{\text{член ухода: } \mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} - \mathbf{q}} \right\}$$

причём здесь предполагается, что функция $w(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ уже учитывает все необходимые δ -функции, связанные с законами сохранения энергии и импульса при столкновениях.

Это уравнение линейно по f , но только в силу того, что столкновения идут в основном с равновесными легкими частицами.

Согласно сделанным предположениям о малости изменения импульса в процессе одного столкновения, характерные значения величины $\mathbf{q}$ в интеграле по $\mathbf{q}$ малы по сравнению со средним импульсом частиц $\mathbf{p}$.

Поэтому мы можем провести разложение в подынтегральном выражении по малым $\mathbf{q}$:

$$w(\mathbf{p} + \mathbf{q}, \mathbf{q})f(t, \mathbf{p} + \mathbf{q}) \approx w(\mathbf{p}, \mathbf{q})f(t, \mathbf{p}) + \mathbf{q} \frac{\partial(w(\mathbf{p}, \mathbf{q})f(t, \mathbf{p}))}{\partial \mathbf{p}} + \frac{q_\alpha q_\beta}{2} \frac{\partial^2(w(\mathbf{p}, \mathbf{q})f(t, \mathbf{p}))}{\partial p_\alpha \partial p_\beta}$$

Тогда после подстановки получим уравнение

$$\frac{\partial f(t, \mathbf{p})}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial p_\alpha} \left\{ \tilde{A}_\alpha f + \frac{\partial (B_{\alpha\beta} f)}{\partial p_\beta} \right\} \equiv \int d^3q \left\{ \mathbf{q} \frac{\partial(w(\mathbf{p}, \mathbf{q})f(t, \mathbf{p}))}{\partial \mathbf{p}} + \frac{q_\alpha q_\beta}{2} \frac{\partial^2(w(\mathbf{p}, \mathbf{q})f(t, \mathbf{p}))}{\partial p_\alpha \partial p_\beta} \right\}$$

где введены обозначения

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

в которых во вторых выражениях знак суммы просто означает суммирование по большому числу столкновений за время δt . В этой форме записи явно выражается физический смысл величин $\tilde{A}_\alpha$ и $B_{\alpha\beta}$, и именно в такой форме наше полученное уравнение для функции распределения $f(t, \mathbf{p})$ фактически приобретает общий вид, не зависящий от конкретного выбора задачи (важна линейность правой части по f).

Отсюда ясно и то, почему в разложении произведения wf мы учли только два члена разложения - линейный и квадратичный - по малой величине q_α .

Казалось бы, что член первого порядка по q_α больше члена второго порядка, и только членом первого порядка и можно было бы ограничиться, но нет.

Ведь величина q_α знакопеременна и при суммировании по большому числу столкновений произойдет значительная компенсация положительных и отрицательных слагаемых в линейном члене, поэтому и нужно учесть члены второго порядка (а среди них есть и знакопостоянные, где нет знаковой компенсации).

Полученное уравнение, в котором столкновительный член (правая часть кинетического уравнения) имеет не интегральный, а дифференциальный вид, и носит название уравнения Фоккера-Планка.

Эта правая часть имеет вид дивергенции по импульсным, в данном случае, переменным p_α :

$$\partial f / \partial t = -\partial s_\alpha / \partial p_\alpha,$$

где

$$s_\alpha = -\tilde{A}_\alpha f - \frac{\partial (B_{\alpha\beta} f)}{\partial p_\beta} = \left(-\tilde{A}_\alpha - \frac{\partial B_{\alpha\beta}}{\partial p_\beta} \right) f - B_{\alpha\beta} \frac{\partial f}{\partial p_\beta} = -A_\alpha f - B_{\alpha\beta} \frac{\partial f}{\partial p_\beta}$$

и где $A_\alpha = \tilde{A}_\alpha + \partial B_{\alpha\beta} / \partial p_\beta$, а s_α имеет смысл вектора плотности потока частиц в импульсном пространстве.

Это уравнение можно записать также в виде $\partial f / \partial t + \text{div}_{\mathbf{p}} \mathbf{s} = 0$, откуда непосредственно видно, что оно имеет вид уравнения непрерывности в пространстве переменных p_α (в импульсном пространстве).

Обобщение на пространственно-неоднородный случай в присутствии внешней силы очевидно:

$$\partial f / \partial t + \mathbf{v} \cdot \partial f / \partial \mathbf{r} + \mathbf{F} \cdot \partial f / \partial \mathbf{p} + \text{div}_{\mathbf{p}} \mathbf{s} = 0$$

Коэффициенты $\tilde{A}_\alpha$ и $B_{\alpha\beta}$ выражаются через средние характеристики столкновений и их вычисление представляет собой уже механическую задачу (свою для каждого случая).

В принципе однако нет необходимости вычислять оба коэффициента по отдельности.

Они всегда могут быть выражены друг через друга из условия, что поток $\mathbf{s}$ должен обращаться в нуль в полном статистическом равновесии (без внешних сил), то есть при подстановке $f(t, \mathbf{p}) \rightarrow f^{(0)}(\mathbf{p})$ должно быть

$$s_\alpha^{(0)} = -A_\alpha f^{(0)} - B_{\alpha\beta} \partial f^{(0)} / \partial p_\beta = 0$$

что и дает связь между A_α и $B_{\alpha\beta}$.

Фактически всегда проще вычислять величины $B_{\alpha\beta}$, в которых нет дополнительных сокращений из-за знакопеременности, как в $\tilde{A}_\alpha$.

Уравнение Фоккера-Планка для тяжелых частиц в газе из легких

Вот теперь в нашем конкретном случае тяжелых примесных частиц в легком газе равновесное распределение $f^{(0)}(\mathbf{p}) = \text{const} \cdot \exp \{-p^2 / (2MT)\}$, где M - масса частиц тяжелого газа, T - температура основного (легкого) газа, который сам по себе находится в равновесии.

Подстановка этого выражения в условие $s^{(0)} = 0$ дает $A_\alpha = B_{\alpha\beta} p_\beta / (MT)$, откуда и видно, что оба члена в потоке $\mathbf{s}$ одного порядка.

Таким образом, для конкретного случая тяжелых частиц в легком газе кинетическое уравнение Фоккера-Планка принимает вид

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

Единственный вектор, от которого могут зависеть коэффициенты $B_{\alpha\beta}$, это вектор импульса $\mathbf{p}$ тяжелой частицы.

Но поскольку скорости этих частиц $\mathbf{v} = \mathbf{p}/M$ в среднем малы по сравнению со скоростями легких частиц, то при столкновениях их можно в нулевом приближении считать неподвижными, и в этом приближении $B_{\alpha\beta}$ от импульса $\mathbf{p}$ не зависят, то есть тогда это просто числа.

Кроме того, тогда же в силу изотропии пространства $B_{\alpha\beta} = \frac{\sum q_\alpha q_\beta}{2\delta t} = B\delta_{\alpha\beta}$, где $B = \frac{1}{6} \sum \frac{q^2}{\delta t}$, и уравнение приобретает вид

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

Если сравнить это уравнение с уравнением диффузии тяжелых частиц в обычном пространстве с внешней силой (такое уравнение обычно называют уравнением Смолуховского) $\partial n / \partial t = \operatorname{div}(D \nabla n - bn\mathbf{F})$, где D - коэффициент диффузии, b - подвижность ($D = bT$), $\mathbf{F}$ - внешняя сила, n - концентрация, то видно, что уравнение Фоккера-Планка описывает диффузию в импульсном пространстве, а величина B играет роль коэффициента диффузии в импульсном пространстве.

Соотношение же между коэффициентами A_α и $B_{\alpha\beta}$ аналогично соотношению Эйнштейна $D = bT$ между обычным коэффициентом диффузии и подвижностью.

Теперь нам осталось сделать только одно: определить сам коэффициент B .

Изменение импульса тяжелой (b) частицы $\mathbf{q} \equiv \Delta \mathbf{p}_b = \mathbf{p}_b - \mathbf{p}'_b = \mathbf{p}'_a - \mathbf{p}_a$ совпадает с точно-стью до знака с изменением импульса легкой (a) частицы, причём при вычислении изменения импульса легкой частицы можно считать тяжелую частицу неподвижной и пренебречь её отдачей при столкновении.

То есть можно считать для легких частиц, что $\mathbf{p}_a = \mathbf{p}'_a$, и тогда $q^2 = p_a^2 + p_a'^2 - 2\mathbf{p}_a \cdot \mathbf{p}'_a = 2p_a^2(1 - \cos \theta)$, где $\mathbf{p}_a$ - импульс легкой частицы, θ - угол её рассеяния (поскольку мы работаем фактически в системе центра масс).

Тогда очевидно что, поскольку $v_{ab} \approx v_a$, то

$$B = \frac{1}{6} \frac{\sum q^2}{\delta t} = \frac{1}{6} \int 2p_a^2(1 - \cos \theta) \underbrace{f_a^{(0)}(\mathbf{p}_a) v_a d\sigma d^3 p_a}_{\text{число ст. в ед. вр. в } d\Omega} = \frac{1}{3m} \int p_a^3 \sigma_t(v_a) f_a^{(0)}(\mathbf{p}_a) d^3 p_a,$$

и суммирование по столкновениям за время δt эффективно сводится к усреднению по импульсам налетающей легкой частицы, где $f^{(0)}(\mathbf{p}_a)$ - равновесная функция распределения легких частиц по их импульсам.

Если ввести концентрацию $n_a = \int f_a^{(0)} d^3 p_a$ легких частиц, то можно написать, что

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

где m - масса легкой частицы, σ_t - транспортное сечение рассеяния легких частиц на тяжелых, и усреднение подразумевается по равновесному распределению частиц легкого газа.

Подвижность и коэффициент диффузии тяжелых частиц

Коэффициент диффузии в импульсном пространстве B можно связать с коэффициентом диффузии D в обычном координатном пространстве.

В общем случае левая часть уравнения должна иметь стандартный вид с заменой $\partial f / \partial t \rightarrow \partial f / \partial t + \mathbf{v} \cdot \partial f / \partial \mathbf{r} + \mathbf{F} \cdot \partial f / \partial \mathbf{p}$.

Введя внешнюю однородную силу $\mathbf{F}$, уравнение Фоккера Планка в пространственно-однородном случае примет вид

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

В стационарном случае при $\partial f / \partial t = 0$, то есть в динамическом равновесии в присутствии внешней силы $\mathbf{F}$, должно быть $\mathbf{s}(\mathbf{p}) = \text{const}$, но const должна ещё конечно и занулиться, поскольку $\lim_{p \rightarrow \infty} f(\mathbf{p}) = 0$, так что имеем условие

$$\left(\mathbf{F} - \frac{B\mathbf{p}}{MT} \right) f - B \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = 0 \rightarrow f \sim \exp \left(-\frac{(\mathbf{p} - \mathbf{F}MT/B)^2}{2MT} \right) \equiv \exp \left(-\frac{(\mathbf{p} - M\mathbf{u})^2}{2MT} \right)$$

откуда для средней дрейфовой скорости тяжелых частиц под действием силы $\mathbf{F}$ имеем сразу выражение $\mathbf{u} = \mathbf{F}T/B$.

Тогда для подвижности немедленно получаем $b = T/B \rightarrow D = bT = T^2/B$.

Учитывая значение $B = \frac{n_a}{3m} \langle p_a^3 \sigma_t \rangle$, получим, что

$$D = \frac{3mT^2}{n_a \langle p_a^3 \sigma_t \rangle} = \frac{3T^2}{n_a m^2 \langle v_a^3 \sigma_t \rangle}.$$

Это выражение совпадает с тем, что получилось ранее.

Вывод уравнения Смолуховского из уравнения Фоккера–Планка

Запишем уравнение Фоккера–Планка в общем виде (с подстановкой $\mathbf{v} = \mathbf{p}/M$), и потом проинтегрируем его по всем импульсам (результат очевиден): $\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{M} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{F} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \left(\frac{B\mathbf{p}}{MT} f + B \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} \right) \rightarrow \frac{\partial}{\partial t} \int f d^3p + \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \cdot \int \frac{\mathbf{p}}{M} f d^3p = 0$ Так как $\int f d^3p = n(\mathbf{r}, t)$ – концентрация частиц, и обозначая $\mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = \int \frac{\mathbf{p}}{M} f d^3p \equiv \int \mathbf{v} f d^3p$, запишем это уравнение в виде $\frac{\partial n}{\partial t} + \text{div } \mathbf{J} = 0$ (это уравнение непрерывности).

Чтобы определить вектор $\mathbf{J}$, умножим уравнение Фоккера–Планка на $\mathbf{p}/M$ и опять проинтегрируем по всем импульсам: $\frac{\partial}{\partial t} \int \frac{p_\alpha}{M} f d^3p + \frac{\partial}{\partial x_\beta} \int \frac{p_\alpha p_\beta}{M^2} f d^3p + \int d^3p \frac{p_\alpha}{M} F_\beta \frac{\partial f}{\partial p_\beta} = \int d^3p \frac{p_\alpha}{M} \frac{\partial}{\partial p_\beta} \left(\frac{B p_\beta}{MT} f + B \frac{\partial f}{\partial p_\beta} \right)$. Путем интегрирования по частям последние два интеграла преобразуются так (учитываем, что величина $B = \text{const}$):

$$\begin{aligned} \int d^3p \frac{p_\alpha}{M} \frac{\partial}{\partial p_\beta} \left(\frac{B p_\beta}{MT} f + B \frac{\partial f}{\partial p_\beta} \right) &= \int d^3p \frac{\partial}{\partial p_\beta} \left(\frac{p_\alpha}{M} \left(\frac{B p_\beta}{MT} f + B \frac{\partial f}{\partial p_\beta} \right) \right) - \int d^3p \frac{\delta_{\alpha\beta}}{M} \left(\frac{B p_\beta}{MT} f + B \frac{\partial f}{\partial p_\beta} \right) = \\ &= -\frac{B}{MT} \int d^3p \frac{p_\alpha}{M} f = -\frac{B}{MT} J_\alpha \\ \int d^3p \frac{p_\alpha}{M} F_\beta \frac{\partial f}{\partial p_\beta} &= \int d^3p \frac{\partial}{\partial p_\beta} \left(\frac{p_\alpha}{M} F_\beta f \right) - \int d^3p \frac{\delta_{\alpha\beta}}{M} F_\beta f = -\frac{n}{M} F_\alpha \end{aligned}$$

Второй же интеграл вычисляем приближенно, используя равновесную функцию распределения $f^{(0)} \sim e^{-p^2/(2mT)}$:

$$\int \frac{p_\alpha p_\beta}{M^2} f d^3p \approx \int \frac{p_\alpha p_\beta}{M^2} f^{(0)} d^3p = \frac{1}{3} \delta_{\alpha\beta} \int \frac{p^2}{M^2} f^{(0)} d^3p = \delta_{\alpha\beta} \frac{nT}{M}$$

Используя эти результаты, получаем уравнение

$$\frac{\partial J_\alpha}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\frac{nT}{M} \right) + \frac{n}{M} F_\alpha - \frac{B}{MT} J_\alpha$$

откуда, в силу медленности изменения концентрации n тяжелых частиц следует, что на больших временах $t \gg MT/B$ асимптотически имеем $\mathbf{J} = -\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \left(\frac{nT^2}{B} \right) + \frac{nT}{B} \mathbf{F} \equiv \equiv -\nabla(nD) + nb\mathbf{F}$, где мы использовали уже известные нам соотношения для подвижности и коэффициента диффузии $b = T/B$ и $D = T^2/B$.

Подставляя этот результат в уравнение непрерывности $\frac{\partial n}{\partial t} + \text{div } \mathbf{J} = 0$, получим уравнение Смолуховского:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -\text{div}(-\nabla(nD) + nb\mathbf{F}) = \text{div}(D\nabla n - nb\mathbf{F})$$

где мы использовали постоянство коэффициента D .

второй вариант изложения лол

(тут разные куски теории, которые пока не встроены в единую картину, ну и вряд ли скоро станут)

коэффициент диффузии тяжелого газа в легком

Вычислить коэффициент диффузии тяжелого газа в легком.
(тут без УФП делаем всё)

соотношение Эйнштейна

Получим соотношение Эйнштейна между подвижностью и коэффициентом диффузии.

Подвижность b связана с коэффициентом диффузии D простым соотношением.

Для его вывода напишем диффузионный поток $\mathbf{i}$, который содержит наряду с обычным членом $-\rho D \nabla c$, связанным с градиентом концентрации (температуру предполагаем постоянной), также и член, связанный со скоростью, приобретаемой частицей под влиянием внешних сил.

Этот последний член равен $\rho c \mathbf{v} = \rho c b \mathbf{f}$.

Таким образом ¹⁾,

$$\mathbf{i} = -\rho D \nabla c + \rho c b \mathbf{f}$$

Перепишем это выражение в виде

$$\mathbf{i} = -\frac{\rho D}{(\partial \mu / \partial c)_{T,p}} \nabla \mu + \rho c b \mathbf{f}$$

где μ - химический потенциал взвешенных частиц (играющих роль растворенного вещества).

Зависимость этого потенциала от концентрации (в слабом растворе) дается выражением

$$\mu = T \ln c + \psi(p, T)$$

см пар 87 так что

$$\mathbf{i} = -\frac{\rho D c}{T} \nabla \mu + \rho c b \mathbf{f}$$

В состоянии термодинамического равновесия диффузия отсутствует и поток $\mathbf{i}$ должен обращаться в нуль.

С другой стороны, при наличии внешнего поля условие равновесия требует постоянства вдоль раствора суммы $\mu + U$, где U - потенциальная энергия взвешенной частицы в этом поле.

Тогда $\nabla\mu = -\nabla U = -\mathbf{f}$ и из равенства $\dot{\mathbf{i}} = 0$ получим $D = Tb$.

Подвижность есть, по определению, коэффициент пропорциональности между средней скоростью $\mathbf{V}$, приобретаемой частицей газа во внешнем поле, и действующей на частицу со стороны поля силой $\mathbf{f}$:

$$\mathbf{V} = b\mathbf{f}$$

Скорость же $\mathbf{V}$ определяется в данном случае из условия взаимной компенсации силы $\mathbf{f}$ и силы сопротивления $\mathbf{f}_r$, испытываемой движущейся тяжелой частицей со стороны легких (столкновениями тяжелых частиц друг с другом можно пренебречь ввиду их относительной редкости).

Функция распределения легких частиц является при этом максвелловской:

$$f_0 = \frac{N_i}{(2\pi m_1 T)^{3/2}} \exp\left(-\frac{m_1 v^2}{2T}\right)$$

где m_1 -масса легкой частицы.

Рассмотрим какую-нибудь одну определенную тяжелую частицу; пусть ее скорость есть $\mathbf{V}$.

Перейдем теперь к системе координат, движущейся вместе с этой частицей, и пусть $\mathbf{v}$ обозначает скорости легких частиц в этой новой системе.

Функция распределения легких частиц в этой системе координат есть $f_0(\mathbf{v} + \mathbf{V})$.

Предполагая скорость $\mathbf{V}$ малой, можем написать

$$f_0(\mathbf{v} + \mathbf{V}) \approx f_0(v) \left(1 - \frac{m_1 \mathbf{v} \mathbf{V}}{T}\right)$$

Искомую силу сопротивления $\mathbf{f}_r$ можно вычислить как полный импульс, передаваемый тяжелой частице легкими, которые сталкиваются с нею в единицу времени.

Тяжелая частица остается при столкновении неподвижной.

Легкая же частица приносит с собой импульс $m_1 \mathbf{v}$; после столкновения, при котором ее импульс поворачивается на угол α , она уносит с собой импульс, равный в среднем $m_1 v \cos \alpha$.

Поэтому импульс, передаваемый при таком столкновении тяжелой частице, равен в среднем $m_1 v (1 - \cos \alpha)$.

Умножая его на плотность потока легких частиц со скоростью $\mathbf{v}$

где опять введено обозначение (11,4).

При подстановке сюда $f_0(\mathbf{v} + \mathbf{V})$ в виде (12,3) первый член обращается в нуль (интегрированием по направлениям скорости $\mathbf{v}$), так что остается

$$\mathbf{f}_r = -\frac{m_1^2}{T} \int f_0(v) (\mathbf{V} \mathbf{v}) \mathbf{v} v \sigma_t d^3 p$$

или, усредняя по направлениям $\mathbf{v}$

$$\mathbf{f}_r = -\frac{m_1^2}{3T} \mathbf{V} \int f_0(v) \sigma_t v^3 d^3 p = -N_i \frac{m_1^2}{3T} \mathbf{V} \langle \sigma_t v^3 \rangle$$

где угловые скобки снова обозначают усреднение по обычному максвелловскому распределению.

Наконец, имея в виду, что в рассматриваемом случае $N_1 \gg N_2$, пишем $N_1 \approx N = P/T$, так что

$$\mathbf{f}_r = -\frac{m_1^2 P}{3T^2} \langle \sigma_t v^3 \rangle \mathbf{V}$$

Приравняв нулю сумму силы сопротивления $\mathbf{f}_r$ и внешней силы $\mathbf{f}$, получим согласно (12,2) подвижность b , а затем и искомый коэффициент диффузии

$$D = bT = \frac{3T^3}{m_1^2 P \langle \sigma_t v^3 \rangle}$$

коэффициент диффузии для примеси тяжелого газа в легком

Определим коэффициент диффузии в импульсном пространстве для частицы тяжелого газа в легком, предполагая скорости тяжелых частиц малыми по сравнению со скоростями легких.

При вычислении передачи импульса можно считать тяжелую частицу неподвижной и пренебречь изменением ее энергии при столкновении.

Изменение импульса тяжелой частицы вычисляется тогда как (совпадающее с ним) изменение импульса легкой частицы: $(\Delta \mathbf{p})^2 = 2p'^2(1 - \cos \alpha)$, где p' - величина импульса легкой частицы, а α - угол его поворота при рассеянии.

Отсюда

$$\sum (\Delta \mathbf{p})^2 = \delta t \int 2p'^2(1 - \cos \alpha) N v' d\sigma$$

(где N - плотность числа частиц легкого газа) и окончательно

$$B = \frac{N}{3m} \langle p'^3 \sigma_t \rangle$$

где $\sigma_t = \int (1 - \cos \alpha) d\sigma$ - транспортное сечение, а усреднение производится по распределению частиц легкого газа.

подвижность тяжелой частицы в легком газе

С помощью уравнения Фоккера-Планка определить подвижность тяжелой частицы в легком газе.

Подвижность b есть коэффициент в равенстве

$$\bar{\mathbf{v}} \equiv \int \delta f \cdot \mathbf{v} d^3 p = b \mathbf{F}.$$

Необходимо найти δf . Для этого запишем кинетическое уравнение при наличии внешнего поля, которое имеет вид

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

то есть добавляется член, содержащий силу $\mathbf{F}$, действующая на частицу.

Предполагая ее малой, ищем стационарное решение уравнения в виде $f' = f_0 + \delta f$, где f_0 это максвелловское распределение, а $\delta f \ll f_0$.

Для δf находим уравнение

$$B \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \left(\frac{\partial \delta f}{\partial \mathbf{p}} + \frac{\mathbf{p}}{MT} \delta f \right) = \mathbf{F} \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{p}}$$

Отсюда

$$B \left(\frac{\partial \delta f}{\partial \mathbf{p}} + \frac{\mathbf{p}}{MT} \delta f \right) = \mathbf{F} f_0$$

и затем $\delta f = f_0 \mathbf{F} \cdot \mathbf{p} / B$.

Вычисление интеграла дает

$$b = \frac{T}{B} = \frac{3mT}{N \langle \sigma_t p'^3 \rangle}$$

в согласии с коэффициентом диффузии, вычисленным без уравнения Фоккера-Планка где-то у меня выше

$$D = bT = \frac{3T^3}{m_1^2 P \langle \sigma_t v^3 \rangle}.$$

связь уравнения со столкновительным членом типа Фоккера-Планка в импульсном пространстве и уравнение диффузии

Свести кинетическое уравнение со столкновительным членом типа Фоккера-Планка в импульсном пространстве к уравнению диффузии (Смолуховского) в реальном пространстве и обсудить соотношения Эйнштейна

7.1.9 Hydrodynamic Limit of the Fokker–Planck Equation

(колоколов, подвивлов, образовский 6.2, задание ссылается на нее)

Theory

Предположим, что начальное неравновесное распределение является слабо неоднородным в пространстве (характерная длина L , на которой меняется f много больше длины свободного пробега λ) и характерное время T изменения f много больше времени затухания $1/\gamma$.

Плотность числа частиц в окрестности точки $\vec{r}$ находится как

$$n(\vec{r}, t) = \int f(\vec{r}, \vec{p}, t) d\vec{p}$$

В уравнении Фоккера - Планка

$$\partial_t f = -\frac{\vec{p}}{m} \partial_{\vec{r}} f + \partial_{\vec{p}} (\gamma \vec{p} + \vec{\nabla} U) + \frac{1}{2} \partial_{\vec{p}} (D \partial_{\vec{p}} f)$$

проинтегрируем по импульсам и получим

$$\partial_t n(\vec{r}, t) = -\frac{\partial}{\partial r_\beta} \int \frac{p_\beta}{m} f d^3 p - \int \partial_{\vec{p}} \vec{J}_{\vec{p}} d^3 p = -\frac{\partial}{\partial r_\beta} J_\beta$$

поскольку последний интеграл равен нулю, в чем легко убедиться интегрированием по частям, и мы ввели обозначение

$$J_\beta = \int \frac{p_\beta}{m} f d^3 p$$

Найдем уравнение для J_α , умножая уравнение Фоккера - Планка на p_α/m и интегрируя по импульсам:

$$\partial_t J_\alpha = -\frac{\partial}{\partial r_\beta} \int \frac{p_\alpha p_\beta}{m^2} f d^3 p + \int \frac{p_\alpha}{m} \partial_{\vec{p}} [(\gamma \vec{p} + \vec{\nabla} U) f] d^3 p + \int \frac{p_\alpha}{m} \frac{D}{2} \partial_{\vec{p}}^2 f d^3 p.$$

Последний интеграл в этом выражении равен нулю после двух интегрирований по частям.

Находим первый интеграл, используя равновесную функцию $f \sim e^{-p^2/2mT}$:

$$\int \frac{p_\alpha p_\beta}{m^2} f d^3 p = \frac{1}{3} \delta_{\alpha\beta} \int \frac{p^2}{m^2} f d^3 p = \delta_{\alpha\beta} \frac{T}{m} n(\vec{r}, t)$$

Второй интеграл равен

$$\int \frac{p_\alpha}{m} \frac{\partial}{\partial p_\beta} [\gamma p_\beta f] d^3 p = -\frac{\gamma}{m} \int p_\beta f \delta_{\alpha\beta} d^3 p = -\gamma J_\alpha.$$

Третий интеграл

$$\int \frac{p_\alpha}{m} \frac{\partial}{\partial p_\beta} [\nabla_\beta U f] d^3 p = -\nabla_\beta U \int \frac{1}{m} f \delta_{\alpha\beta} d^3 p = -\frac{n(\vec{r})}{m} \nabla_\alpha U.$$

Таким образом, мы получили уравнение

$$\partial_t J_\alpha = -\frac{\partial}{\partial r_\alpha} \left(\frac{T}{m} n(\vec{r}) \right) - \gamma J_\alpha - \frac{n(\vec{r})}{m} \nabla_\alpha U \equiv -\gamma J_\alpha(t) + B_\alpha(t)$$

где $B_\alpha(t)$ меняется очень медленно на временах $\sim 1/\gamma$, поскольку зависит от медленно меняющейся плотности числа частиц.

Получаем

$$\begin{aligned} J_\alpha(t) &= J_\alpha(0)e^{-\gamma t} + \int_0^t B_\alpha(t') e^{-\gamma(t-t')} dt' \approx \\ &\approx J_\alpha(0)e^{-\gamma t} + B_\alpha(t) \frac{1 - e^{-\gamma t}}{\gamma} \rightarrow \frac{B_\alpha(t)}{\gamma} \end{aligned}$$

для $t \gg 1/\gamma$.

Подставляя это выражение в уравнение для плотности числа частиц, имеем:

$$\partial_t n(\vec{r}, t) = \frac{T}{m\gamma} \Delta n(\vec{r}, t) + \frac{1}{m\gamma} \vec{\nabla}(n(\vec{r}, t) \vec{\nabla} U).$$

Вводя обозначение $\kappa \equiv T/(m\gamma)$ для коэффициента диффузии в координатном пространстве, получим уравнение Смолуховского:

$$\partial_t n(\vec{r}, t) = \kappa \vec{\nabla} \left(\vec{\nabla} n(\vec{r}, t) + n(\vec{r}, t) \frac{\vec{\nabla} U}{T} \right)$$

Другой вывод этого уравнения основан на исключении быстро меняющейся импульсной переменной $\vec{p}(t)$ непосредственно с помощью уравнения Ланжевена

$$\dot{\vec{p}} = -\gamma \vec{p} - \vec{\nabla} U + \vec{\xi}(t), \quad \dot{\vec{r}} = \frac{\vec{p}}{m}$$

с корреляторами случайной силы $\langle \vec{\xi}(t) \rangle = 0$, $\langle \vec{\xi}_i(t) \vec{\xi}_j(t') \rangle = D \delta_{ij} \delta(t - t')$ Решение уравнения для $t \gg 1/\gamma$ есть

$$\vec{p}(t) = -\frac{1}{\gamma} \vec{\nabla} U + \frac{1}{\gamma} \vec{\xi}(t)$$

так что

$$\dot{\vec{r}} = -\frac{1}{m\gamma} \vec{\nabla} U + \frac{1}{m\gamma} \vec{\xi}(t)$$

Тогда для плотности числа частиц $n(\vec{r}, t) = \langle \delta(\vec{r} - \vec{r}(t)) \rangle$ получим уравнение

$$\begin{aligned} \partial_t n(\vec{r}, t) &= \left\langle - \int \frac{d\vec{\mu}}{(2\pi)^d} i\vec{\mu} \cdot \dot{\vec{r}}(t) e^{i(\vec{r} - \vec{r}(t)) \cdot \vec{\mu}} \right\rangle = \\ &= \left\langle \int \frac{d\vec{\mu}}{(2\pi)^d} \frac{i\vec{\mu} \cdot \vec{\nabla} U}{m\gamma} e^{i(\vec{r} - \vec{r}(t)) \cdot \vec{\mu}} \right\rangle - \left\langle \int \frac{d\vec{\mu}}{(2\pi)^d} \frac{i\vec{\mu} \cdot \vec{\xi}(t)}{m\gamma} e^{i(\vec{r} - \vec{r}(t)) \cdot \vec{\mu}} \right\rangle = \\ &= \frac{1}{m\gamma} \vec{\nabla}(n(\vec{r}, t) \vec{\nabla} U) + \frac{T}{m\gamma} \vec{\nabla}^2 n(\vec{r}, t) \end{aligned}$$

где было использовано

$$\vec{r}(t) = \vec{r}(t - \delta t) + \frac{1}{m\gamma} \int_{t-\delta t}^t \vec{\xi}(t') dt' - \delta t \frac{1}{m\gamma} \vec{\nabla} U$$

$$\begin{aligned}
e^{i(\vec{r}-\vec{r}(t))\cdot\vec{\mu}} &\approx e^{i(\vec{r}-\vec{r}(t-\delta t))\cdot\vec{\mu}} \left(1 - \int_{t-\delta t}^t \frac{i\vec{\mu}\cdot\vec{\xi}(t')}{m\gamma} dt' \right) \\
\left\langle \int \frac{d\vec{\mu}}{(2\pi)^d} \frac{i\mu_\alpha \xi_\alpha(t)}{m\gamma} e^{i(\vec{r}-\vec{r}(t-\delta t))\cdot\vec{\mu}} \int_{t-\delta t}^t \frac{i\mu_\beta \xi_\beta(t')}{m\gamma} dt' \right\rangle_{\delta t \rightarrow 0} &= \\
= \frac{\partial}{\partial r_\alpha} \frac{\partial}{\partial r_\beta} \frac{(m\gamma T) \delta_{\alpha\beta} n(\vec{r})}{m^2 \gamma^2} &= \frac{T}{m\gamma} \Delta n(\vec{r})
\end{aligned}$$

7.1.10 Weakly Ionized Gas in an Electric Field

(какая-то модель)

описание модели

Рассмотрим ионизованный газ, находящийся в однородном электрическом поле E .

Поле нарушает равновесное распределение свободных электронов в газе и создает в нем электрический ток.

Выведем кинетическое уравнение, определяющее электронное распределение.

Слабость ионизации означает, что концентрация электронов (и ионов) в газе мала.

Поэтому основную роль играют столкновения электронов лишь с нейтральными молекулами; столкновениями же электронов друг с другом (и с ионами) можно пренебречь.

Будем предполагать также, что средняя энергия, приобретаемая электронами в электрическом поле (даже если поле сильное; см. ниже), недостаточна для возбуждения или ионизации молекул.

Тогда столкновения электронов с молекулами можно считать упругими.

Ввиду большой разницы в массах электронов m и молекул M , средняя скорость электронов велика по сравнению со средней скоростью молекул.

По той же причине импульс электрона при столкновении меняется сильно по направлению, но лишь слабо по абсолютной величине.

В этих условиях интеграл столкновений в кинетическом уравнении разбивается в сумму двух частей, представляющих изменения числа частиц в заданном элементе импульсного пространства соответственно от изменения величины и от изменения направления импульса;

первая из этих частей может быть представлена в фоккер-планковском дифференциальном виде.

Ввиду симметрии вокруг направления поля, функция распределения зависит (помимо времени) только от двух переменных: от абсолютной величины импульса p и от угла θ между $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$ и направлением $\mathbf{E}$ (которое выберем в качестве оси z).

сама модель слабо ионизированного газа в электрическом поле

Кинетическое уравнение для функции $f(t, p, \theta)$ имеет вид:

$$\frac{\partial f}{\partial t} - e\mathbf{E} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = -\frac{1}{p^2} \frac{\partial}{\partial p} p^2 s + Nv \int [f(t, p, \theta') - f(t, p, \theta)] d\sigma$$

где (????)

$$s = -B \left(\frac{v}{T} f + \frac{\partial f}{\partial p} \right), \quad B = \frac{\sum (\Delta p)^2}{2\delta t}.$$

Первый член в правой части (22.

1) отвечает правой части уравнения Фоккера-Планка (21.

12).

Второй же член есть интеграл столкновений по отношению к изменению направления импульса.

В этом интеграле молекулы можно считать неподвижными (N - плотность их числа); тогда число столкновений, испытываемых электроном в единицу времени и меняющих направление импульса от $\hat{\theta}$ и θ' (или от θ^7 и θ), есть $Nvd\sigma$, где $d\sigma$ - сечение рассеяния электрона на неподвижной молекуле, зависящее от p и от угла α между $\mathbf{p}$ и $\mathbf{p}'$ (предполагается, что сечение уже усреднено по ориентациям молекулы).

Ниже будет рассматриваться стационарное состояние с независимой от времени функцией распределения, соответственно чему член $\partial f'/t$ в уравнении (22.

1) будет опущен.

Для вычисления величины B воспользуемся равенством

$$(\mathbf{v} - \mathbf{V})^2 = (\mathbf{v}' - \mathbf{V}')^2,$$

выражающим неизменность величины относительной скорости двух частиц при упругом столкновении ($\mathbf{v}, \mathbf{V}$.

и $\mathbf{v}', \mathbf{V}'$ - начальные и конечные скорости электрона и молекулы).

Изменение скорости молекулы мало по сравнению с изменением скорости электрона: $\Delta \mathbf{V} = -m\Delta \mathbf{v}/M$; поэтому после раскрытия написанного равенства можно положить в нем $\mathbf{V} = \mathbf{V}'$.

Тогда

$$2\mathbf{V}(\mathbf{v} - \mathbf{v}') = v^2 - v'^2 \approx 2v\Delta v$$

где $\Delta v = v - v'$ - малая величина.

Таким образом,

$$(\Delta p)^2 = m^2(\Delta v)^2 = \frac{m^2}{v^2} [(\mathbf{V}\mathbf{v})^2 + (\mathbf{V}\mathbf{v}')^2 - 2(\mathbf{V}\mathbf{v})(\mathbf{V}\mathbf{v}')]]$$

Усреднение этого выражения осуществляется в два этапа.

Прежде всего, усредняем по распределению (максвелловскому) скоростей молекул $\mathbf{V}$.

Ввиду изотропии этого распределения имеем $\langle V_\alpha V_\beta \rangle = \delta_{\alpha\beta} \langle V^2 \rangle / 3$, а средний квадрат $\langle V^2 \rangle = 3T/M$. Поэтому получаем

$$(\Delta p)^2 = \frac{m^2 T}{M v^2} (v^2 + v'^2 - 2\mathbf{v}\mathbf{v}') \approx \frac{2m^2 T}{M} (1 - \cos \alpha).$$

Теперь надо усреднить по столкновениям, испытываемым электроном в единицу времени; это осуществляется интегрированием по $Nvd\sigma$.

В результате получим

$$B = \frac{Nm^2 v \sigma_t T}{M} = \frac{pmT}{Ml}$$

где $\sigma_t = \int (1 - \cos \alpha) d\sigma$ - транспортное сечение, а l - длина свободного пробега, определенная как

$$l = (N\sigma_t)^{-1}.$$

(в общем случае l - функция p).

Таким образом, фигурирующий в (22. 1) поток

$$s = -\frac{mp}{Ml} \left(v f + T \frac{\partial f}{\partial p} \right)$$

Обратим внимание на то, что согласно (22.

2) изменение энергии электрона при столкновении $\Delta\varepsilon \sim \bar{v}\Delta p \sim T(m/M)^{1/2} \sim \sim \bar{\varepsilon}(m/M)^{1/2}$.

Поэтому заметное изменение этой энергии происходит лишь в результате $\sim M/m$ столкновений, между тем как направление импульса электрона существенно меняется уже в одном столкновении.

Другими словами, время релаксации по энергиям электронов $\tau_\varepsilon \sim \tau_p M/m$, где $\tau_p \sim l/\bar{v}$ - время релаксации по направлениям импульса.

Левую часть уравнения (22.

1) тоже надо преобразовать к переменным p и θ :

$$e\mathbf{E} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = eE \frac{\partial f}{\partial p_z} = eE \left[\cos \theta \frac{\partial f}{\partial p} + \frac{\sin^2 \theta}{p} \frac{\partial f}{\partial \cos \theta} \right]$$

Решение составленного таким образом кинетического уравнения можно искать в виде разложения по полиномам Лежандра:

$$f(p, \theta) = \sum_{n=0}^{\infty} f_n(p) P_n(\cos \theta)$$

Мы увидим ниже, что последовательные члены этого разложения быстро убывают по порядку величины.

Поэтому фактически достаточно ограничиться двумя первыми членами разложения:

$$f(p, \theta) = f_0(p) + f_1(p) \cos \theta.$$

Интеграл в (22.

1) при подстановке (22.

8) дает

$$\int [f(p, \theta') - f(p, \theta)] d\sigma = -f_1 \sigma_t \cos \theta$$

(ср.

преобразование такого же интеграла в (11.

1)), после чего кинетическое уравнение принимает вид

$$-eE \left[f'_0 \cos \theta + f'_1 \cos^2 \theta + \frac{f_1}{p} \sin^2 \theta \right] + \frac{1}{p^2} (s_0 p^2)' + \frac{v}{l} f_1 \cos \theta = 0$$

где штрих означает дифференцирование по p ; здесь опущен член $p^{-2} (s_1 p^2)' \cos \theta$, заведомо малый (в отношении $\sim m/M$) по сравнению с членом $(v f_1/l) \cos \theta (s_0)$.

и s_1 - выражения (22.

5) с f_0 или f_1 вместо f).

Умножив это уравнение на $P_0 = 1$ или на $P_1 = \cos \theta$ и проинтегрировав его по $\bar{d} \cos \theta$, получим два уравнения:

$$\frac{1}{p^2} (p^2 S)' = 0, \quad S = -\frac{1}{lM} (p^2 f_0 + mpT f'_0) - \frac{eE}{3} f_1$$

$$f_1 = \frac{eEl}{v} f'_0$$

Выражение S представляет собой плотность потока частиц в импульсном пространстве, измененного электрическим полем.

Из (22.

9) следует, что $S = \text{const} / p^2$. Но поток S должен быть конечен при всех значениях p ; поэтому $\text{const} = 0$. Подставив теперь f_1 из (22.

10) в уравнение $S = 0$, найдем уравнение, определяющее функцию $f_0(p)$:

$$\left[pT + \frac{(eEl)^2 M}{3p} \right] f_0' + \frac{p^2}{m} f_0 = 0$$

До сих пор мы не делали никаких предположений о виде функции $l(p)$, а интеграл уравнения первого порядка (22.

11) может быть написан с произвольной функцией $l(p)$. С целью получения более конкретных результатов предположим $l = \text{const}$, что эквивалентно предположению о независимости сечения σ_t от импульса).

Тогда интегрирование уравнения (22.

11) дает

$$f_0(p) = \text{const} \cdot \left(\frac{\varepsilon}{T} + \frac{\gamma^2}{6} \right)^{\gamma^2/6} e^{-\varepsilon/T}$$

где

$$\gamma = \frac{eEl}{T} \sqrt{\frac{M}{m}}$$

Для функции же $f_1(p)$ из (22.

10) и (22.

12) имеем

$$f_1 = -f_0 \sqrt{\frac{m}{M}} \frac{\gamma \varepsilon / T}{\varepsilon / T + \gamma^2 / 6}.$$

Величина γ является тем параметром, который характеризует степень воздействия поля на распределение электронов.

Пре-дельный случай слабых полей отвечает неравенству $\gamma \ll 1$. В первом приближении $f_0(p)$ сводится тогда к невозмущенному максвелловскому распределению ($f_0 \sim e^{-\varepsilon/T}$, $\bar{\varepsilon} = 3T/2$), а

$$f_1 = -\frac{eEl}{T} f_0, \quad \gamma \ll 1$$

Возникающий в газе электрический ток определяется подвижностью электронов

$$b = \frac{\bar{v}_z}{-eE} = \frac{1}{-eEN_e} \int v \cos \theta \cdot f d^3p = -\frac{1}{3eEN_e} \int v f_1 d^3p$$

N_e - плотность числа электронов.

Простое вычисление с f из (22. 15) дает для подвижности в слабом поле

$$b_0 = \frac{2^{3/2} l}{3\pi^{1/2} (mT)^{1/2}}$$

Как и следовало, это выражение удовлетворяет соотношению Эйнштейна $D = bT$, где D - коэффициент диффузии (11.10).

Смысл неравенства $\gamma \ll 1$ как критерия слабости поля можно понять из следующих простых соображений.

Очевидно, что влияние поля на распределение электронов будет слабым до тех пор, пока энергия, набираемая электроном за время его свободного пробега, будет мала по сравнению с энергией, отдаваемой им атому при столкновении.

Первая из них есть eEl , а вторая -

$$\delta \varepsilon \sim V \delta P \sim V p \sim \sqrt{\frac{T}{M}} \sqrt{Tm}$$

(P и V - импульс и скорость атома; изменение δP порядка величины импульса электрона).
Сравнение обоих выражений и приводит к требуемому критерию.
В обратном случае сильных полей ($\gamma \gg 1$) находим ¹⁾

$$f_0(p) = A \exp\left(-\frac{3\varepsilon^2}{\gamma^2 T^2}\right), \quad A = \frac{3^{3/4} N_e}{2^{3/2} \pi \Gamma(3/4) (m\gamma T)^{3/2}}$$

$$f_1 = -6\sqrt{\frac{m}{M}} \frac{\varepsilon}{T\gamma} f_0$$

Средняя энергия электронов:

$$\bar{\varepsilon} = \frac{2}{\pi} \sqrt{\frac{2M}{3m}} \Gamma^2\left(\frac{5}{4}\right) eEl = 0,43 eEl \sqrt{\frac{M}{m}}$$

а их подвижность

$$b = \frac{4\Gamma(5/4)l^{1/2}}{3^{3/4}\pi^{1/2}(mM)^{1/4}(eE)^{1/2}}$$

Остается выяснить критерий сходимости разложения (22.7).

Для этого замечаем, что его последовательные члены связаны, По порядку величины, соотношением

$$\frac{eE}{mv} f_{n-1} \sim \frac{v}{l} f_n$$

(после подстановки (22.7), умножения на $P_n(\cos\theta)$ и интегрирования по $d\cos\theta$ в левой части кинетического уравнения остается член с f_{n-1} , а в интеграле столкновений - лишь с f_n).

При $\gamma \ll 1$ средняя энергия электрона $\bar{\varepsilon} \sim T$, и из (22.22) имеем

$$\frac{f_n}{f_{n-1}} \sim \frac{eEl}{T} \ll \left(\frac{m}{M}\right)^{1/2} \ll 1.$$

В случае же больших полей, когда $\gamma \gg 1$, средняя энергия $\bar{\varepsilon} \sim eEl(M/m)^{1/2}$, так что снова

$$f_n/f_{n-1} \sim (m/M)^{1/2} \ll 1$$

Таким образом, сходимость разложения обеспечивается малостью отношения m/M .

7.1.11 Fluctuations in a Weakly Ionized Nonequilibrium Gas

пока не интересно.

мотивация

Theory

7.1.12 Overview of Applications of Brownian Motion and Similar Models

(I'll write explicitly)

7.2 Diffusion and Brownian Motion: Advanced Effects

7.2.1 Recombination and Ionization

суть рекомбинации

Установление равновесной степени ионизации в частично ионизованном газе осуществляется путем различных элементарных актов столкновительной ионизации и обратной рекомбинации сталкивающихся заряженных частиц.

В простейшем случае, когда в газе имеется помимо электронов лишь один сорт ионов, процесс установления ионизационного равновесия описывается уравнением вида

$$\frac{dN_e}{dt} = \beta - \alpha N_e N_i$$

Первый член... (???) столкновениях нейтральных атомов или путем ионизации атомов фотонами);

это число не зависит от наличных плотностей электронов N_e и ионов N_i .

Второй же член дает убыль числа электронов благодаря их рекомбинации с ионами; величину α называют коэффициентом рекомбинации.

Процесс рекомбинации обычно весьма медлен по сравнению с остальными процессами установления равновесия в плазме.

Дело в том, что образование нейтрального атома при столкновении иона с электроном требует уноса освобождающейся энергии (энергии связи электрона в атоме). Эта энергия может излучиться в виде фотона (радиационная рекомбинация); в таком случае медленность процесса связана с малостью квантовоэлектродинамической вероятности излучения. Освобождающаяся энергия может быть также передана третьей частице - нейтральному атому; в этом случае медленность процесса связана с малой вероятностью тройных столкновений. Все это приводит к тому, что рекомбинацию часто имеет смысл изучать в условиях, когда распределение всех частиц можно считать максвелловским.

В равновесии производная dN_e/dt обращается в нуль. Отсюда следует, что величины α и β в (24.1) связаны друг с другом соотношением

$$\beta = \alpha N_{0e} N_{0i}$$

где N_{0e} и N_{0i} - равновесные плотности электронов и ионов, определяющиеся соответствующими термодинамическими формулами

Коэффициент радиационной рекомбинации

Коэффициент радиационной рекомбинации вычисляется непосредственно по сечению рекомбинации $\sigma_{\text{рек}}$ при столкновении электрона с неподвижным ионом (скоростью иона можно пренебречь по сравнению со скоростью электрона):

$$\alpha = \langle v_e \sigma_{\text{рек}} \rangle$$

где усреднение производится по максвелловскому распределению скоростей электрона v_e .

случаи учета рекомбинации

Радиационная рекомбинация существенна, однако, лишь в достаточно разреженном газе, когда тройными столкновениями частиц можно вовсе пренебречь.

В менее разреженном газе основным механизмом является рекомбинация с участием третьей частицы - нейтрального атома.

Именно этот механизм мы и рассмотрим теперь подробнее.

При столкновении с атомами энергия электрона изменяется малыми порциями.

Поэтому процесс рекомбинации начинается с образования сильно возбужденного атома, а при дальнейших столкновениях этого атома происходит постепенное опускание электрона на все более низкие уровни.

диффузия по энергии

Такой характер процесса позволяет рассматривать его как «диффузию по энергии» захваченного электрона и соответственно применить к нему уравнение Фоккера-Планка (???!!!!)

Введем функцию распределения захваченных электронов по их отрицательным энергиям ε .

Основную роль будет, естественно, играть «диффузия» по области энергий $|\varepsilon| \sim T$.

Напомним в этой связи, что температуру надо во всяком случае считать здесь малой по сравнению с ионизационным потенциалом атомов I ; при $T \sim I$ газ был бы уже практически полностью ионизованным.

(та самая теория термача, которую еще не прописал, но разбирал уже)

модель через уравнение Фоккера-Планка

уравнение Фоккера-Планка:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{\partial s}{\partial \varepsilon}, \quad s = -B \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} - Af$$

Как обычно, коэффициент A можно выразить через B из условия $s = 0$ при $f = f_0$, где f_0 - равновесное распределение.

После этого поток s примет вид

$$s = -B f_0 \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \frac{f}{f_0}$$

«Коэффициент диффузии» $B(\varepsilon)$ определяется по общему правилу как

$$B(\varepsilon) = \frac{\sum (\Delta \varepsilon)^2}{2\delta t}$$

где $\Delta \varepsilon$ - изменение энергии возбуждения атома при его столкновении с невозбужденным атомом;

вычисление $B(\varepsilon)$ по этой формуле сводится к решению механической задачи о столкновении и последующему усреднению по скорости невозбужденного атома.

Для нахождения функции $f_0(\varepsilon)$ замечаем, что равновесное распределение по импульсам и координатам для электрона в кулоновском поле заряда ze (заряд иона) дается формулой Больцмана

$$f_0(\mathbf{p}, \mathbf{r}) = (2\pi mT)^{-3/2} e^{-\varepsilon/T}, \quad \varepsilon = \frac{p^2}{2m} - \frac{ze^2}{r}$$

(о ее нормировке см. ниже).

Движение электрона при $|\varepsilon| \sim T \ll I$ квазиклассично, что и позволяет использовать для энергии ε ее классическое выражение. Функция же распределения по ε есть, следовательно,

$$f_0(\varepsilon) d\varepsilon = (2\pi mT)^{-3/2} e^{|\varepsilon|/T} \tau(\varepsilon) d\varepsilon$$

где $\tau(\varepsilon)$ - объем фазового пространства, отвечающий интервалу $d\varepsilon$:

$$\tau(\varepsilon) = \int \delta \left(|\varepsilon| + \frac{p^2}{2m} - \frac{ze^2}{r} \right) d^3x d^3p.$$

(???) Заменив $d^3x d^3p = 4\pi r^2 dr \cdot 4\pi p^2 dp$ и произведя интегрирование, получим

$$\tau(\varepsilon) = \frac{\sqrt{2}\pi^3 (ze^2)^3 m^{3/2}}{|\varepsilon|^{5/2}}$$

Для формулировки условий, определяющих нужное нам решение уравнений (24.4), (24.5), удобно считать, что наличная плотность электронов в газе $N_e \gg N_{0e}$; тогда в (24.1) можно пренебречь скоростью ионизации β , так что убыль N_e будет определяться одной лишь рекомбинацией.

В этих условиях постоянное значение потока s в стационарном решении уравнения (24.4) прямо дает значение коэффициента рекомбинации ($s = \text{const} = -\alpha$), если только функция $f(\varepsilon)$ должным образом нормирована.

Именно, на самых верхних уровнях ($|\varepsilon| \ll T$) электроны находятся в равновесии со свободными электронами; это значит, что должно быть

$$f(\varepsilon)/f_0(\varepsilon) \rightarrow 1 \quad \text{при} \quad |\varepsilon| \rightarrow 0$$

причем нормировка $f_0(\varepsilon)$ должна отвечать одному свободному электрону в единице объема (что и выполнено в (24.7)).

Для нахождения второго граничного условия (при $\varepsilon \rightarrow -\infty$) замечаем, что распределение на глубоких уровнях возбужденного атома не возмущено наличием свободных электронов и не зависит от их числа: оно пропорционально равновесному числу N_{0e} , а не фактическому N_e . При условии $N_e \gg N_{0e}$ эта ситуация выражается граничным условием

$$f(\varepsilon)/f_0(\varepsilon) \rightarrow 0 \quad \text{при} \quad |\varepsilon| \rightarrow \infty$$

Интегрируя уравнение $s = \text{const}$ с граничным условием (24.11), имеем

$$\frac{f}{f_0} = \text{const} \int_0^{|\varepsilon|} \frac{d|\varepsilon|}{B f_0} + 1$$

Константа будет совпадать с $-\alpha$, если определить ее так, чтобы удовлетворилось условие (24.12). Таким образом, находим окончательно

$$\frac{1}{\alpha} = \int_0^\infty \frac{d|\varepsilon|}{B f_0} = \frac{2T^{3/2}}{\pi^{3/2} (ze^2)^3} \int_0^\infty \frac{e^{-|\varepsilon|/T} |\varepsilon|^{5/2}}{B(-|\varepsilon|)} d|\varepsilon|$$

Эта формула относится к процессу, в котором роль «третьего тела» играет невозбужденный атом. Если газ уже сильно ионизован (что, однако, еще совместимо с условием $T \ll I$) и достаточно плотен, основная роль может перейти к рекомбинации с участием второго электрона в качестве третьего тела. Скорость рекомбинации становится тогда пропорциональной $N_e^2 N_i$, так что коэффициент рекомбинации, определенный по-прежнему согласно (24.1), будет сам пропорционален N_e . Поскольку релаксация по энергии при электронных соударениях происходит быстро, изложенный метод вычисления коэффициента рекомбинации в этом случае неприменим.

ЛЛ10-28.1 коэффициент радиационной рекомбинации с захватом электрона на основное состояние атома водорода при температурах $T \ll I$

(что это?)

Найти коэффициент радиационной рекомбинации с захватом электрона на основное состояние атома водорода при температурах $T \ll I$) $I = e^4 m / (2h^2)$ - потенциал ионизации атома водорода).

Сечение рекомбинации медленного электрона с неподвижным протоном на основной уровень водородного атома есть

$$\sigma_{\text{рек}} = \frac{2^{10} \pi^2 (e^2 / \hbar c) a_B^2 I^2}{3(2, 71 \dots)^4 m^2 c^2 v_e^2}$$

где v_e - скорость электрона, $a_B = \frac{\hbar^2}{me^2}$ - боровский радиус (см. IV, § 56, формулы (56.13), (56.14)). Среднее значение $\langle v_e^{-1} \rangle = \left(\frac{2m}{\pi T}\right)^{1/2}$. В результате получим согласно (24.3):

$$\alpha = \frac{2^{10} \pi^{3/2}}{3(2,71)^4} \left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^3 \frac{a_B^3 I}{\hbar} \left(\frac{I}{T}\right)^{1/2} = 35 \left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^3 \frac{a_B^3 I}{\hbar} \left(\frac{I}{T}\right)^{1/2}$$

ЛЛ10-28.1 коэффициент рекомбинации в каком-то очень упрощении

Определить коэффициент рекомбинации согласно (24.13), пренебрегая влиянием связи электрона в возбужденном атоме на процесс его столкновения с невозбужденным атомом и полагая транспортное сечение этих столкновений независимым от скорости.

"Коэффициент диффузии" $B(\varepsilon)$ вычисляется аналогично тому, как это делалось в (???) и равен

$$B(\varepsilon) = \frac{N}{3m} \langle v_{ar}^2 \rangle \langle \sigma_t p^3 \rangle$$

Здесь N - плотность атомов в газе, m - масса электрона, v_{ax} - относительная скорость возбужденного и невозбужденного атомов.

Скорости v_{ar} распределены по Максвеллу с приведенной массой ($M/2$, где M - масса атома) в качестве массы частицы; поэтому $\langle v_{ar}^2 \rangle = 6T/M$.

Далее, p в (1) есть импульс электрона в поле иона; усреднение $\sigma_t p^3$ производится по области фазового пространства электрона $\tau(\varepsilon)$, отвечающей заданному значению $|\varepsilon|$. При $\sigma_t = \text{const}$ находим

$$\langle \sigma_t p^3 \rangle = \frac{\sigma_t}{\tau(\varepsilon)} \int p^3 \delta\left(|\varepsilon| + \frac{p^2}{2m} - \frac{ze^2}{r}\right) d^3x d^3p = \frac{32\sqrt{2}}{3\pi} \sigma_t m |\varepsilon|^{3/2}$$

7.2.2 Overview of Other Mathematical Models of Diffusion

интереснейшие модели диффузии

(другие - в теорию про диффузию в других главах)

Колоколов.з.? диффузии на прямой со случайно расположенными поглощающими центрами

На прямой случайно раскиданы ловушки. Вероятность найти ловушку на отрезке $[x, x+dx]$ есть $p \cdot dx$. Изначально на прямой были равномерно распределены броуновские частицы с плотностью n_0 . Найти $\langle n(t) \rangle$ при $t \gg 1$, где вреднее подразумевается в смысле среднего значения по всей прямой.

7.2.3 Applications of Diffusion in Programming

(???)

диффузионный алгоритм и моделирование

(нужно будет - напишу тут.)

алгоритм

C++ реализация

вкратце обсудим этот код

7.2.4 Brownian Trees

(нужно будет - напишу тут.)

обзор

результаты модели

модель

программная реализация

тут тот код, который уже есть

7.3 Hydrodynamic Limit

Посмотрим на гидродинамический предел кинетической теории (пока не уверен, что тут это писать нужно, но ладно, пока сойдет.)

7.3.1 Hydrodynamic Equations: Derivation

вывод

Рассмотрим вывод уравнений гидродинамики (фактически, вывод макроскопических законов сохранения) из кинетического уравнения Больцмана для однокомпонентного газа с функцией распределения $f(t, \mathbf{r}, \mathbf{p})$, нормированной по импульсам так, что $\int f(t, \mathbf{r}, \mathbf{p}) d^3p = n(t, \mathbf{r})$, где $n(t, \mathbf{r})$ - плотность числа частиц газа.

Классическое уравнение Больцмана для газа одноатомных молекул с двойными столкновениями имеет общий вид

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

где учтена внешняя сила $\mathbf{F}$, которая может действовать на частицу во внешнем поле (для упрощения примем, что она не зависит от скорости частиц).

Допустим, что это сила электрического поля $\mathbf{F} = -e\mathbf{E}$, действующая на заряженные частицы), и где в интеграле столкновений функции распределения имеют аргументы $f_1(t, \mathbf{r}, \mathbf{p}_1)$, $f'(t, \mathbf{r}, \mathbf{p}')$, $f'_1(t, \mathbf{r}, \mathbf{p}'_1)$, с учетом закона сохранения импульса в бинарных столкновениях

$$\mathbf{p} + \mathbf{p}_1 = \mathbf{p}' + \mathbf{p}'_1.$$

Умножив правую и левую части этого уравнения на некоторую функцию импульса $\varphi(\mathbf{p})$ и проинтегрировав по всем импульсам $\mathbf{p}$, получим, что

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \int d^3p f(t, \mathbf{r}, \mathbf{p}) \varphi(\mathbf{p}) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \int d^3p \mathbf{v} f(t, \mathbf{r}, \mathbf{p}) \varphi(\mathbf{p}) + \mathbf{F} \cdot \int d^3p \frac{\partial f(t, \mathbf{r}, \mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} \varphi(\mathbf{p}) = \\ &= \frac{\partial}{\partial t} \int d^3p f(t, \mathbf{r}, \mathbf{p}) \varphi(\mathbf{p}) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \int d^3p \mathbf{v} f(t, \mathbf{r}, \mathbf{p}) \varphi(\mathbf{p}) - \mathbf{F} \cdot \int d^3p f(t, \mathbf{r}, \mathbf{p}) \frac{\partial \varphi(\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} = \\ &= \iint d^3p d^3p_1 v_{\text{отн}} d\sigma_{\mathbf{p}\mathbf{p}_1} \varphi(\mathbf{p}) (f' f'_1 - f f_1) \equiv \\ &\equiv \frac{1}{4} \iint d^3p d^3p_1 v_{\text{отн}} d\sigma_{\mathbf{p}\mathbf{p}_1} \{ \varphi(\mathbf{p}) + \varphi(\mathbf{p}_1) - \varphi(\mathbf{p}') - \varphi(\mathbf{p}'_1) \} (f' f'_1 - f f_1) \end{aligned}$$

Выше мы неявно проделали процедуру симметризации правой части уравнения, и учли, что $d^3p' d^3p'_1 = d^3p d^3p_1$, $d\sigma_{\mathbf{p}'\mathbf{p}'_1} = d\sigma_{\mathbf{p}\mathbf{p}_1}$, и что модуль относительной скорости $v_{\text{отн}}$ также является инвариантным при упругих бинарных столкновениях.

Видно, что правая часть обращается в ноль, если выполняется условие "сохранения"

$$\varphi(\mathbf{p}) + \varphi(\mathbf{p}_1) = \varphi(\mathbf{p}') + \varphi(\mathbf{p}'_1).$$

Три гидродинамических уравнения (макроскопических закона сохранения) у нас получатся, если мы выберем $\varphi(\mathbf{p}) = 1$, $\varphi(\mathbf{p}) = p_\alpha$ и $\varphi(\mathbf{p}) = p^2/(2m)$, соответствующие законам сохранения числа частиц, импульса и энергии в бинарных упругих столкновениях.

Первое гидродинамическое уравнение

Первый закон сохранения мы получим, если выберем

$$\varphi(\mathbf{p}) = 1$$

или в более общем случае, $\varphi(\mathbf{p}) = \text{const}$.

Тогда правая часть обращается в ноль, и из условия равенства нулю левой части мы сразу получим уравнение

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial(n\mathbf{u})}{\partial \mathbf{r}} = 0, \quad \text{или} \quad \frac{\partial n}{\partial t} + \text{div}(n\mathbf{u}) = 0,$$

где $n(t, \mathbf{r}) = \int d^3p f(t, \mathbf{r}, \mathbf{p})$ - локальная плотность частиц газа, а

$$\mathbf{u}(t, \mathbf{r}) = \frac{\int d^3p \mathbf{p} f(t, \mathbf{r}, \mathbf{p})}{\int d^3p f(t, \mathbf{r}, \mathbf{p})} \equiv \frac{1}{n} \int d^3p \mathbf{p} f(t, \mathbf{r}, \mathbf{p}) \equiv \langle \mathbf{v} \rangle$$

есть средняя макроскопическая скорость молекул газа в точке $\mathbf{r}$ в момент времени t .

Это есть уравнение непрерывности, являющееся следствием закона сохранения числа частиц газа в бинарных столкновениях

Второе уравнение гидродинамики как закон сохранения импульса

Второе уравнение мы получим, если выберем

$$\varphi(\mathbf{p}) = p_\alpha \equiv mv_\alpha,$$

то есть в виде отдельной компоненты импульса частицы (здесь m - масса молекулы газа).

В силу закона сохранения импульса в бинарных столкновениях правая часть опять обращается в тождественный ноль.

В итоге наше уравнение есть уравнение на левую часть, и с учетом правила усреднения $\langle A \rangle = \frac{\int A f d^3p}{\int f d^3p} \equiv \frac{1}{n} \int A f d^3p$, домножим на понятно что, получим:

$$\frac{\partial (mnu_\alpha)}{\partial t} + \frac{\partial \Pi_{\alpha\beta}}{\partial x_\beta} = nF_\alpha.$$

В этом уравнении симметричный тензор $\Pi_{\alpha\beta}$ есть тензор плотности потока импульса, он равен:

$$\begin{aligned} \Pi_{\alpha\beta} &= \int d^3p m v_\alpha v_\beta f(t, \mathbf{r}, \mathbf{p}) \equiv nm \langle v_\alpha v_\beta \rangle \equiv \\ &\equiv mnu_\alpha u_\beta + mn \langle (v_\alpha - u_\alpha)(v_\beta - u_\beta) \rangle = \\ &= mnu_\alpha u_\beta + mn \left\langle (v_\alpha - u_\alpha)(v_\beta - u_\beta) - \frac{\delta_{\alpha\beta}}{3} (\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 \right\rangle + \frac{\delta_{\alpha\beta}}{3} mn \langle (\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 \rangle = \\ &= mnu_\alpha u_\beta + P\delta_{\alpha\beta} - \sigma'_{\alpha\beta} \end{aligned}$$

Здесь мы определили давление газа как $P(t, \mathbf{r}) = mn \langle (\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 \rangle / 3$, и диссипативную часть тензора плотности потока импульса $\sigma'_{\alpha\beta}$, которая называется тензором вязких напряжений (и который имеет в нашем случае однокомпонентного газа нулевой след):

$$\sigma'_{\alpha\beta} = -mn \left\langle (v_\alpha - u_\alpha)(v_\beta - u_\beta) - \frac{\delta_{\alpha\beta}}{3} (\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 \right\rangle, \quad \sigma'_{\alpha\alpha} = 0$$

С учётом этого наше второе гидродинамическое уравнение запишется в виде

$$\frac{\partial(mnu_\alpha)}{\partial t} + \frac{\partial P}{\partial x_\alpha} + \frac{\partial(mnu_\alpha u_\beta)}{\partial x_\beta} = \frac{\partial \sigma'_{\alpha\beta}}{\partial x_\beta} + nF_\alpha$$

или, если переписать его левую часть ещё и с учетом уравнения непрерывности как

$$mn \frac{\partial u_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial P}{\partial x_\alpha} + mn u_\beta \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} + mu_\alpha \underbrace{\left(\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial(nu_\beta)}{\partial x_\beta} \right)}_{=0} \equiv mn \left(\frac{\partial u_\alpha}{\partial t} + u_\beta \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} \right) + \frac{\partial P}{\partial x_\alpha},$$

то окончательно получим это уравнение в виде

$$mn \left(\frac{\partial u_\alpha}{\partial t} + u_\beta \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} \right) + \frac{\partial P}{\partial x_\alpha} = \frac{\partial \sigma'_{\alpha\beta}}{\partial x_\beta} + nF_\alpha,$$

или

$$\rho \frac{du_\alpha}{dt} + \frac{\partial P}{\partial x_\alpha} = \frac{\partial \sigma'_{\alpha\beta}}{\partial x_\beta} + nF_\alpha.$$

Здесь мы ввели плотность газа $\rho = mn$ и обозначение $d/dt = \partial/\partial t + (\mathbf{u} \cdot \nabla)$ для так называемой субстанциональной производной.

Фактически это уравнение является уравнением движения (уравнением Ньютона) в применении к элементу объема газа:

$$\rho du_\alpha/dt = f_\alpha = -(\nabla P)_\alpha + \partial \sigma'_{\alpha\beta} / \partial x_\beta + nF_\alpha$$

Третье уравнение гидродинамики как закон сохранения энергии

Последнее, третье гидродинамическое уравнение мы получим при выборе

$$\varphi(\mathbf{p}) = \mathbf{p}^2 / (2m) \equiv mv^2 / 2,$$

то есть в виде кинетической энергии молекулы газа.

В силу закона сохранения кинетической энергии в упругих бинарных столкновениях правая часть проинтегрированного по импульсам кинетического уравнения снова обращается в ноль.

Из условия обращения левой части в ноль мы получим следующее макроскопическое уравнение для сохранения энергии:

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \text{div } \mathbf{q} = n(\mathbf{F} \cdot \mathbf{u})$$

где $\varepsilon = n \langle mv^2/2 \rangle$ - плотность энергии газа и $\mathbf{q} = n \langle \mathbf{v} mv^2/2 \rangle$ - плотность потока энергии.

Действительно, после явного выделения средней скорости и потока газа, имеем:

$$\varepsilon = \frac{mn}{2} (\langle (\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 \rangle + \mathbf{u}^2) = \frac{3P}{2} + \frac{mnu^2}{2},$$

поэтому

$$\mathbf{q} = \frac{mn}{2} \langle \{(\mathbf{v} - \mathbf{u}) + \mathbf{u}\} \{(\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 + 2\mathbf{u} \cdot (\mathbf{v} - \mathbf{u}) + \mathbf{u}^2\} \rangle$$

или в компонентах

$$\begin{aligned} q_\alpha &= \frac{mn}{2} \left(\langle (v - u)_\alpha (\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 \rangle + u_\alpha \langle (\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 \rangle + 2u_\beta \langle (v - u)_\alpha (v - u)_\beta \rangle + u_\alpha u^2 \right) = \\ &= \frac{mn}{2} \left(\langle (v - u)_\alpha (\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 \rangle + u_\alpha u^2 \right) + u_\beta \cdot mn \underbrace{\left\langle (v - u)_\alpha (v - u)_\beta - \frac{\delta_{\alpha\beta}}{3} (\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 \right\rangle}_{-\sigma'_{\alpha\beta}} + \\ &\quad + \frac{mn}{2} \left(\frac{5u_\alpha \langle (\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 \rangle}{3} \right) = u_\alpha \left(\frac{5P}{2} + \frac{mnu^2}{2} \right) + q'_\alpha - \sigma'_{\alpha\beta} u_\beta \quad (7.2) \end{aligned}$$

где диссипативная часть потока тепловой энергии (поток тепла) определяется как

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

Тогда третье гидродинамическое уравнение принимает вид

$$\frac{3}{2} \frac{\partial P}{\partial t} + \frac{1}{2} \frac{\partial (mnu^2)}{\partial t} + \operatorname{div} \left\{ \mathbf{u} \left(\frac{5P}{2} + \frac{mnu^2}{2} \right) \right\} + \operatorname{div} \mathbf{q}' = \frac{\partial (\sigma'_{\alpha\beta} u_\beta)}{\partial x_\alpha} + n(\mathbf{F} \cdot \mathbf{u}).$$

Если его переписать в развернутом виде и учесть первые два уравнения, то есть как

$$\begin{aligned} \frac{3}{2} \frac{\partial P}{\partial t} + \frac{u^2}{2} \frac{\partial (mn)}{\partial t} + \underbrace{mnu_\alpha \frac{\partial u_\alpha}{\partial t}}_{5/2 \rightarrow 3/2} + \frac{5P}{2} \operatorname{div} \mathbf{u} + \underbrace{\frac{5u_\alpha}{2} \frac{\partial P}{\partial x_\alpha}}_{5/2 \rightarrow 3/2} + \frac{mnu^2}{2} \operatorname{div} \mathbf{u} + \\ + u_\alpha \left(\frac{u^2}{2} \frac{\partial (mn)}{\partial x_\alpha} + \underbrace{mnu_\beta \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha}} \right) + \operatorname{div} \mathbf{q}' = \underbrace{u_\alpha \frac{\partial \sigma'_{\alpha\beta}}{\partial x_\beta}} + \sigma'_{\alpha\beta} \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} + \underbrace{nF_\alpha u_\alpha}, \quad (7.3) \end{aligned}$$

то это уравнение можно представить в более компактном виде:

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

или

$$\frac{3}{2} \frac{dP}{dt} + \frac{5P}{2} \operatorname{div} \mathbf{u} = \sigma'_{\alpha\beta} \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} - \operatorname{div} \mathbf{q}'$$

добавление температуры

Теперь, рассматривая классический газ, введем локальную температуру $T(t, \mathbf{r})$ газа согласно определению $3T/2 = \langle m(\mathbf{v} - \mathbf{u})^2/2 \rangle$, обобщающему понятие температуры газа в равновесном случае.

Из этого определения следует, что ранее введенное давление газа $P(t, \mathbf{r}) = mn \langle (\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 \rangle / 3$ связано с температурой как $P = nT$, и это есть точное соотношение в рамках нашей модели.

Таким образом, в приближении, соответствующем малому газовому параметру $na^3 \ll 1$ и учету только парных столкновений, локально выполняется уравнение состояния идеального классического больцмановского газа в виде $P(t, \mathbf{r}) = n(t, \mathbf{r})T(t, \mathbf{r})$.

Преобразуем третье гидродинамическое уравнение, выражающее закон сохранения энергии, с учетом равенства $P = nT$.

Его левая часть после подстановки $P = nT$ преобразуется к виду

$$\frac{3}{2} \frac{d(nT)}{dt} + \frac{5nT}{2} \operatorname{div} \mathbf{u} = \frac{3n}{2} \frac{dT}{dt} + \frac{3T}{2} \frac{dn}{dt} + \frac{3T}{2} n \operatorname{div} \mathbf{u} + nT \operatorname{div} \mathbf{u}.$$

С учетом уравнения непрерывности $\partial n / \partial t + \operatorname{div}(n\mathbf{u}) \equiv \partial n / \partial t + (\mathbf{u} \cdot \nabla)n + n \operatorname{div} \mathbf{u} \equiv \partial n / \partial t + n \operatorname{div} \mathbf{u} = 0$, оно приобретает вид уравнения на температуру газа

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

что эквивалентно уравнению

$$\frac{3n}{2} \left(\frac{\partial T}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla)T + \frac{2}{3}T \operatorname{div} \mathbf{u} \right) = \sigma'_{\alpha\beta} \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} - \operatorname{div} \mathbf{q}'.$$

обсуждение границ применимости

Полученные три макроскопических уравнения (закона сохранения) для величин $n(t, \mathbf{r})$, $\mathbf{u}(t, \mathbf{r})$ и $T(t, \mathbf{r})$ бессодержательны до тех пор, пока не установлена связь между диссипативными потоками $\sigma'_{\alpha\beta}$ и $\mathbf{q}'$, с одной стороны, и этими средними локальными характеристиками газа.

Для того, чтобы система уравнений переноса (гидрогазодинамических уравнений) стала замкнутой, следует решить кинетическое уравнение

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{F} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = I_{\text{coll}}(f) \approx -\frac{f - f_0}{\tau},$$

где мы записали интеграл столкновений в τ -приближении, и с помощью полученного решения определить вид неизвестных потоков.

Для состояний, слабо отличающихся от равновесного, когда градиенты макроскопических величин малы, решение позволяет найти метод Энского-Чепмена.

Мы будем считать, что доминирующей в кинетическом уравнении является правая, столкновительная часть.

Это значит, что столкновения частиц весьма часты и поэтому можно думать, что благодаря частым столкновениям в газе устанавливается распределение, весьма близкое к равновесному максвелловскому распределению.

Оно и должно иметь максвелловский вид (занулять точный интеграл столкновений):

$$f_0(t, \mathbf{p}, \mathbf{r}) = \frac{n(t, \mathbf{r})}{(2\pi mT(t, \mathbf{r}))^{3/2}} \exp\left(-\frac{(\mathbf{p} - m\mathbf{u}(t, \mathbf{r}))^2}{2mT(t, \mathbf{r})}\right) \equiv \frac{n(t, \mathbf{r})}{(2\pi mT(t, \mathbf{r}))^{3/2}} e^{-\frac{m(\mathbf{v} - \mathbf{u}(t, \mathbf{r}))^2}{2T(t, \mathbf{r})}},$$

но параметры $n(t, \mathbf{r})$, $T(t, \mathbf{r})$ и $\mathbf{u}(t, \mathbf{r})$, входящие в него, должны рассматриваться как функции текущего времени t и локальной координаты $\mathbf{r}$.

Им мы должны придать конкретный смысл точных локальной средней плотности числа частиц, локальной средней скорости течения газа и локальной температуры.

Близость этого распределения к равновесному должна обеспечиваться малостью пространственных и временных производных этих макроскопических величин, а само это распределение нулевого приближения называется локально-равновесным распределением.

Физически понятно, что локально-равновесное распределение устанавливается за время порядка τ , то есть за среднее время между двумя последующими столкновениями, в то время как дальнейшая релаксация к полному равновесию в этом, гидродинамическом режиме, происходит за времена $t \gg \tau$.

Критерий применимости гидродинамического режима понятен:

$$\tau/t_{\text{макро}} \ll 1,$$

где $t_{\text{макро}}$ - характерные макроскопические времена в рассматриваемой задаче.

Этот критерий можно переписать через отношение длин

$$\ell/L \ll 1,$$

где $\ell \sim \tau v \sim 1/(n\sigma)$ - средняя дина свободного пробега молекулы между двумя её последовательными столкновениями, а $L \sim vt_{\text{макро}}$ - характерный макроскопический размер системы (или характерная макроскопическая длина в нашей конкретной задаче, например, длина звуковой Волны в задаче о поглощении звука).

Последний введенный параметр называется числом Кнудсена и обозначается как $\text{Kn} = \ell/L$.

Таким образом, рассматриваемый сейчас нами режим, называемый гидродинамическим, соответствует малым числам Кнудсена, $\text{Kn} \ll 1$.

Обратный же случай, когда $\text{Kn} \gg 1$, называется кнудсеновским, или свободно-молекулярным режимом.

параметры при локально-равновесном распределении

Что же касается диссипативных потоков, именно,

$$\sigma'_{\alpha\beta} = -mn \left\langle (v_\alpha - u_\alpha)(v_\beta - u_\beta) - \frac{\delta_{\alpha\beta}}{3}(\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 \right\rangle$$

и

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

то в локально-равновесном распределении вследствие его изотропии они обращаются в тождественный ноль,

$$\sigma'^{(\text{л.р.})}_{\alpha\beta} = -mn \left\langle (v_\alpha - u_\alpha)(v_\beta - u_\beta) - \frac{\delta_{\alpha\beta}}{3}(\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 \right\rangle_0 \equiv 0,$$

$$q'^{(\text{л.р.})}_\alpha = \frac{mn}{2} \langle (v - u)_\alpha (\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 \rangle_0 \equiv 0,$$

и для их определения в гидродинамическом приближении необходимо учесть поправку к локально-равновесному распределению.

Решение кинетического уравнения в τ -приближении методом Чепмана-Энского

Теперь становится понятной схема получения замкнутых гидрогазодинамических уравнений в методе Энского-Чепмена.

Решение нулевого приближения нам известно, и надо найти поправку δf что бы, используя её, найти диссипативные потоки $\sigma'_{\alpha\beta}$ и q' .

В гидродинамическом режиме и в τ -приближении δf находится элементарно:

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

Рассмотрим в этой формуле справа выражение в скобках, куда нужно подставить локально-равновесную функцию распределения

$$f_0(t, \mathbf{r}, \mathbf{v}) = \left\{ n(t, \mathbf{r}) / [2\pi m T(t, \mathbf{r})]^{3/2} \right\} \times \exp \left(-\frac{m[\mathbf{v} - \mathbf{u}(t, \mathbf{r})]^2}{2T(t, \mathbf{r})} \right).$$

В результате получим, что

$$\begin{aligned} -\frac{\delta f}{\tau} &= \frac{\partial f_0}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{F} \cdot \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{p}} = \\ &= \frac{f_0}{n} \left(\frac{\partial n}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial n}{\partial \mathbf{r}} \right) - \frac{3f_0}{2T} \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial T}{\partial \mathbf{r}} \right) + \\ &+ \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial T}{\partial \mathbf{r}} \right) \cdot \frac{m(\mathbf{v} - \mathbf{u})^2}{2T} \cdot \frac{f_0}{T} + f_0 \cdot \frac{m(\mathbf{v} - \mathbf{u})}{T} \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right) - (\mathbf{F} \cdot (\mathbf{v} - \mathbf{u})) \frac{f_0}{T} \quad (7.4) \end{aligned}$$

Теперь заменим все производные по времени с помощью полученных ранее гидрогазодинамических уравнений, рассматривая их в локально-равновесном, бездиссипативном приближении, и со сделанной подстановкой $P = nT$.

Поскольку в локально-равновесном приближении диссипативные потоки зануляются, то в этом, нулевом приближении,

$$\partial n / \partial t + \operatorname{div}(n\mathbf{u}) = 0,$$

$$\rho d\mathbf{u}/dt + \nabla P \equiv \rho \partial \mathbf{u} / \partial t + \rho(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \nabla P = n\mathbf{F},$$

Получаем уравнение бездиссипативной гидродинамики идеальной жидкости или газа:

$$dT/dt + (2/3)T \operatorname{div} \mathbf{u} \equiv \partial T / \partial t + (\mathbf{u} \cdot \nabla) T + (2/3)T \operatorname{div} \mathbf{u} = 0$$

Тогда получим, уже для поправки к функции распределения, что

$$\begin{aligned} -\frac{\delta f}{\tau} &\approx \frac{f_0}{n} \left(-\operatorname{div}(n\mathbf{u}) + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial n}{\partial \mathbf{r}} \right) + \frac{f_0}{T} \left(-\frac{3}{2} + \frac{m(\mathbf{v} - \mathbf{u})^2}{2T} \right) \cdot \left(-\frac{2}{3}T \operatorname{div} \mathbf{u} + (\mathbf{v} - \mathbf{u}) \cdot \frac{\partial T}{\partial \mathbf{r}} \right) + \\ &+ \frac{f_0}{T} m(\mathbf{v} - \mathbf{u}) \cdot \left(-\frac{\nabla(nT)}{mn} + ((\mathbf{v} - \mathbf{u}) \cdot \nabla) \mathbf{u} + \frac{\mathbf{F}}{m} \right) - (\mathbf{F} \cdot (\mathbf{v} - \mathbf{u})) \frac{f_0}{T} \quad (7.5) \end{aligned}$$

Легко увидеть, что все члены, содержащие ∇n и силу $\mathbf{F}$, сокращаются.

В результате:

$$\begin{aligned} -\frac{\delta f}{\tau} &= \frac{f_0}{T} \left\{ ((\mathbf{v} - \mathbf{u}) \cdot \nabla T) \left(\frac{m(\mathbf{v} - \mathbf{u})^2}{2T} - \frac{5}{2} \right) - \frac{m(\mathbf{v} - \mathbf{u})^2}{3} \operatorname{div} \mathbf{u} + m(\mathbf{v} - \mathbf{u})((\mathbf{v} - \mathbf{u}) \cdot \nabla) \mathbf{u} \right\} \equiv \\ &\equiv \frac{f_0}{T} \left\{ ((\mathbf{v} - \mathbf{u}) \cdot \nabla T) \left(\frac{m(\mathbf{v} - \mathbf{u})^2}{2T} - \frac{5}{2} \right) + m(v - u)_\alpha (v - u)_\beta \underbrace{\left[\frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} \right) - \frac{\delta_{\alpha\beta}}{3} \operatorname{div} \mathbf{u} \right]}_{\equiv \frac{1}{2} U_{\alpha\beta}} \right\}. \end{aligned}$$

Используя обозначения $\mathbf{v}' = \mathbf{v} - \mathbf{u}$ и $U_{\alpha\beta} = \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} - \frac{2}{3}\delta_{\alpha\beta} \operatorname{div} \mathbf{u}$ (причем $U_{\alpha\alpha} = 0$), представим окончательное выражение для поправки к функции распределения δf в компактном виде

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

Диссипативные потоки и теплопроводность

Вычислим диссипативные потоки с учетом полученной поправки к локально равновесному распределению.

Вычисление потока тепловой энергии $\mathbf{q}' = n \langle m \mathbf{v}' v'^2 / 2 \rangle$ дает следующее (сразу учтем очевидный факт, что ненулевой вклад в $\mathbf{q}'$ возникает только от члена с ∇T в δf):

$$\begin{aligned} q'_\alpha &= \int d^3 p \delta f v'_\alpha \frac{m v'^2}{2} = \\ &= - \int d^3 p \frac{f_0 \tau (v')}{T} \underbrace{v'_\alpha v'_\beta}_{\rightarrow \frac{1}{3} v'^2 \delta_{\alpha\beta}} \nabla_\beta T \left(\frac{m v'^2}{2T} - \frac{5}{2} \right) \frac{m v'^2}{2} = \\ &= - \nabla_\alpha T \int d^3 p \frac{f_0 \tau m}{6T} \left(\frac{m v'^6}{2T} - \frac{5 v'^4}{2} \right) = \\ &= - \nabla_\alpha T \frac{m n}{6T} \left\langle \tau \left(\frac{m v'^6}{2T} - \frac{5 v'^4}{2} \right) \right\rangle_0 = \\ &= - \kappa \nabla_\alpha T, \end{aligned}$$

где нижний индекс '0' означает усреднение по локально-равновесному распределению, а коэффициент κ , называемый коэффициентом теплопроводности, есть

$$\kappa = \frac{nm}{6T} \left\langle \tau (v') \left(\frac{m v'^6}{2T} - \frac{5 v'^4}{2} \right) \right\rangle_0 \stackrel{\tau = \text{const}}{=} \frac{nm\tau}{6T} \left[\frac{m}{2T} \cdot 7 \cdot 15 \left(\frac{T}{m} \right)^3 - \frac{5}{2} \cdot 15 \left(\frac{T}{m} \right)^2 \right] = \frac{5n\tau T}{2m}.$$

Здесь мы использовали тот факт, что для целых положительных чисел n

$$\langle v'^{2n} \rangle_0 = \frac{(T/m)^n}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3 x x^{2n} e^{-x^2/2} = \frac{(T/m)^n 2\pi}{(2\pi)^{3/2}} \int_0^\infty d(x^2) x^{2n+1} e^{-x^2/2} = (2n+1)!! \left(\frac{T}{m} \right)^n.$$

Таким образом мы получили, что $\mathbf{q}' = \mathbf{J} - \kappa \nabla T$, причём с коэффициентом теплопроводности $\kappa = 5n\tau T / (2m)$, вычисленном в τ -приближении с постоянным τ .

По порядку величины

$$\kappa \sim (nT/m)\tau (v_T) \sim n v_T^2 / (n v_T \sigma (v_T)) \sim v_T / \sigma (v_T),$$

где $v_T \sim \sqrt{T/m}$.

Диссипативные потоки и вязкость

Теперь вычислим тензор вязких напряжений $\sigma'_{\alpha\beta} = -mn \langle v'_\alpha v'_\beta - \delta_{\alpha\beta} v'^2 / 3 \rangle$.

Очевидно, что теперь член с ∇T в δf не дает вклада в диссипативный тензор вязких напряжений из-за его нечетности как функции $\mathbf{v}' = \mathbf{v} - \mathbf{u}$.

Тогда сразу можно записать, что

$$\begin{aligned} \sigma'_{\alpha\beta} &= -m \int d^3 p \delta f \left\{ v'_\alpha v'_\beta - \frac{\delta_{\alpha\beta}}{3} v'^2 \right\} = \\ &= \frac{m^2}{2T} \int d^3 p \tau (v') f_0 v'_\mu v'_\nu U_{\mu\nu} \left\{ v'_\alpha v'_\beta - \frac{\delta_{\alpha\beta}}{3} v'^2 \right\} \equiv \\ &\equiv \frac{nm^2 U_{\mu\nu}}{2T} \left\langle \tau v'_\mu v'_\nu \left\{ v'_\alpha v'_\beta - \frac{\delta_{\alpha\beta}}{3} v'^2 \right\} \right\rangle_0 \end{aligned}$$

Поскольку $\langle v'_\mu v'_\nu \rangle_0 = \frac{\langle v'^2 \rangle_0}{3} \delta_{\mu\nu}$, $\langle v'_\alpha v'_\beta v'_\mu v'_\nu \rangle_0 = \frac{\langle v'^4 \rangle_0}{15} (\delta_{\alpha\beta} \delta_{\mu\nu} + \delta_{\alpha\mu} \delta_{\beta\nu} + \delta_{\alpha\nu} \delta_{\beta\mu})$, и $U_{\alpha\alpha} = 0$, то легко видеть, что только четверное среднее дает вклад, и

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

где

$$\eta = \frac{nm^2}{T} \frac{\langle \tau v'^4 \rangle_0}{15} \underbrace{=}_{\tau = \text{const}} \frac{nm^2 \tau}{T} \frac{\langle v'^4 \rangle_0}{15} = n\tau T$$

Здесь мы учли, что $\langle v'^4 \rangle_0 = 15(T/m)^2$.

Отметим соотношение $\eta = m\kappa/c_p$, где $c_p = 5/2$, которое у нас получилось между коэффициентами η и κ .

Полученное выражение для $\sigma'_{\alpha\beta}$ находится в полном соответствии с общим выражением для тензора вязких напряжений в феноменологической гидродинамике, которое имеет вид

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

где η - коэффициент сдвиговой вязкости и ζ - коэффициент второй (объемной) вязкости.

Одновременно мы нашли, что коэффициент сдвиговой вязкости одноатомного газа в τ -приближении с постоянным τ есть $\eta = n\tau T$, а коэффициент второй вязкости тождественно равен нулю в наших приближениях: $\zeta = 0$ (как это и должно быть для нерелятивистского одноатомного газа в нулевом приближении по газовому параметру только с учетом парных столкновений).

Для непостоянного $\tau(v')$ будем иметь по порядку величины

$$\eta \sim nT\tau(v_T) \sim nmv_T^2 / (nv_T\sigma(v_T)) \sim mv_T / \sigma(v_T),$$

где $v_T \sim \sqrt{T/m}$.

Можно заметить, что в нашем случае однокомпонентного газа и во всех наших приближениях вторая вязкость и была обязана оказаться равной нулю из-за строгого условия обращения в нуль следа тензора вязких напряжений $\sigma'_{\alpha\beta} [\sigma'_{\alpha\alpha} = 0]$.

Для того, чтобы получить её ненулевое значение, надо выйти за рамки наших приближений.

Но из наших результатов следует, что для газов и реально должно всегда быть $\zeta \ll \eta$. Однако для жидкостей, где газовый параметр не мал, может оказаться, что $\zeta \sim \eta$.

7.3.2 Overview of Navier–Stokes Equations

уравнение Навье–Стокса: различные формы и обзор

$$\rho \left[\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \nabla) \mathbf{v} \right] = -\operatorname{grad} p + \eta \Delta \mathbf{v} + \left(\zeta + \frac{\eta}{3} \right) \operatorname{grad} \operatorname{div} \mathbf{v}$$

Несжимаемая жидкость

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \nabla) \mathbf{v} = -\frac{1}{\rho} \operatorname{grad} p + \frac{\eta}{\rho} \Delta \mathbf{v}$$

Гидродинамическое уравнение Навье-Стокса

Рассмотрим наше второе гидродинамическое уравнение - уравнение движения элемента объема газа/жидкости

$$mn \left(\frac{\partial u_\alpha}{\partial t} + u_\beta \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} \right) + \frac{\partial P}{\partial x_\alpha} = \frac{\partial \sigma'_{\alpha\beta}}{\partial x_\beta} + nF_\alpha,$$

или

$$\rho \frac{du_\alpha}{dt} = -\frac{\partial P}{\partial x_\alpha} + \frac{\partial \sigma'_{\alpha\beta}}{\partial x_\beta} + nF_\alpha,$$

где $\rho = mn$, и было использовано определение субстанциональной производной $d/dt = \partial/\partial t + (\mathbf{u} \cdot \nabla)$.

Используя феноменологическое выражение для тензора вязких напряжений, для постоянных (не зависящих от координат) η и ζ получим, что

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

и гидродинамическое уравнение движения в этом случае принимает вид

$$\rho \frac{d\mathbf{u}}{dt} = -\nabla P + \eta \Delta \mathbf{u} + \left(\zeta + \frac{\eta}{3} \right) \operatorname{grad} \operatorname{div} \mathbf{u} + n\mathbf{F}$$

Это и есть уравнение Навье Стокса феноменологической гидродинамики (для газа $P = nT$, но для жидкостей надо использовать их собственное уравнение состояния).

Проводимость Друде и наличие замороженного беспорядка

При наличии "замороженного беспорядка" к уравнению справа добавляется еще один член, $-\rho \mathbf{u}/\tau$.

Действительно, ведь в этом случае кинетическое уравнение имеет вид

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{F} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = \frac{(\mathbb{P} - 1)f}{\tau_p},$$

где $\mathbb{P} = \int \frac{d\hat{\mathbf{v}}}{4\pi}$ - оператор усреднения по направлениям скоростей, а τ_p - время релаксации импульса.

После нашего усреднения уравнения Больцмана (с домножением на импульс) справа остается именно такой ненулевой вклад, так что имеем уравнение

$$\rho \frac{d\mathbf{u}}{dt} = -\nabla P + \eta \Delta \mathbf{u} + \left(\zeta + \frac{\eta}{3} \right) \operatorname{grad} \operatorname{div} \mathbf{u} + n\mathbf{F} - \rho \mathbf{u}/\tau_p.$$

В стационарном режиме

$$n\mathbf{F} - \rho \mathbf{u}/\tau_p = 0$$

поэтому

$$\mathbf{u} = n\tau_p \mathbf{F}/\rho$$

так что

$$\mathbf{j} = -ne\mathbf{u} = -ne \cdot n\tau_p(-e\mathbf{E})/(nm) = \frac{ne^2\tau_p}{m}\mathbf{E} \equiv \sigma_D \mathbf{E},$$

где σ_D - проводимость Друде.

вывод с учетом вязкости

просто берем

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho v_i = - \frac{\partial \Pi_{ik}}{\partial x_k}$$

и получаем нужное уравнение.
да?

7.3.3 Typical Transformations of Navier–Stokes Equations**выражение для потока импульса и найти тензор плотности потока импульса**

Получить из кинетического уравнения Больцмана выражение для потока импульса и найти тензор плотности потока импульса.

учет упругих столкновений на в замороженном беспорядке

Как изменится уравнение для потока импульса, если в τ -приближении учесть упругие столкновения на в замороженном беспорядке, как это делалось для электронного газа?

вывод проводимость Друде

Получить в гидродинамическом подходе проводимость Друде для металла.

часть тензора плотности потока импульса, отвечающая за вязкость

б) Определить, какая часть тензора плотности потока импульса, который был найден в (а) и выражен через функцию распределения, отвечает за вязкость.

определение коэффициента вязкости и температуропроводности одноатомного газа

Найти коэффициент вязкости и температуропроводности одноатомного газа в τ приближении.

сравнение коэффициентов температуропроводности и кинематической вязкости в τ приближении

Сравнить коэффициенты температуропроводности и кинематической вязкости в τ приближении.

вывод уравнения Навье-Стокса

Вывести уравнение Навье -Стокса, учесть слагаемые, отвечающие за проводимость Друде.

7.3.4 Thermal Conductivity of Gases

(теория полностью опирается на предыдущую, так что сперва ее пройду, потом в эту вернусь!)

вкратце об элементарной теории теплопроводности

вроде вопрос про нее же закрыт, нет?

формула

$$\kappa \sim cNl\bar{v}$$

где c - отнесенная к одной молекуле теплоемкость газа. Это известная элементарная газокинетическая формула.

Theory

Для вычисления коэффициента теплопроводности газа надо решать кинетическое уравнение с градиентом температуры.

Сохранив в (6,19) лишь первый член в левой стороне, имеем

$$\frac{\varepsilon(\Gamma) - c_p T}{T} \mathbf{v} \nabla T = I(\chi)$$

Решение этого уравнения надо искать в виде

$$\chi = \mathbf{g} \nabla T,$$

где вектор $\mathbf{g}$ -функция только от величин Γ .

Действительно, при подстановке в (7,1) в обеих сторонах равенства получаем множитель ∇T .

Поскольку уравнение должно иметь место при произвольных значениях вектора ∇T , должны быть равными коэффициенты при ∇T в обеих сторонах равенства, так что мы получаем для g уравнение

$$\mathbf{v} \frac{\varepsilon(\Gamma) - c_p T}{T} = I(g)$$

уже не содержащее ∇T (а тем самым и явной зависимости от координат).

Функция χ должна еще удовлетворять условиям (6,3).

С функцией χ в виде (7,2) первые два из этих условий удовлетворяются автоматически: это очевидно уже из того, что уравнение (7,3) не содержит никаких векторных параметров, вдоль которых могли бы быть направлены постоянные векторы - интегралы $\int f_0 g d\Gamma$ и $\int f_0 \varepsilon g d\Gamma$.

Третье же накладывает на решение уравнения (7,3) дополнительное условие

$$\int f_0 \mathbf{v} g d\Gamma = 0$$

Если кинетическое уравнение решено и функция χ известна, то можно определить коэффициент теплопроводности, вычисляя поток энергии, точнее - его диссипативную часть, не связанную просто с конвективным переносом энергии (эту часть потока энергии будем обозначать символом $\mathbf{q}'$).

Но в отсутствие макроскопического движения в газе $\mathbf{q}'$ совпадает с полным потоком энергии $\mathbf{q}$, даваемым интегралом (5.9).

При $f = f_0$ этот интеграл исчезает тождественно за счет интегрирования по направлениям $\mathbf{v}$.

Поэтому при подстановке $f(6.1)$ остается

$$\mathbf{q} = \frac{1}{T} \int \mathbf{v} f_0 \chi \varepsilon d\Gamma = \frac{1}{T} \int f_0 \varepsilon \mathbf{v} (g \nabla T) d\Gamma$$

или, в компонентах,

$$q_\alpha = -\kappa_{\alpha\beta} \frac{\partial T}{\partial x_\beta}, \quad \kappa_{\alpha\beta} = -\frac{1}{T} \int f_0 \varepsilon v_\alpha g_\beta d\Gamma$$

Ввиду изотропии равновесного газа какие-либо избранные направления в нем отсутствуют и тензор $\kappa_{\alpha\beta}$ может выражаться лишь через единичный тензор $\delta_{\alpha\beta}$, т. е. сводится к скаляру:

$$\kappa_{\alpha\beta} = \kappa \delta_{\alpha\beta}, \quad \kappa = \kappa_{\alpha\alpha}/3$$

Таким образом, поток энергии

$$\mathbf{q} = -\kappa \nabla T$$

где скалярный коэффициент теплопроводности

$$\kappa = -\frac{1}{3T} \int f_0 \varepsilon \mathbf{v} \mathbf{g} d\Gamma$$

Положительность этой величины (поток $\mathbf{q}$ должен быть направлен противоположно градиенту температуры) автоматически обеспечивается кинетическим уравнением (см. 8 9).

В одноатомных газах скорость $\mathbf{v}$ - единственный вектор, от которого зависит функция $\mathbf{g}$; ясно поэтому, что эта функция должна иметь вид

$$\mathbf{g} = \frac{\mathbf{v}}{v} g(v)$$

В многоатомных газах функция $\mathbf{g}$ зависит уже от двух векторов - скорости $\mathbf{v}$ и момента $\mathbf{M}$. Если симметрия молекул не допускает существования стереонзомерии, то интеграл столкновений, а с ним и уравнение (7.3) инвариантны по отношению к инверсии; такой же инвариантностью должно обладать и его решение χ .

Другими словами, $\chi = \mathbf{g} \nabla T$ должно быть истинным скаляром, а поскольку градиент ∇T есть истинный вектор, то таким же вектором должна быть и функция $\mathbf{g}$. Так, для двухатомного газа, где векторами $\mathbf{v}$ и $\mathbf{M}$ исчерпываются величины Γ , функция $\mathbf{g}(\Gamma)$ имеет вид

$$\mathbf{g} = \mathbf{v} g_1 + \mathbf{M}(\mathbf{v} \mathbf{M}) g_2 + [\mathbf{v} \mathbf{M}] g_3$$

где g_1, g_2, g_3 - скалярные функции от скалярных аргументов $\mathbf{v}^2, \mathbf{M}^2, (\mathbf{v} \mathbf{M})^2$; это наиболее общий вид истинного вектора, который может быть построен из истинного же вектора $\mathbf{v}$ и псевдовектора $\mathbf{M}$.

Если же вещество представляет собой стереоизомер, то инвариантность по отношению к инверсии отсутствует: в таком случае инверсия «превращает» газ, по существу, в другое вещество.

(??) Соответственно функция χ сможет содержать также и псевдоскалярные члены, т. е. функция $\mathbf{g}$ псевдовекторные члены (например, член вида $g_4 \mathbf{M}$).

Условие применимости изложенного метода решения кинетического уравнения (основанного на предположении о близости f к f_0) можно выяснить путем оценки интеграла столкновений согласно (3.12). Средняя энергия молекулы $\bar{\varepsilon} \sim T$, поэтому оценка обеих частей уравнения (7.3) дает $\bar{v} \sim g/\tau \sim g\bar{v}/l$, откуда $g \sim l$. Условие $\chi/T \sim g|\nabla T|/T \ll 1$ (эквивалентное требованию $\delta f \ll f_0$) означает, следовательно, что расстояния L , на которых температура испытывает существенное изменение ($|\nabla T| \sim T/L$), должны быть велики по сравнению с l .

Другими словами, функция вида (6.1) представляет собой первые члены разложения решения кинетического уравнения по степеням малого отношения l/L .

Оценка интеграла (7.7) с $g \sim l$ приводит к формуле

$$\kappa \sim cNl\bar{v}$$

где c - отнесенная к одной молекуле теплоемкость газа. Это известная элементарная газокинетическая формула.

Положив в ней $l \sim 1/N\sigma$, $c \sim 1$ и $\bar{v} \sim \sqrt{T/m}$, имеем

$$\kappa \sim \frac{1}{\sigma} \sqrt{\frac{T}{m}}$$

В этой оценке сечение σ относится к средней тепловой скорости молекул, и в этом смысле его надо понимать как функцию температуры. С увеличением скорости сечение, вообще говоря, убывает; соответственно σ будет убывающей функцией температуры.

При не слишком низких температурах молекулы газа ведут себя, качественно, как твердые упругие частицы, взаимодействующие друг с другом лишь при непосредственных столкновениях.

Такому характеру взаимодействия отвечает слабо зависящее от скорости (а потому и от температуры) сечение столкновений.

В этих условиях зависимость κ от температуры близка к пропорциональности $\sqrt{T}$.

7.3.5 Viscosity of Gases

Theory

Вычислим вязкость газа с помощью кинетического уравнения, делается это аналогично вычислению теплопроводности.

Разница состоит в том, что отклонение от равновесия обусловлено не градиентом температуры, а неоднородностью потока газа по скорости макроскопического движения $\mathbf{V}$.

При этом снова предполагается, что характерные размеры задачи $L \gg l$.

Существуют, как известно, два вида вязкости, коэффициенты которых принято обозначать посредством η и ζ .

Они определяются как коэффициенты в тензоре вязких напряжений $\sigma'_{\alpha\beta}$, входящем как часть в тензор плотности потока импульса:

$$\begin{aligned} \Pi_{\alpha\beta} &= P\delta_{\alpha\beta} + \rho V_\alpha V_\beta - \sigma'_{\alpha\beta} \\ \sigma'_{\alpha\beta} &= 2\eta \left(V_{\alpha\beta} - \frac{1}{3} \delta_{\alpha\beta} \operatorname{div} \mathbf{V} \right) + \zeta \delta_{\alpha\beta} \operatorname{div} \mathbf{V} \end{aligned}$$

где $V_{\alpha\beta}$ определено согласно (6.12)(см. VI, §15).

В несжимаемой жидкости проявляется лишь вязкость η . «Вторая» же вязкость проявляется при движениях, в которых $\operatorname{div} \mathbf{V} \neq 0$.

Оба коэффициента целесообразно вычислять раздельно.

Опустив в общем кинетическом уравнении (6.19) член с градиентом температуры, перепишем его в виде

$$mv_\alpha v_\beta \left(V_{\alpha\beta} - \frac{1}{3} \delta_{\alpha\beta} \operatorname{div} \mathbf{V} \right) + \left(\frac{mv^2}{3} - \frac{\varepsilon(\Gamma)}{c_v} \right) \operatorname{div} \mathbf{V} = I(\chi)$$

где в левой части разделены члены, создающие первую и вторую вязкости.

При вычислении первой вязкости надо считать, что

(????)

виде

$$m \left(v_\alpha v_\beta - \frac{1}{3} \delta_{\alpha\beta} v^2 \right) V_{\alpha\beta} = I(\chi)$$

где оба тензорных множителя в левой стороне имеют равный нулю след.

Решение этого уравнения ищем в виде

$$\chi = g_{\alpha\beta} V_{\alpha\beta}$$

где $g_{\alpha\beta}(\Gamma)$ - симметричный тензор; поскольку след $V_{\alpha\alpha} = 0$, то прибавлением к $g_{\alpha\beta}$ члена $(\delta_{\alpha\beta})$ можно всегда добиться того, чтобы было и $g_{\alpha\alpha} = 0$, не меняя при этом функции χ .

Для $g_{\alpha\beta}$ имеем уравнение

$$m \left(v_{\alpha} v_{\beta} - \frac{1}{3} \delta_{\alpha\beta} v^2 \right) = I(g_{\alpha\beta})$$

Дополнительные условия (6.3) удовлетворяются автоматически. Поток импульса вычисляется по функции распределения как интеграл (5.8).

Интересующая нас часть этого тензора - тензор вязких напряжений - дается интегралом

$$\begin{aligned} \sigma'_{\alpha\beta} &= -\frac{m}{T} \int v_{\alpha} v_{\beta} f_0 \chi d\Gamma = \eta_{\alpha\beta\gamma\delta} V_{\gamma\delta} \\ \eta_{\alpha\beta\gamma\delta} &= -\frac{m}{T} \int f_0 v_{\alpha} v_{\beta} g_{\gamma\delta} d\Gamma. \end{aligned}$$

Величины $\eta_{\alpha\beta\gamma\delta}$ составляют тензор четвертого ранга, симметричный по парам индексов α, β и γ, δ и дающий нуль при упрощении по паре γ, δ .

Ввиду изотропии газа этот тензор может выражаться только через единичный тензор $\delta_{\alpha\beta}$. Выражение, удовлетворяющее этим условиям:

$$\eta_{\alpha\beta\gamma\delta} = \eta \left[\delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta} + \delta_{\alpha\delta} \delta_{\beta\gamma} - \frac{2}{3} \delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\delta} \right]$$

Тогда $\sigma'_{\alpha\beta} = 2\eta V_{\alpha\beta}$, так что η есть искомый скалярный коэффициент вязкости.

Он определяется путем упрощения тензора по парам индексов α, γ и β, δ :

$$\eta = -\frac{m}{10T} \int v_{\alpha} v_{\beta} g_{\alpha\beta} f_0 d\Gamma$$

В одноатомном газе $g_{\alpha\beta}$ является функцией только от вектора $\mathbf{v}$.

Общий вид такого симметричного тензора с равным нулю следом есть

$$g_{\alpha\beta} = \left(v_{\alpha} v_{\beta} - \frac{1}{3} \delta_{\alpha\beta} v^2 \right) g(v)$$

с одной только скалярной функцией $g(v)$.

В многоатомных газах тензор $g_{\alpha\beta}$ составляется с помощью большего числа переменных, в том числе двух векторов $\mathbf{v}$ и $\mathbf{M}$. В отсутствие стереоизотропии $g_{\alpha\beta}$ может содержать только истинно-тензорные члены; в газе стереоизомерного вещества допускаются также и псевдотензорные члены.

Оценка коэффициента вязкости, аналогичная оценке (7.10) для коэффициента теплопроводности, приводит к известной элементарной газокинетической формуле

$$\eta \sim m \bar{v} N l$$

(см. примеч. на с. 57). При этом температуропроводность и кинематическая вязкость оказываются одинакового порядка величины:

$$x / (N c_p) \sim \eta / (N m) \sim \bar{v} l.$$

Положив в (8.11) $l \sim 1/N\sigma$ и $\bar{v} \sim (T/m)^{1/2}$, получим

$$\eta \sim \sqrt{mT}/\sigma$$

Все сказанное в §7 о зависимости χ от давления и от температуры относится и к коэффициенту вязкости η .

Для вычисления второго коэффициента вязкости надо считать отличным от нуля второй член в левой части кинетического уравнения (8.3):

$$\left(\frac{mv^2}{3} - \frac{\varepsilon(\Gamma)}{c_v} \right) \operatorname{div} \mathbf{V} = I(\chi)$$

Ищем решение в виде

$$\chi = g \operatorname{div} \mathbf{V}$$

и для функции g находим уравнение

$$\frac{mv^2}{3} - \frac{\varepsilon(\Gamma)}{c_v} = I(g).$$

Вычислив тензор напряжений и сравнив его с выражением $\zeta \delta_{\alpha\beta} \operatorname{div} \mathbf{V}$, получим коэффициент вязкости в виде

$$\zeta = -\frac{m}{3T} \int v^2 g f_0 d\Gamma$$

У одноатомных газов $\varepsilon(\Gamma) = mv^2/2$, $c_v = 3/2$, и левая часть уравнения (8.16) обращается в нуль. Из уравнения $I(g) = 0$ следует тогда, что и $g = 0$, а потому и $\zeta = 0$. Мы приходим, таким образом, к интересному результату: у одноатомных газов вторая вязкость равна нулю).

вторая вязкость газа ультрарелятивистских частиц равна нулю

(задача от И.М. Халатникова 1955.)

Энергия ε релятивистской частицы в системе отсчета K , которой газ движется с (нерелятивистской) скоростью V , связана с ее энергией ε' в системе K' , в которой газ покоится, формулой $\varepsilon' = \varepsilon - \mathbf{pV}$, где $\mathbf{p}$ - импульс частицы в системе K (это - формула преобразования Лоренца, в которой опущены члены более чем первого порядка по $\mathbf{V}$). Функция распределения в системе K : $f_0(\varepsilon - \mathbf{pV})$, где $f_0(\varepsilon')$ - распределение Больцмана.

Интересуясь лишь вязкостью, мы можем с самого начала считать равными нулю градиенты всех макроскопических величин, за исключением лишь скорости $\mathbf{V}$; тогда и $\partial \mathbf{V} / \partial t = 0$, так что последний член в (6.10) выпадает ²). В (6.11) первые два члена тоже отсутствуют, а третий заменяется на

$$\mathbf{v} \nabla (\mathbf{pV}) = v_\alpha p_\beta \frac{\partial V_\beta}{\partial x_\alpha} = v_\alpha p_\beta V_{\alpha\beta}$$

(направления $\mathbf{v}$ и $\mathbf{p}$ совпадают, поэтому $p_\alpha v_\beta = p_\beta v_\alpha$). Уравнения непрерывности и сохранения энтропии в использованном в §6 виде остаются справедливыми и при движении (с малыми скоростями V) релятивистского газа.

Поэтому остаются в силе и формулы (6.16). В результате кинетическое уравнение принимает вид

$$\left(v_\alpha p_\beta - \delta_{\alpha\beta} \frac{\varepsilon}{c_v} \right) V_{\alpha\beta} = I(\chi)$$

В задаче о второй вязкости надо положить $V_{\alpha\beta} = \frac{1}{3}\delta_{\alpha\beta} \operatorname{div} \mathbf{V}$, и тогда

$$\left(\frac{vp}{3} - \frac{\varepsilon}{c_v}\right) \operatorname{div} \mathbf{V} = I(\chi)$$

В ультрарелятивистском газе $v \approx c$, $\varepsilon = cp$, а теплоемкость $c_v = 3$ (см. V, § 44, задача), так что левая часть уравнения, а с нею и χ обращаются в нуль.

8 Lectures on Kinetics by Maksimov

8.1 Kinetic Theory of Gases by Maksimov

8.1.1 1.1. The Boltzmann Equation

Рассмотрим разреженный газ в отсутствие внешних полей. Разреженность газа нам нужна для того, чтобы в дальнейшем рассматривать только двойные соударения, пренебрегая тройными, и т.д. Полный набор квантово-механических величин, определяющих состояние отдельной молекулы такого газа, можно считать состоящим из скорости $\mathbf{v}$ движения центра масс молекулы и вращательного и колебательного квантовых чисел (M, n) , описывающих внутренние степени свободы¹. Совокупность всех этих величин обозначим буквой Γ : $\Gamma = (\mathbf{v}, M, n)$, а о молекуле, обладающей таким набором, будем говорить, что она находится в Γ -состоянии.

Основным понятием кинетической теории газов является так называемая функция распределения $f(\mathbf{r}, \Gamma, t)$, которую мы определим следующим образом. Выделим в газе некоторый объем dV с координатой $\mathbf{r}$. Этот объем должен содержать такое количество частиц, чтобы его хватило для статистического описания газа. С другой стороны, он должен быть столь малым, чтобы можно было считать все статистические величины постоянными на

протяжении этого объема. Объем, удовлетворяющий этим условиям, называют физически бесконечно малым.

Одночастичная функция распределения определяет число молекул газа, находящихся в состояниях между Γ и $\Gamma + d\Gamma$ внутри физически бесконечно малого объема dV в момент времени t :

$$dN = f(\mathbf{r}, \Gamma, t) d\Gamma dV \quad (1.1)$$

Подчеркнем еще раз, что координата $\mathbf{r}$, входящая в определение функции распределения, не есть координата отдельной молекулы, а является координатой выделенного физически бесконечно малого объема. Таким образом, совокупность $(\mathbf{r}, \Gamma)$ образует точку фазового пространства, все компоненты которого независимы друг от друга и принципиально не зависят от времени. Из определения функции распределения видно, что она является плотностью числа частиц в таком фазовом пространстве в момент времени t .

Через одночастичную функцию распределения выражаются все основные физические величины, характеризующие макроскопическое состояние газа: плотность числа частиц $n(\mathbf{r}, t) = \int d\Gamma f$; скорость в точке $\mathbf{r}$ $\mathbf{V} = \frac{1}{n} \int d\Gamma f \mathbf{v}$; средняя энергия молекулы

$$\varepsilon = \frac{1}{n} \int d\Gamma f \left(\frac{mv^2}{2} + \varepsilon_{in} \right)$$

⁰¹ Условие квазиклассичности вращения $\hbar^2/2I \ll T$. Это условие может нарушаться только для легких газов H_2 , HD, D_2 . Поэтому вращение для них надо рассматривать квантово-механически.

(здесь ε_{in} - внутренняя энергия молекулы); поток энергии $\mathbf{q} = \int d\Gamma f \left(\frac{mv^2}{2} + \varepsilon_{in} \right) \mathbf{v}$; поток импульса $\Pi_{ik} = \int d\Gamma f m v_i v_k$. Интегрирование по Γ , вообще говоря, включает в себя суммирование по колебательным квантовым числам.

Эволюция функции распределения f во времени описывается кинетическим уравнением. Впервые подобное урав-

нение получил и исследовал Л. Больцман в 1872 г. на основе наглядных физических соображений о балансе числа частиц в Γ -состоянии в элементе фазового объема с учетом парных столкновений между ними. Успехи современной кинетики в значительной степени связаны с уравнением Больцмана или с различными его модификациями.

В кинетической теории существует целое большое направление "Теория кинетических уравнений". Задача нашего курса много скромнее: дать общее представление о применимости идей кинетики (на основании уравнения Больцмана) к разреженному газу, плазме и твердому телу. Поэтому для нас уравнение Больцмана - это постулат, и мы лишь поясним физический смысл каждого члена этого уравнения (кстати, такова концепция и самого Больцмана) и перечислим критерии его применимости (одни - обоснованно, другие - со ссылкой на подобный анализ).

Выделим в газе некоторый объем ΔV и проследим за скоростью изменения $\frac{\partial \Delta N_\Gamma}{\partial t}$ числа частиц ΔN_Γ , находящихся в Γ -состоянии внутри такого объема:

$$\Delta N_\Gamma = \int dV f(\mathbf{r}, \Gamma, t)$$

Это изменение может происходить как за счет того, что часть частиц в Γ -состоянии уходит из ΔV через границы этого объема (благодаря наличию потока $f\mathbf{v}$), так и за счет столкновений (в результате чего может наблюдаться как приход в Γ -состояние из других состояний внутри выделенного объема, так и уход из него). Поэтому для скорости изменения числа частиц в Γ -состоянии внутри объема ΔV имеем

$$\frac{\partial \Delta N_\Gamma}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \int_{\Delta V} dV f = - \oint d\mathbf{S} f \mathbf{v} - \int_{\Delta V} dV \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{st}; \quad (1.2)$$

здесь справа первый член выражает уход частиц из Γ -состояния из объема ΔV , второй - уход из Γ -состояния за счет столкновений.

По теореме Гаусса:

$$\oint d\mathbf{S} f \mathbf{v} = \int_{\Delta V} dV \nabla \cdot (f \mathbf{v}) \quad (1.3)$$

а вследствие произвольности выделенного объема:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \nabla \cdot (f \mathbf{v}) = - \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{st} \quad (1.4)$$

Обратим внимание на то, что скорость $\mathbf{v}$ можно выносить из-под знака ∇ , поскольку $\mathbf{r}$ и $\mathbf{v}$ являются независимыми компонентами фазового пространства:

$$\nabla \cdot (f \mathbf{v}) = \mathbf{v} \nabla f \quad (1.5)$$

Член $\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{st}$ описывает изменение числа частиц в Γ -состоянии в единице объема в единицу времени благодаря столкновениям. Найдем эту величину.

Будем считать, что для разреженного газа играют роль только бинарные столкновения, а вероятность тройных и т.д. взаимодействий ничтожно мала, и, кроме того, что взаимодействия между парами частиц независимы (то есть, как говорят, такие взаимодействия никак не коррелированы).

Пусть в единичном объеме находятся молекулы в состояниях Γ и Γ_1 , и $w(\Gamma\Gamma_1 \rightarrow \Gamma'\Gamma'_1)$ есть вероятность того, что в единицу времени при взаимодействии этих молекул они перейдут в состояния Γ' и Γ'_1 . Тогда

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{st} = \sum_{\Gamma_1, \Gamma', \Gamma'_1} w f f_1 - \sum_{\Gamma_1, \Gamma', \Gamma'_1} w' f' f'_1 \quad (1.6)$$

; ись и в дальнейшем принимаем обозначения:

$$\begin{aligned} f(\mathbf{r}, \Gamma, t) &= f; \\ f(\mathbf{r}, \Gamma', t) &= f'; \\ f(\mathbf{r}, \Gamma_1, t) &= f_1; \\ f(\mathbf{r}, \Gamma'_1, t) &= f'_1 \\ w(\Gamma\Gamma_1 \rightarrow \Gamma'_1\Gamma'_1) &= w; \\ w(\Gamma'\Gamma'_1 \rightarrow \Gamma\Gamma_1) &= w'. \end{aligned} \quad (1.7)$$

Первая сумма в (1.6) характеризует уход частиц из Γ состояния, вторая сумма - приход в него.

Действительно, в единице объема в Γ -состоянии содержится f молекул, в Γ_1 - состоянии - f_1 молекул. Поэтому в единицу времени в единице объема в результате столкновений из состояний Γ и Γ_1 в состояния Γ' и Γ'_1 попадут $w(\Gamma\Gamma_1 \rightarrow \Gamma'\Gamma'_1) f f_1$ молекул. Если просуммировать это произведение по $\Gamma_1, \Gamma', \Gamma'_1$, то получим общий уход из Γ состояния за единицу времени в единице объема. Смысл второй суммы - общий приход в Γ -состояние.

Если Γ -состояния непрерывны, то

$$\sum_{\Gamma} \rightarrow \int d\Gamma \rightarrow \int d^3\mathbf{v} \int d^3\mathbf{M} \sum_n \quad (1.8)$$

где n означает суммирование по колебательным степеням свободы, коль скоро они играют роль.

Таким образом, для $f(\mathbf{r}, \Gamma, t)$ получаем уравнение, открытое Больцманом и носящее его имя:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + (\mathbf{v}\nabla)f = - \int d\Gamma_1 d\Gamma' d\Gamma'_1 \{w f f_1 - w' f' f'_1\} = -I_{st} \quad (1.9)$$

где I_{st} - так называемый интеграл столкновений в форме Больцмана.

Обобщим левую часть уравнения Больцмана на случай присутствия внешних полей. Ясно, что Γ -состояние в процессе движения между столкновениями во внешнем поле изменяется (например, $m\dot{\mathbf{v}} = \mathbf{F}_{\text{ext}}$), и мы учтем это изменение, введя в левую часть члены $\dot{\mathbf{v}} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} + \dot{\mathbf{M}} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{M}}$ (не учитывая при этом изменение колебательных квантовых чисел n):

$$\frac{\partial f}{\partial t} + (\mathbf{v}\nabla)f + \dot{\mathbf{v}} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} + \dot{\mathbf{M}} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{M}} = -I_{st}.$$

Покажем, что любая функция от энергии E обращает левую часть уравнения Больцмана в тождественный нуль.

Действительно,

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial f(E)}{\partial t} + (\mathbf{v}\nabla)f(E) + \dot{\mathbf{v}}\frac{\partial f(E)}{\partial \mathbf{v}} + \dot{\mathbf{M}}\frac{\partial f(E)}{\partial \mathbf{M}} = \\
& = \frac{\partial f(E)}{\partial E} \left\{ \frac{\partial E}{\partial t} + (\mathbf{v}\nabla)E + \dot{\mathbf{v}}\frac{\partial E}{\partial \mathbf{v}} + \dot{\mathbf{M}}\frac{\partial E}{\partial \mathbf{M}} \right\} \equiv \\
& \equiv \frac{\partial f(E)}{\partial E} \frac{dE}{dt},
\end{aligned}$$

так как полная энергия молекулы сохраняется и в присутствии внешних полей.

Интеграл столкновений в виде (1.9) зачастую оказывается не очень удобным для практических вычислений, когда более полезно введение дифференциального сечения рассеяния $d\sigma$. Эта величина определяется как количество частиц в единице объема, рассеянных в фиксированное конечное состояние за единицу времени:

$$\frac{dN}{dt} = N_1 Q d\sigma \quad (1.10)$$

Здесь Q - поток налетающих частиц, N_1 - число рассеивателей в единице объема.

Взяв в качестве N_1 величину $f_1 d\Gamma_1$ - число частиц в единице объема, находящихся в состояниях от Γ_1 до $\Gamma_1 + d\Gamma_1$, а в качестве Q величину gf - поток частиц в Γ -состоянии (обладающих скоростью $\mathbf{v}$) и налетающих на частицы, находящиеся в Γ_1 -состоянии (обладающих скоростью $\mathbf{v}_1$), с относительной скоростью

$$g = |\mathbf{v} - \mathbf{v}_1|, \quad (1.11)$$

получаем, что

$$\frac{dN}{dt} = gf f_1 d\Gamma_1 d\sigma; \quad d\sigma = d\sigma(\Gamma\Gamma_1 \rightarrow \Gamma'\Gamma'_1) \quad (1.12)$$

Выше было показано, что

$$\frac{dN}{dt} = wf f_1 d\Gamma_1 d\Gamma'_1, \quad w = w(\Gamma\Gamma_1 \rightarrow \Gamma'\Gamma'_1) \quad (1.13)$$

Сравнение (1.12) и (1.13) дает

$$w d\Gamma'_1 d\Gamma'_1 = g d\sigma$$

и интеграл столкновений принимает форму

$$I_{st} = \int d\Gamma_1 \{g d\sigma f f_1 - g' d\sigma' f' f'_1\} \quad (1.14)$$

Упростим последнюю формулу. Запишем законы сохранения импульса и энергии для столкновения двух одинаковых частиц вдали от радиуса их взаимодействия:

$$\begin{cases} \mathbf{v} + \mathbf{v}_1 = \mathbf{v}' + \mathbf{v}'_1 \\ \mathbf{v}^2 + \mathbf{v}_1^2 = \mathbf{v}'^2 + \mathbf{v}'_1^2 \end{cases}$$

Перейдем к другим переменным: скоростям центра инерции частиц $\mathbf{G} = \frac{1}{2}(\mathbf{v} + \mathbf{v}_1)$ и $\mathbf{G}' = \frac{1}{2}(\mathbf{v}' + \mathbf{v}'_1)$ и относительным скоростям сталкивающихся частиц - $\mathbf{g} = \mathbf{v} - \mathbf{v}_1$ и $\mathbf{g}' = \mathbf{v}' - \mathbf{v}'_1$. В этих переменных законы сохранения выглядят особенно просто:

$$\begin{aligned} \mathbf{G} &= \mathbf{G}', \\ g^2 &= g'^2. \end{aligned}$$

Если, к тому же, считать (что не всегда так), что для дифференциального сечения рассеяния справедливо

$$d\sigma' = d\sigma$$

то интеграл столкновений принимает особенно простой вид:

$$I_{st} = \int d\Gamma_1 g d\sigma \{f f_1 - f' f'_1\} \quad (1.15)$$

8.1.2 1.2. Limits of Applicability of Boltzmann Eq. for Molecular Gases

Приведем характерные параметры физической кинетики газов: $r_0 \simeq 10^{-8}$ см - характерный размер молекулы (характерный радиус взаимодействия); $r_1 \simeq 10^{-6} \simeq n^{-1/3}$ см - характерное расстояние между молекулами в газе при нормальных температурах и давлениях; $n = 2.7 \cdot 10^{19}$ см $^{-3}$ - число Лошмидта; $r_2 \simeq 10^{-5}$ см - средняя длина свободного пробега молекулы при нормальных температурах и давлениях; r_3 - характерный размер, на котором меняются макроскопические параметры $n(\mathbf{r}, t)$ - плотность, $\mathbf{V}(\mathbf{r}, t)$ - скорость, $T(\mathbf{r}, t)$ - температура газа.

Приведем еще оценку характерных времен, с которыми приходится иметь дело в кинетической теории газов. Мы делаем при этом естественное предположение, что характерной скоростью движения молекулы является ее тепловая скорость $v_T \sim \left(\frac{T}{m}\right)^{1/2} \sim 10^5$ см/с. Тот же порядок величины имеет скорость распространения макроскопических

возмущений в газе, то есть скорость звука (если, разумеется, речь не идет об ударной волне). Тогда

$\tau_0 \sim \frac{r_0}{v_T} \sim 10^{-13}$ с - время взаимодействия сталкивающихся молекул;

$\tau_2 \sim \frac{r_2}{v_T} \sim 10^{-10}$ с - время свободного пробега молекул, которое, как будет ясно из дальнейшего, по порядку величины сравнимо с так называемым временем релаксации, то есть временем установления термодинамического равновесия;

$\tau_3 \sim \frac{r_3}{v_T}$ - характерный период изменения макроскопических параметров газа.

Мы будем рассматривать только парные столкновения молекул, пренебрегая тройными и т.д. столкновениями. Действительно, тройное столкновение происходит, когда налетающая частица рассеивается сразу на двух молекулах, отстоящих друг от друга на расстоянии, равном или меньшем радиуса взаимодействия (размера молекулы). Вероятность обнаружения в объеме порядка r_0^3 одновременно двух частиц равна $\left(\frac{r_0}{r_1}\right)^3 \sim 10^{-5}$, и при нормальных температурах и давлениях тройными столкновениями можно пренебречь.

В кинетике газов нас будут интересовать явления переноса, для которых $r_3 \gg r_2$, или $\tau_3 \gg \tau_2$. В этом случае можно считать, что имеет место локальное термодинамическое равновесие, то есть распределение молекул близко к распределению Больцмана, но параметры этого распределения $n(\mathbf{r}, t)$, $\mathbf{V}(\mathbf{r}, t)$, $T(\mathbf{r}, t)$ являются функциями координат и времени.

Используя для интеграла столкновений форму (1.15), оценим его величину.

Мы заведомо увеличим интеграл столкновений, если отбросим член, описывающий "приход" в Γ -состояние:

$$I_{st} \leq I_{es} = f \int d\Gamma_1 g d\sigma f_1 = \frac{f}{\tau}$$

Величина τ^{-1} является полным числом столкновений в единицу времени частицы в состоянии Γ со всеми остальными частицами.

По порядку величины

$$\begin{aligned} g &\sim v_T \sim 10^5 \text{ см/с} \\ \int d\sigma &= \sigma_{tot} \sim a^2 \sim 10^{-14} \text{ см}^2 \\ \int d\Gamma_1 f_1 &\approx n \sim 10^{19} \text{ см}^{-3} \end{aligned}$$

(здесь σ_{tot} - полное сечение; a - размер молекулы).

Поэтому

$$\tau^{-1} \sim v_T \sigma_{tot} n \sim 10^{10} \text{ с}^{-1}$$

Величина $\tau \sim 10^{-10}$ с, по смыслу, является, следовательно, средним временем между двумя столкновениями, то есть временем свободного пробега τ_2 .

Теперь обсудим границы применимости уравнения Больцмана для молекулярных газов.

1. В дальнейшем мы убедимся, что распределение Максвелла обращает одновременно в нуль и левую, и правую части уравнения Больцмана. С другой стороны, распределение Максвелла есть термодинамически равновесное распределение идеального газа, то есть газа, для которого можно пренебречь потенциальной энергией взаимодействия по сравнению со средней кинетической энергией $c_V T$, где c_V - теплоемкость на одну молекулу, T - температура. Средняя потенциальная энергия частицы газа по порядку величины равна произведению характерной энергии U_0 взаимодействия данной частицы с другой частицей

на вероятность того, что вторая частица находится вблизи первой внутри области взаимодействия: $(r_0/r_1)^3$, где r_0 - радиус взаимодействия частиц, r_1 - среднее расстояние между частицами. Таким образом, газ можно считать идеальным, когда

$$U_0 (r_0/r_1)^3 \ll c_V T$$

Это условие выполняется в двух случаях. Либо когда взаимодействие U_0 между молекулами достаточно мало, либо когда газ достаточно разрежен. В газе нейтральных молекул $U_0 \simeq T_c$, где T_c - критическая температура перехода жидкость-пар. Поскольку обычно $T < T_c$, то условие идеальности сводится к требованию

$$r_0 \ll r_1. \quad (1.16)$$

2. Баланс частиц при столкновении мы подсчитывали, опираясь на понятие вероятности парных столкновений частиц в единице объема в единицу времени W . Это понятие можно ввести только в том случае, когда каждая молекула газа большую часть времени проводит в свободном состоянии, не взаимодействуя с остальными молекулами, а для этого необходимо потребовать, чтобы время τ_2 (длина r_2) свободного пробега было много больше времени τ_0 (радиуса r_0) взаимодействия:

$$\tau_0 \ll \tau_2, r_0 \ll r_2. \quad (1.17)$$

Имея в виду эти неравенства, часто говорят, что уравнение Больцмана "сглажено", "огрублено" по интервалам времени τ_0 и пространства r_0 .

3. Одночастичная функция распределения f введена нами для физически бесконечно малого объема, то есть $r_0 \ll r_3$. Если бы это было не так, то построение интеграла столкновений значительно бы усложнилось. Поэтому мы считаем заведомо выполненными неравенства

$$\tau_0 \ll \tau_3, r_0 \ll r_3. \quad (1.18)$$

4. В интеграле столкновений в форме Больцмана не учтены ни парные корреляции между молекулами, ни тройные столкновения. Анализ цепочки Боголюбова, скажем, показывает, что эти эффекты взаимосвязаны, и ими можно пренебречь, если $r_0 \ll r_1$.
5. Наконец, при наличии внешних полей характер столкновений, вообще говоря, меняется. Однако такими изменениями характера столкновений можно пренебречь, поскольку в газах практически всегда внешние силы слабы по сравнению с силами молекулярного взаимодействия.

8.1.3 1.3. Properties of the Collision Integral

Закон унитарности столкновений в применении к парным столкновениям имеет вид

$$\int w(\Gamma\Gamma_1 \rightarrow \Gamma'\Gamma'_1) d\Gamma' d\Gamma'_1 = \int w(\Gamma'\Gamma'_1 \rightarrow \Gamma\Gamma_1) d\Gamma' d\Gamma'_1$$

или, в более краткой записи,

$$\int w d\Gamma' d\Gamma'_1 = \int w' d\Gamma' d\Gamma'_1 \quad (1.19)$$

Словами это можно сказать так: вероятность того, что при столкновении двух молекул в состояниях Γ и Γ_1 в результате получатся любые другие состояния Γ' и Γ'_1 , равна вероятности того, что молекулы, находящиеся в любых состояниях Γ' и Γ'_1 , столкнувшись, окажутся в состояниях Γ и Γ_1 .

Докажем закон унитарности столкновений.

Вывод соответствующих соотношений удобнее проводить в терминах квантовой механики, рассматривая вероятности перехода между состояниями системы, образующими дискретный спектр. Из квантовой механики известно, что амплитуды вероятностей перехода между различными состояниями системы образуют унитарную матрицу S , для которой справедливо условие $SS^+ = 1$. Условие унитарности можно переписать в виде

$$\sum_n S_{in} S_{nk}^+ = \sum_n S_{in} S_{kn}^* = \delta_{ik}. \quad (1.20)$$

В частности, при $i = k$ имеем

$$\sum_n |S_{in}|^2 = 1. \quad (1.21)$$

Величина $|S_{in}|^2$ имеет смысл вероятности перехода из состояния n в состояние i , а соотношение (1.21) означает, что сумма вероятностей перехода из состояния n в данное состояние i равна единице.

Условие унитарности можно также переписать в виде $S^+ S = 1$, откуда, в частности, следует, что

$$\sum_n S_{in}^+ S_{ni} = \sum_n |S_{ni}|^2 = 1. \quad (1.22)$$

Последнее соотношение означает, что сумма вероятностей перехода из данного состояния i в любое состояние n равна единице. Вычитая из обеих частей равенств (1.21) и (1.22) величину $|S_{ii}|^2$ - вероятность системе остаться в состоянии i - и приравнявая левые части полученных выражений, находим

$$\sum_{n \neq i} |S_{in}|^2 = \sum_{n \neq i} |S_{ni}|^2.$$

Это и есть искомое равенство, которое в терминах функции w имеет вид (1.19).

С использованием закона унитарности столкновений интеграл столкновений запишется намного проще:

$$I_{st} = \int d\Gamma_1 d\Gamma' d\Gamma'_1 w' \{f f_1 - f' f'_1\} \quad (1.23)$$

Это видно из следующего. Рассмотрим цепочку:

$$\begin{aligned} \int d\Gamma_1 d\Gamma' d\Gamma'_1 w f f_1 &= \int d\Gamma_1 f f_1 \int d\Gamma' d\Gamma'_1 w = \\ &= \int d\Gamma_1 f f_1 \int d\Gamma' d\Gamma'_1 w' = \int d\Gamma_1 d\Gamma' d\Gamma'_1 w' f f_1 \end{aligned} \quad (1.24)$$

Закон унитарности столкновений использован при переходе от первой строки ко второй в формуле (1.24).

Свойство 1

Представим, что газ находится в локально-равновесном состоянии, т.е.

$$f = f^{(0)} = C e^{-\frac{E(\Gamma)}{T}}; \quad C = C(\mathbf{r}, t); T = T(\mathbf{r}, t).$$

Вычислим фигурную скобку в интеграле столкновений (1.23):

$$\{f f_1 - f' f'_1\} = C^2 \left(e^{-\frac{E+E_1}{T}} - e^{-\frac{E'+E'_1}{T}} \right) = 0.$$

При получении последнего равенства мы воспользовались тем, что рассматриваемая фигурная скобка входит в выражение для интеграла столкновений, помноженной на вероятность w . Последняя же отлична от нуля только при условии $E + E_1 = E' + E'_1$, означающем закон сохранения энергии при столкновении. Таким образом, мы приходим к первому свойству интеграла столкновений: локально-равновесное распределение обращает его в нуль $I_{st}(f^{(0)}) = 0$.

Свойство 2

Пусть $A = A(\Gamma)$ - какая-то функция состояния одной молекулы. Рассмотрим интеграл

$$\begin{aligned} \int d\Gamma I_{st} A(\Gamma) &= \\ &= \int d^4\Gamma A(\Gamma) \{w f f_1 - w' f' f'_1\} \end{aligned}$$

Здесь мы ввели обозначение $d^4\Gamma = d\Gamma d\Gamma_1 d\Gamma' d\Gamma'_1$. Сделаем замену переменных $\Gamma \longleftrightarrow \Gamma_1$. Тогда $A(\Gamma) \rightarrow A(\Gamma_1)$, а w и w' переходят сами в себя при таком преобразовании, так как являются симметричными функциями по параметрам сталкивающихся (рассеянных) частиц. Поэтому

$$\begin{aligned} \int d\Gamma I_{st} A(\Gamma) &= \\ &= \frac{1}{2} \int d^4\Gamma \{ (A + A_1) w f f_1 - (A + A_1) w' f' f'_1 \} \end{aligned}$$

В первом слагаемом в фигурных скобках сделаем замену переменных:

$$\Gamma \longleftrightarrow \Gamma', \quad \Gamma_1 \longleftrightarrow \Gamma'_1.$$

При такой замене

$$A \rightarrow A', A_1 \rightarrow A'_1, f \rightarrow f', \quad f_1 \rightarrow f'_1, w \rightarrow w'.$$

В результате окончательно имеем

$$\int d\Gamma I_{st} A(\Gamma) = \frac{1}{2} \int d^4\Gamma \{ (A' + A'_1 - A - A_1) w' f' f'_1 \} \quad (1.25)$$

Поскольку интеграл столкновений $-I_{st}$ есть изменение только за счет столкновений числа частиц в состоянии Γ в единице объема за единицу времени (то есть без учета градиентных членов в уравнении Больцмана), то $-\int d\Gamma I_{st} A(\Gamma)$ есть изменение величины $\int d\Gamma f A(\Gamma)$ благодаря столкновениям.

Итак:

1. $-\int d\Gamma I_{st}$ - изменение за счет столкновений плотности числа частиц $n = \int d\Gamma f$;
2. $\bullet \int d\Gamma I_{st} m\mathbf{v}$ - изменение за счет столкновений импульса единицы объема газа $nm\mathbf{V} = \int d\Gamma f m\mathbf{v}$;
3. $-\int d\Gamma I_{st} E$ - изменение за счет столкновений энергии единицы объема газа $\bar{E} = \int d\Gamma f E$ ($\bar{E}$ - средняя энергия молекулы).

Из формулы (1.25) следует, что изменение аддитивных интегралов движения за счет столкновений равно нулю. Поэтому

1. $\int d\Gamma I_{st} = 0$.
2. $\int d\Gamma I_{st} m\mathbf{v} = 0$.
3. $\int d\Gamma I_{st} E = 0$.

Последние два равенства следуют из закона сохранения энергии и импульса при столкновении, поскольку w' отлично от нуля только при этом условии.

Свойство 3

Покажем, что благодаря столкновениям энтропия газа может только возрастать (H -теорема Больцмана). По определению, полная энтропия газа

$$S = \int dV d\Gamma f_{\Gamma} \ln \frac{e}{f_{\Gamma}} = \int dV s$$

где s - плотность энтропии. Скорость изменения энтропии дается выражением

$$\begin{aligned}
\frac{dS}{dt} &= \int dV d\Gamma \frac{\partial}{\partial t} f_{\Gamma} \ln \frac{e}{f_{\Gamma}} = \\
&= \int dV \left(\int d\Gamma \frac{\partial f_{\Gamma}}{\partial t} \ln \frac{e}{f_{\Gamma}} - \int d\Gamma \frac{\partial f_{\Gamma}}{\partial t} \right) = \\
&= \int dV \left(\int d\Gamma \frac{\partial f_{\Gamma}}{\partial t} \ln \frac{e}{f_{\Gamma}} - \int d\Gamma \frac{\partial f_{\Gamma}}{\partial t} \right) = \\
&= - \int dV \int d\Gamma \frac{\partial f_{\Gamma}}{\partial t} \ln f_{\Gamma}
\end{aligned}$$

Из кинетического уравнения следует, что

$$\frac{\partial f_{\Gamma}}{\partial t} = -\dot{\mathbf{r}} \frac{\partial f_{\Gamma}}{\partial \mathbf{r}} - \dot{\mathbf{p}} \frac{\partial f_{\Gamma}}{\partial \mathbf{p}} - I_{st}$$

Имеем

$$\int dV \int d\Gamma \dot{\mathbf{r}} \ln f_{\Gamma} \frac{\partial f_{\Gamma}}{\partial \mathbf{r}} = \int d\Gamma \int dV \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \dot{\mathbf{r}} f_{\Gamma} \ln \frac{f_{\Gamma}}{e}$$

Последний интеграл преобразуется в равный нулю интеграл по поверхности, которая может быть выбрана вне объема, занимаемого газом, где функция распределения равна нулю. Аналогично в нуль обращается производная, связанная с потоком энтропии в импульсном пространстве. Итак, энтропия может изменяться только за счет столкновений. Согласно (1.25), изменение плотности энтропии в единицу времени из-за столкновений равно

$$\begin{aligned}
\dot{s} &= \int d\Gamma \frac{\partial f_{\Gamma}}{\partial t} \ln \frac{e}{f_{\Gamma}} - \int d\Gamma \frac{\partial f_{\Gamma}}{\partial t} = \int d\Gamma I_{st} \ln f_{\Gamma} = \\
&= \frac{1}{2} \int d^4\Gamma f' f'_1 w' \ln \frac{f' f'_1}{f f_1}
\end{aligned}$$

Добавим к правой части полученного соотношения тождественный нуль, воспользовавшись свойством (1.23):

$$0 = \frac{1}{2} \int d\Gamma I_{st} \cdot 1 = \frac{1}{2} \int d^4\Gamma w' \{f f_1 - f' f'_1\}$$

Поэтому

$$\dot{s} = \frac{1}{2} \int d^4\Gamma w' f f_1 \left\{ 1 - \frac{f' f'_1}{f f_1} + \frac{f' f'_1}{f f_1} \ln \frac{f' f'_1}{f f_1} \right\}.$$

Рассмотрим функцию $y = x \ln x + 1 - x$. При положительных x эта функция имеет минимум в точке $\ln x = 0$, то есть при $x = 1/y_{\min} = y(1) = 0$. Следовательно, функция y положительно определена. Полагая $x = \frac{f' f'_1}{f f_1}$, получаем, что выражение в фигурных скобках в последнем выражении неотрицательно. Поэтому $\dot{s} = \int d\Gamma I_{st} \ln f_{\Gamma} \geq 0$. Согласно свойству 1 интеграла столкновений равновесная функция распределения обращает его в нуль. Поэтому, как и должно быть, в соответствии со вторым началом термодинамики энтропия равновесного состояния не изменяется. Важно отметить, что при выводе свойств 1 – 3 мы не использовали никаких дополнительных предположений относительно поведения w , за исключением свойства унитарности столкновений. Обратим внимание, что за счет столкновений энтропия возрастает локально в любой выделенной части системы. Если же вычислять полное изменение энтропии в

выделенном объеме, то его энтропия может и уменьшаться за счет "перетекания" энтропии. Разумеется, для всей системы энтропия может только возрастать.

В статистической физике закон возрастания энтропии вводится как постулат. В кинетической же теории этот закон является следствием уравнения Больцмана и закона унитарности столкновений. Возникает вопрос: какой постулат заменяет в кинетической теории 2-е начало термодинамики? Таким постулатом в кинетической теории служит гипотеза о молекулярном хаосе. В самом деле, при построении интеграла столкновений мы без доказательства приняли, что при подсчете числа сталкивающихся

частиц можно использовать одночастичные функции распределения, и полностью пренебрегли корреляциями между сталкивающимися частицами.

Н.Н. Боголюбов показал, что фактически для вывода интеграла столкновений в форме Больцмана требуется еще меньше: достаточно потребовать выполнение принципа ослабления корреляций, согласно которому двухчастичная функция распределения, то есть вероятность найти одну частицу в точке $\mathbf{r}_1$, когда вторая находится в точке $\mathbf{r}_2$, стремится к произведению вероятностей нахождения одной частицы нахождения в точке $\mathbf{r}_1$, а другой в точке $\mathbf{r}_2$ (то есть корреляционная функция стремится к нулю), когда расстояние между частицами $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ стремится к бесконечности.

Таким образом, можно сказать, что принцип ослабления корреляций является тем постулатом, который в кинетической теории заменяет второе начало термодинамики и который приводит к необратимости статистических процессов, описываемых в рамках уравнения Больцмана.

Докажем, что для газа, находящегося в сосуде с зеркальными стенками, столкновения молекул являются единственно возможным источником производства энтропии.

Вместо явного введения граничных условий, описывающих зеркальное отражение молекул от стенок, удобнее ввести потенциальную энергию:

$$U = \begin{cases} 0 & \text{внутри сосуда} \\ \infty & \text{вне сосуда.} \end{cases} \quad (1.26)$$

Этот профиль энергии порождает силу $\mathbf{F} = -\nabla U$, которая отлична от нуля только на стенке и запрещает частице выйти из сосуда. В отсутствие других внешних сил уравнение Больцмана имеет вид

$$\frac{\partial f}{\partial t} + (\mathbf{v}\nabla)f + \mathbf{F}\frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = -I_{st}$$

Изменение энтропии во времени равно

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} S &= \int dV d\Gamma \frac{\partial}{\partial t} \left(f \ln \frac{e}{f} \right) = - \int dV d\Gamma \frac{\partial f}{\partial t} \ln f = \\ &= \int dV d\Gamma \left((\mathbf{v}\nabla)f + \mathbf{F}\frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} + I_{st} \right) \ln f \end{aligned} \quad (1.27)$$

Преимущество введения (1.26) состоит в том, что в выражении (1.27) интегрирование можно проводить по всему пространству, имея в виду, что вне сосуда $f = 0$ в силу того, что там потенциальная энергия равна бесконечности.

Интегрирование по частям дает

$$\begin{aligned}
\int dV d\Gamma \ln f(\mathbf{v}\nabla) f &= - \int dV d\Gamma \mathbf{v} f \left(\frac{\nabla f}{f} \right) = \\
&= - \int dV d\Gamma \mathbf{v} \nabla f = - \int dV d\Gamma \operatorname{div}(\mathbf{v} f) = 0 \\
\int dV d\Gamma \ln f \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}}(\mathbf{F} f) &= - \int dV d\Gamma \mathbf{F} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = \\
&= - \int dV d\Gamma \operatorname{div}_{\mathbf{p}}(\mathbf{F} f) = 0
\end{aligned}$$

Откуда, как и требовалось доказать,

$$\frac{\partial}{\partial t} S = \int dV d\Gamma I_{st} \ln f$$

8.1.4 1.4. The Principle of Detailed Equilibrium

Закон унитарности столкновений

$$\int w d\Gamma' d\Gamma'_1 = \int w' d\Gamma' d\Gamma'_1$$

является интегральным соотношением между w и w' .

В кинетической теории одноатомного газа используется так называемый принцип детального равновесия, согласно которому $w = w'$. Для многоатомного газа это равенство, вообще говоря, несправедливо. Однако имеет место обобщенный принцип детального равновесия, который следует из симметрии уравнений классической и квантовой механики относительно обращения времени. Действительно, уравнение $m\ddot{\mathbf{r}} = -\mathbf{F}$ сохраняет свой вид при замене $t \rightarrow -t$. В квантовой механике при такой замене надо перейти к комплексно-сопряженному состоянию. Поэтому

$$w(\Gamma\Gamma_1 \rightarrow \Gamma'\Gamma'_1) = w(\Gamma'^T\Gamma'^T_1 \rightarrow \Gamma^T\Gamma^T_1),$$

или короче

$$w = w^T \quad (1.22)$$

Так, если $\Gamma = (\mathbf{v}, \mathbf{M})$, то $\Gamma^T = (-\mathbf{v}, -\mathbf{M})$.

Во многих случаях, кроме симметрии обращения по времени, имеет место симметрия уравнений движения относительно инверсии. При этом, если $\Gamma = (\mathbf{v}, \mathbf{M})$, то $\Gamma^I = (-\mathbf{v}, \mathbf{M})$. Тогда

$$w(\Gamma\Gamma_1 \rightarrow \Gamma'\Gamma'_1) = w(\Gamma'^I\Gamma'^I_1 \rightarrow \Gamma^I\Gamma^I_1)$$

Вместо равенства $w = w^T$ и $w = w^I$ дают $w = w^{TI}$, то есть

$$w(\Gamma\Gamma_1 \rightarrow \Gamma'\Gamma'_1) = w(\Gamma'^{TI}\Gamma'^{TI}_1 \rightarrow \Gamma^{TI}\Gamma^{TI}_1) \quad (1.29)$$

причем $\Gamma^{TI} = (+\mathbf{v}, -\mathbf{M})$. Принцип детального равновесия в форме (1.29) имеет место во всех случаях, кроме стереоизомерных (оптически активных) молекул, для которых преобразование инверсии переводит молекулы в стереоизомерные формы. Очевидно, что для одноатомных газов формула (1.29) принимает особенно простой вид:

$$w(\mathbf{v}\mathbf{v}_1 \rightarrow \mathbf{v}'\mathbf{v}'_1) = w(\mathbf{v}'\mathbf{v}'_1 \rightarrow \mathbf{v}\mathbf{v}_1) \quad (1.30)$$

Заметим, что в квантовой механике большинство взаимодействий являются четными по моменту. Исключение составляют взаимодействия типа спин-орбита, которые относительно малы. Если ими пренебречь, то вероятность столкновений становится четной функцией по моментам, и принцип детального равновесия принимает свой простейший вид $w = w'$ и для многоатомных молекул.

Проследим, какую форму приобретает принцип детального равновесия при столкновении молекулы с макроскопическим телом, например при столкновении молекулы со стенкой.

Если состояния тела до столкновения γ и после столкновения γ' строго заданы, то принцип детального равновесия имеет прежний вид:

$$w(\Gamma\gamma \rightarrow \Gamma'\gamma') = w(\Gamma'^T\gamma'^T \rightarrow \Gamma^T\gamma^T) \quad (1.31)$$

Согласно статистической механике, макроскопическая система находится в состоянии γ с вероятностью

$$\rho_\gamma = e^{\frac{F-E_\gamma}{T}}.$$

Поэтому статистически усредненная вероятность прихода молекулы из состояния Γ в состояние Γ' при столкновении с макроскопическим телом равна

$$w(\Gamma \rightarrow \Gamma') = \sum_{\gamma\gamma'} \rho_\gamma w(\Gamma\gamma \rightarrow \Gamma'\gamma') \quad (1.32)$$

Используя механическое равенство (1.31), получаем

$$w(\Gamma \rightarrow \Gamma') = \sum_{\gamma\gamma'} \rho_\gamma w(\Gamma'^T\gamma'^T \rightarrow \Gamma^T\gamma^T)$$

Энергии состояний, симметричных по времени, совпадают:

$$E_\gamma = E_{\gamma^T}, \rho_\gamma = \rho_{\gamma^T}. \quad (1.33)$$

Кроме того, суммирование по γ и γ' идет по всем состояниям и его можно заменить на суммирование по всем состояниям γ^T и γ'^T . Это дает

$$w(\Gamma \rightarrow \Gamma') = \sum_{\gamma^T\gamma'^T} \rho_{\gamma^T} w(\Gamma^T\gamma'^T \rightarrow \Gamma^T\gamma^T)$$

Из закона сохранения энергии при столкновении следует, что

$$\rho_{\gamma^T} = e^{\frac{F-E(\gamma^T)}{T}} = e^{\frac{F-E(\gamma'^T)}{T}} e^{\frac{E(\gamma^T)-E(\gamma'^T)}{T}}.$$

Поэтому

$$w(\Gamma \rightarrow \Gamma') = e^{\frac{E(\gamma^T)-E(\gamma'^T)}{T}} \sum_{\gamma^T\gamma'^T} \rho_{\gamma'^T} w(\Gamma'^T\gamma'^T \rightarrow \Gamma^T\gamma^T).$$

Справа, с точностью до обозначений, стоит выражение (1.32). Следовательно,

$$w(\Gamma \rightarrow \Gamma') = e^{\frac{E(\gamma^T)-E(\gamma'^T)}{T}} w(\Gamma'^T \rightarrow \Gamma^T).$$

Это означает, что при описании столкновений молекулы с макроскопическим объектом принцип детального равновесия сохраняет свой механический вид только в случае упругого столкновения.

8.1.5 1.5. Transfer Equations (Grad Equations), Derivation of Laws of Hydrodynamics

Функция распределения молекул не является непосредственно измеряемой величиной. На самом деле, измеряются плотность газа $n(\mathbf{r}, t)$, его скорость $\mathbf{V}(\mathbf{r}, t)$, температура $T(\mathbf{r}, t)$ и другие макроскопические величины $\bar{A}$, которые принято называть моментами функции распределения, поскольку они связаны с функцией распределения соотношениями типа

$$n\bar{A}(\mathbf{r}, t) = \int d\Gamma f(\mathbf{r}, \Gamma, t) A(\Gamma)$$

Ниже мы изложим метод Грэда, один из наиболее эффективных методов решения кинетического уравнения. В этом методе получается замкнутая система уравнений для моментов макроскопических величин, определяющих свойства системы. Мы увидим, что метод Грэда применим не только к нейтральным газам, но и к твердым телам при исследовании кинетики электронов и фононов.

Проинтегрируем уравнение Больцмана по всем состояниям молекулы Γ :

$$\frac{\partial}{\partial t} \int d\Gamma f + \int d\Gamma (\mathbf{v} \nabla) f = - \int d\Gamma I_{st}$$

По определению $\int d\Gamma f = n(\mathbf{r}, t)$ - плотность числа частиц. Операцию дифференцирования по координатам можно вынести из-под знака интеграла по состояниям. Поэтому

$$\int d\Gamma (\mathbf{v} \nabla) f = \nabla \int d\Gamma \mathbf{v} f = \nabla(n\mathbf{V})$$

где $\mathbf{V}$ - скорость физически бесконечно малого объема газа. Согласно свойству 2 интеграла столкновений,

$$\int d\Gamma I_{st} = 0$$

Таким образом, мы получили уравнение непрерывности

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla_\alpha (V_\alpha n) = 0, \text{ или } \frac{\partial n}{\partial t} + \text{div}(n\mathbf{V}) = 0.$$

Умножим теперь кинетическое уравнение Больцмана на некоторую функцию состояния молекулы $A(\Gamma)$ и проинтегрируем по всем Γ :

$$\frac{\partial}{\partial t} \int d\Gamma f A + \int d\Gamma A (\mathbf{v} \nabla) f = - \int d\Gamma I_{st} A$$

По определению

$$\int d\Gamma f A = n\bar{A}$$

Далее

$$\int d\Gamma A (\mathbf{v} \nabla) f = \nabla \int d\Gamma A \mathbf{v} f$$

так как оператор ∇ на $\mathbf{v}$ и A не действует.

Пусть $\mathbf{u} = \mathbf{v} - \mathbf{V}$ - скорость молекулы в системе координат, в которой элемент газа, содержащий эту молекулу, покоится. Тогда

$$\begin{aligned}\int d\Gamma f A \mathbf{v} &= \int d\Gamma f A (\mathbf{u} + \mathbf{V}) = \mathbf{V} \int d\Gamma f A + \int d\Gamma f A \mathbf{u} = \\ &= n \bar{A} \mathbf{V} + \int d\Gamma f A \mathbf{u}\end{aligned}$$

Очевидно, что первый член в последнем равенстве описывает перенос величины A вместе с газом, второй - перенос этой величины в системе, где данный элемент газа покоится.

Таким образом, получаем

$$\frac{\partial}{\partial t} n \bar{A} + \nabla \left(n \bar{A} \mathbf{V} + \int d\Gamma f A \mathbf{u} \right) = - \int d\Gamma I_{st} A \quad (1.34)$$

Распишем подробнее первые два члена:

$$\begin{aligned}\bar{A} \frac{\partial}{\partial t} n + n \frac{\partial}{\partial t} \bar{A} + \bar{A} \nabla (n \mathbf{V}) + n (\mathbf{V} \nabla \bar{A}) &= \\ = n \left\{ \frac{\partial}{\partial t} \bar{A} + (\mathbf{V} \nabla \bar{A}) \right\} &\stackrel{\text{def}}{=} n \frac{d}{dt} \bar{A}\end{aligned}$$

(при выводе последнего соотношения использовано уравнение непрерывности).

Таким образом, величина A обязана удовлетворять уравнению, которое можно трактовать как уравнение переноса величины $\bar{A}$:

$$n \frac{d}{dt} \bar{A} + \nabla \int d\Gamma f A \mathbf{u} = - \int d\Gamma I_{st} A \quad (1.35)$$

Действительно, первый член этого уравнения есть перенос величины $\bar{A}$ вместе с данным элементом газа, второй перенос величины A в той системе координат, где данный элемент газа покоится, а справа стоит изменение величины $n \bar{A}$ за счет столкновений.

Если имеется полный набор физических величин $\{\bar{A}_n\}$, то совокупность уравнений (1.35) для этих величин эквивалентна уравнению Больцмана.

Иногда уравнение (1.35) удобно записывать в форме

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t} \int d\Gamma f A + \nabla \left(\mathbf{V} \int d\Gamma f A \right) + \nabla \int d\Gamma f A \mathbf{u} &= \\ &= - \int d\Gamma I_{st} A\end{aligned} \quad (1.36)$$

Из всей совокупности подобных уравнений выделенную роль играют уравнения для интегралов движения, для которых, согласно свойству (2) интеграла столкновений, правая часть обращается в нуль.

Пусть $A(\Gamma) = m v_i$ - импульс молекулы. Тогда

$$n m \frac{d}{dt} V_i + \nabla_k \int d\Gamma f m v_i u_k = 0$$

и

$$\begin{aligned}\int d\Gamma f m v_i u_k &= \int d\Gamma f m (V_i + u_i) u_k = \\ &= \int d\Gamma f m u_i u_k = \Pi_{ik}\end{aligned}$$

поскольку $V_i \int d\Gamma f u_k = 0$ по смыслу величины $\mathbf{u}$. В терминах гидродинамики

$$\Pi_{ik} = p\delta_{ik} - \sigma_{ik},$$

где, как будет показано ниже, коэффициент p имеет смысл давления, а σ_{ik} - тензор вязких напряжений, причем $S p \sigma = 0$.

Таким образом, мы получили еще одно уравнение гидродинамики (уравнение Навье-Стокса):

$$nm \frac{d}{dt} V_i + \nabla_k \Pi_{ik} = 0. \quad (1.37)$$

В гидродинамике вид тензора σ_{ik} получается из феноменологических соображений. В кинетической теории газов вид этого тензора будет получен из решения кинетического уравнения. Одновременно будет найдено выражение для коэффициента вязкости через микроскопические характеристики взаимодействия молекул.

Пусть теперь

$$A(\Gamma) = E = \frac{mv^2}{2} + \varepsilon_{in}$$

Тогда

$$\begin{aligned} n \frac{d\bar{E}}{dt} + \nabla_i \int d\Gamma f E u_i &= 0 \\ \bar{E} &= \frac{1}{n} \int d\Gamma f \left(\frac{mv^2}{2} + \varepsilon_{in} \right) \end{aligned}$$

Подставляя в это уравнение выражение $\mathbf{v} = \mathbf{V} + \mathbf{u}$, получим

$$\bar{E} = \frac{mV^2}{2} + \frac{1}{n} \int d\Gamma f \left(\frac{mu^2}{2} + \varepsilon_{in} \right)$$

По определению температура неравновесного газа находится как

$$c_V T = \frac{1}{n} \int d\Gamma f \left(\frac{mu^2}{2} + \varepsilon_{in} \right)$$

Далее

$$\begin{aligned} \int d\Gamma f E u_i &= \int d\Gamma f u_i \left(\frac{mV^2}{2} + \frac{mu^2}{2} + m u_k V_k + \varepsilon_{in} \right) = \\ &= m V_k \int d\Gamma f u_i u_k + \int d\Gamma f u_i \left(\frac{mu^2}{2} + \varepsilon_{in} \right) = V_k \Pi_{ik} + q_i \end{aligned}$$

где

$$q_i = \int d\Gamma f u_i \left(\frac{mu^2}{2} + \varepsilon_{in} \right)$$

- плотность потока энергии в той системе отсчета, где рассматриваемый элемент газа покоится, т.е. поток тепла.

Итак, в отсутствие внешних сил

$$n \frac{d}{dt} \left(\frac{mV^2}{2} + c_V T \right) + \nabla_i (V_k \Pi_{ik} + q_i) = 0$$

Используя уравнение Навье-Стокса, получим уравнение переноса тепла в газе:

$$nc_V \frac{dT}{dt} + \Pi_{ik} \nabla_i V_k + \nabla_i q_i = 0 \quad (1.38)$$

Если в рассматриваемой задаче газ покоится, т.е. $\mathbf{V} = \mathbf{0}$, то $\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t}$ и, следовательно,

$$nc_V \frac{\partial T}{\partial t} + \nabla_i q_i = 0$$

что является обычным уравнением теплопроводности.

В гидродинамике выражение для потока тепла определяется феноменологически. В кинетической теории газов оно следует из уравнения Больцмана.

8.1.6 1.6. τ -Approximation and Maxwell-Boltzmann Distribution

τ -Approximation and Local Equilibrium Maxwell-Boltzmann Distribution

Обычно при решении кинетических задач наибольшую трудность представляет вычисление правой части уравнения Больцмана. Более того, интеграл столкновений точно вычисляется только в некоторых весьма специальных случаях, и поэтому приходится прибегать к его модельному представлению. Наиболее популярно так называемое τ - приближение. В этом приближении интеграл столкновений записывается в виде

$$I_{st} = \frac{f - f^0}{\tau},$$

где τ - константа, имеющая размерность времени, f^0 - локально-равновесное распределение.

Локально-равновесным является распределение вида

$$f^0 = n(\mathbf{r}, t) \left(\frac{m}{2\pi T(\mathbf{r}, t)} \right)^{3/2} e^{-\frac{m(\mathbf{v} - \mathbf{V}(\mathbf{r}, t))^2}{2T(\mathbf{r}, t)}},$$

в котором, в отличие от распределения Максвелла, параметры $n, \mathbf{V}, T$ являются функциями координат и времени и в точности совпадают соответственно с плотностью, скоростью и температурой неравновесного состояния:

$$\begin{aligned} \int d\Gamma f^0 &= \int d\Gamma f = n(\mathbf{r}, t); d\Gamma = d^3\mathbf{v} \\ \int d\Gamma f^0 \mathbf{v} &= \int d\Gamma f \mathbf{v} = n(\mathbf{r}, t) \mathbf{V}(\mathbf{r}, t) \\ \int d\Gamma f^0 \frac{m(\mathbf{v} - \mathbf{V}(\mathbf{r}, t))^2}{2} &= \int d\Gamma f \frac{m(\mathbf{v} - \mathbf{V}(\mathbf{r}, t))^2}{2} = \\ &= \frac{3}{2} n(\mathbf{r}, t) T(\mathbf{r}, t) \end{aligned} \quad (1.39)$$

Подчеркнем, что температурой неравновесного газа мы называем (с точностью до $c_V = 3/2$) среднюю энергию молекулы газа в системе координат, где выбранный элемент газа покоится. Такое определение удобно тем, что оно позволяет считать справедливым уравнение состояния газа

$$p = nT$$

в отсутствие термодинамического равновесия. Действительно, механическое определение давления задается равенством

$$p = \frac{1}{3} \Pi_{ii}$$

то есть давление есть сферическая часть тензора напряжений $\Pi_{ik} = \int d\Gamma f m u_i u_k$. Поэтому

$$p = \frac{1}{3} \int d\Gamma f m u^2 = \frac{2}{3} \int d\Gamma f \frac{m u^2}{2} = nT$$

Представление интеграла столкновений в τ -приближении удовлетворяет всем трем основным свойствам реального интеграла столкновений:

1. $I_{st}(f^0) = 0$;
2. $\int d\Gamma I_{st} A = \frac{1}{\tau} \left\{ \int d\Gamma f A - \int d\Gamma f^0 A \right\} = 0$, если $A = 1, v, E$;
3. $\dot{s} = \int d\Gamma I_{st} \ln f = \frac{1}{\tau} \int d\Gamma (f - f^0) \ln f = -\frac{1}{\tau} \int d\Gamma (f - f^0) \ln \frac{f}{f^0} \geq 0$.
Равенство 2 обусловлено выбором параметров локально-равновесного распределения. При доказательстве равенства 3 мы воспользовались тождеством

$$\int d\Gamma (f - f^0) \ln f^0 = 0$$

которое доказывается подстановкой явного выражения для f^0 и использованием соотношений (1.39) и неравенства

$$(x - 1) \ln x \geq 0$$

справедливого при любых положительных x . Смысл константы τ становится очевидным, если найти решение пространственно однородного уравнения Больцмана:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{1}{\tau} (f - f^0).$$

Это решение имеет вид

$$f - f^0 = \varphi e^{-\frac{t}{\tau}}$$

где φ - начальное отклонение от локально-равновесного распределения.

Таким образом, τ имеет смысл времени релаксации распределения к своему локально-равновесному значению. Позже мы покажем, что τ -приближение является вполне приличным приближением, когда отклонение от равновесия

имеет вид, близкий к одной из собственных функций так называемого оператора столкновений.

Следует оговорить, что τ -приближение нужно с осторожностью применять в нестационарных задачах (распространение звука, собственные колебания плазмы), в которых зависимость n, V, T от $\mathbf{r}$ и t диктуется не внешними условиями, а самим решением кинетического уравнения. В этих случаях n, V, T являются функционалами от вида решения f и простота вида τ -приближения весьма обманчива.

8.1.7 1.7. Calculation of Viscosity in τ Approximation by Grad Method

Перейдем к вычислению тензора вязких напряжений σ_{ik} применительно к одноатомному газу. Найдём уравнение переноса тензора вязких напряжений:

$$\sigma_{ik} = - \int d\Gamma f m u_i u_k + p \delta_{ik}$$

Прежде всего перепишем это уравнение в виде

$$\begin{aligned} \sigma_{ik} &= - \int d\Gamma f m \{u_i u_k\} - \int d\Gamma f m \frac{1}{3} u^2 \delta_{ik} + p \delta_{ik} \\ \{a_i b_k\} &\equiv \frac{1}{2} (a_i b_k + b_i a_k) - \frac{1}{3} \delta_{ik} \mathbf{a} \mathbf{b}; \text{Sp}\{\dots\} = 0 \end{aligned}$$

Для одноатомного газа по определению

$$\int d\Gamma f \frac{m u^2}{2} = \frac{3}{2} n T$$

Поэтому

$$\sigma_{ik} = - \int d\Gamma f m \{u_i u_k\} + \delta_{ik} (-nT + p)$$

Чтобы $\text{Sp} \sigma = 0$, необходимо выбрать коэффициент $p = nT$. Согласно уравнению состояния (для локально-равновесного распределения), $p = nT$. Поэтому в случае локально-равновесного распределения диагональную часть тензора Π можно интерпретировать как давление. Итак,

$$\sigma_{ik} = - \int d\Gamma f m \{u_i u_k\}$$

В уравнении

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int d\Gamma f A + \nabla \left(\mathbf{V} \int d\Gamma f A \right) + \\ + \nabla \int d\Gamma f \mathbf{A} \mathbf{u} = - \int d\Gamma I_{st} A \end{aligned} \quad (1.41)$$

сделаем подстановку $A(\Gamma) = m \{v_i v_k\}$. Получим

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int d\Gamma f m \{v_i v_k\} + \nabla_l \left(V_l \int d\Gamma f m \{v_i v_k\} \right) + \\ + \nabla_l \int d\Gamma m \{v_i v_k\} f u_l = - \int d\Gamma I_{st} m \{v_i v_k\} \end{aligned} \quad (1.42)$$

Преобразуем первый интеграл (равный второму) следующим образом:

$$\int d\Gamma f m \{(V_i + u_i)(V_k + u_k)\} = mn \{V_i V_k\} - \sigma_{ik}$$

Здесь $\int d\Gamma f m \{V_i u_k + u_i V_k\} = 0$ от того, что газ как целое покоится в системе отсчета, движущейся со скоростью $\mathbf{V}$, то есть $\int d\Gamma f m u_k = 0$.

Рассмотрим третий интеграл в левой части уравнения (1.42):

$$\begin{aligned} \int d\Gamma m f \{ (V_i + u_i) (V_k + u_k) \} u_l &= V_i V_k \int d\Gamma m f u_l + \\ &+ \int d\Gamma f m \{ V_i u_k + u_i V_k \} u_l + \int d\Gamma f m \{ u_i u_k \} u_l \end{aligned} \quad (1.43)$$

Первый член тождественно равен нулю, второй равен

$$\begin{aligned} \int d\Gamma f m \left(V_i u_k u_l + u_i V_k u_l - \frac{2}{3} \delta_{ik} V_m u_m u_l \right) &= \\ = V_i (p \delta_{kl} - \sigma_{kl}) + V_k (p \delta_{il} - \sigma_{il}) - \frac{2}{3} \delta_{ik} V_m (p \delta_{ml} - \sigma_{ml}). \end{aligned} \quad (1.44)$$

Из курса гидродинамики известно, что тензор вязких напряжений пропорционален производным от скорости $\sigma_{ik} \sim \frac{\partial V_k}{\partial x_i}$, то есть обратно пропорционален масштабу неоднородности. Поэтому в выражении (1.44) можно пренебречь членами, содержащими σ_{ik} , по сравнению с членами, содержащими давление p , если ограничиться крупномасштабными неоднородными состояниями газа. По этой же причине можно опустить последний член в выражении (1.43). Мы не будем доказывать это обстоятельство строго, но заметим, что в случае локально-равновесного распределения этот член обращается в нуль в силу нечетности подынтегрального выражения. Это соответствует отсутствию вязкого потока при локально-равновесном распределении. Итак, третий интеграл в левой части уравнения Грэда (1.41) равен

$$p \left(V_i \delta_{kl} + V_k \delta_{il} - \frac{2}{3} \delta_{ik} V_l \right).$$

В τ -приближении правая часть уравнения Грэда равна

$$\begin{aligned} & - \int d\Gamma I_{st} m \{ v_i v_k \} = \\ & = - \int d\Gamma \frac{f - f^0}{\tau} (\{ V_i V_k \} + 2 \{ V_i u_k \} + \{ u_i u_k \}) = \frac{\sigma_{ik}}{\tau} \end{aligned}$$

При получении последнего равенства мы воспользовались свойством 2 (см. (1.40)) и тем, что

$$\int d\Gamma f^0 \{ u_i u_k \} = \frac{1}{3} \delta_{ik} \int d\Gamma f^0 \{ u_l u_l \} = 0.$$

Носледнее непосредственно проверяется и означает отсутствие вязкого потока при локально-равновесном распределении.

Собирая все члены, получим

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (m n \{ V_i V_k \} - \sigma_{ik}) + \nabla_l (m n V_l \{ V_i V_k \} - V_l \sigma_{ik}) + \\ + \nabla_l \left[p \left(V_i \delta_{kl} + V_k \delta_{il} - \frac{2}{3} \delta_{ik} V_l \right) \right] = \frac{\sigma_{ik}}{\tau} \end{aligned} \quad (1.45)$$

Преобразуем первые два члена следующим образом:

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial t} (mn \{V_i V_k\} - \sigma_{ik}) = \\
& = m \{V_i V_k\} \frac{\partial n}{\partial t} + 2mn \left\{ V_i \frac{\partial V_k}{\partial t} \right\} - \frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial t} \\
& \nabla_l mn V_l \{V_i V_k\} - \nabla_l V_l \sigma_{ik} = m \{V_i V_k\} \nabla_l n V_l + \\
& + mn V_l \nabla_l \{V_i V_k\} - \nabla_l V_l \sigma_{ik} = \\
& = m \{V_i V_k\} \nabla_l n V_l + 2mn V_l \{V_i \nabla_l V_k\} - \nabla_l V_l \sigma_{ik}
\end{aligned}$$

В силу уравнения непрерывности первые члены этих соотношений в сумме дают нуль. Оставшиеся члены переписываются в виде

$$2mn \left\{ V_i \frac{dV_k}{dt} \right\} - \frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial t} - \nabla_l (V_l \sigma_{ik})$$

Далее преобразуем оставшийся в левой части (1.45) член:

$$\begin{aligned}
& \nabla_l \left[p \left(V_i \delta_{kl} + V_k \delta_{il} - \frac{2}{3} \delta_{ik} V_l \right) \right] = \\
& = \nabla_k (p V_i) + \nabla_i (p V_k) - \frac{2}{3} \delta_{ik} \nabla_l (p V_l) = \\
& = p \left(\nabla_k V_i + \nabla_i V_k - \frac{2}{3} \delta_{ik} \nabla_l V_l \right) + \\
& + \left(V_i \nabla_k p + V_k \nabla_i p - \frac{2}{3} \delta_{ik} V_l \nabla_l p \right) = \\
& = 2p \{ \nabla_i, V_k \} + 2 \{ V_i, \nabla_k p \}
\end{aligned}$$

В результате находим

$$\begin{aligned}
& 2mn \left\{ V_i, \frac{dV_k}{dt} \right\} + 2 \{ V_i, \nabla_k p \} - \frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial t} - \nabla_l (V_l \sigma_{ik}) + \\
& + 2p \{ \nabla_i, V_k \} = \frac{\sigma_{ik}}{\tau}
\end{aligned}$$

Первые два члена преобразуем, используя уравнение Навье-Стокса (1.37). Тогда окончательно находим

$$\begin{aligned}
& 2mn \{ V_i, \nabla_l \sigma_{lk} \} - \frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial t} - \\
& - \nabla_l (V_l \sigma_{ik}) + 2p \{ \nabla_i, V_k \} = \frac{\sigma_{ik}}{\tau}
\end{aligned} \tag{1.46}$$

Если скорость газа медленно меняется и почти однородна, так что можно пренебречь производными от тензора вязких напряжений, то

$$\sigma_{ik} = 2p\tau \{ \nabla_i, V_k \} = \eta \left(\frac{\partial V_k}{\partial x_i} + \frac{\partial V_i}{\partial x_k} - \frac{2}{3} \delta_{ik} \nabla_l V_l \right).$$

Это - обычное гидродинамическое выражение для тензора вязких напряжений. При выводе этого выражения был еще отброшен член $\sim \sigma_{ik} \nabla_l V_l$. Это можно сделать, когда

$$\frac{V}{r_3} \ll \frac{1}{\tau},$$

где r_3 - характерный масштаб неоднородности скорости.
(ζ помощью понятия длины свободного пробега $r_2 = v_T \tau$ это неравенство переписывается в виде

$$\frac{V}{r_3} \frac{r_2}{v_T} \ll 1. \quad (1.47)$$

Поскольку почти всегда можно перейти в систему отсчета, где скорость газа V мала по сравнению со скоростью звука $c \sim v_T$ (за исключением случая ударной волны), то последнее условие почти всегда выполняется, и, следовательно, практически всегда можно записывать уравнение переноса для σ_{ik} в виде

$$\tau \frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial t} + \sigma_{ik} = \eta \left(\frac{\partial V_k}{\partial x_i} + \frac{\partial V_i}{\partial x_k} - \frac{2}{3} \delta_{ik} \nabla_l V_l \right).$$

Если скорость меняется периодически: $V \sim e^{-i\omega t}$, то

$$\sigma_{ik} = \frac{\eta}{1 - i\omega\tau} \left(\frac{\partial V_k}{\partial x_i} + \frac{\partial V_i}{\partial x_k} - \frac{2}{3} \delta_{ik} \nabla_l V_l \right)$$

Отсюда видно, что обычное выражение для тензора вязких напряжений справедливо при $\omega\tau \ll 1$, то есть для достаточно медленно изменяющихся движений. При этом же условии справедливо уравнение Навье-Стокса.

Обратим внимание, что попутно с построением уравнения переноса для σ_{ik} мы вычислили коэффициент динамической вязкости $\eta = p\tau$, который, как и в элементарной теории явлений переноса, известной из курса общей физики, оказывается пропорциональным времени релаксации.

8.1.8 1.8. Calculation of Thermal Conductivity Coefficients in the τ Approximation

Перейдем теперь к построению уравнения переноса потока тепла:

$$q_i = \int d\Gamma f \frac{m u^2}{2} u_i$$

Подставим в уравнение

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int d\Gamma f A + \nabla \left(\mathbf{v} \int d\Gamma f A \right) + \\ + \nabla \int d\Gamma f A \mathbf{u} = - \int d\Gamma I_{st} A \end{aligned}$$

выражение

$$A = q_i = \int d\Gamma f \frac{m v^2}{2} v_i$$

и перейдем в систему отсчета, в которой газ как целое покоится (это означает, что везде вместо v можно писать u). Тогда

$$\frac{\partial q_i}{\partial t} + \nabla_k \int d\Gamma f \frac{m u^2}{2} u_k u_i = - \int d\Gamma I_{st} \frac{m u^2}{2} u_i$$

Ограничимся локально-равновесным распределением при вычислении второго члена:

$$\begin{aligned} \int d\Gamma f^0 \frac{mu^2}{2} u_k u_i &= \frac{1}{3} \delta_{ik} \int d\Gamma f^0 \frac{mu^4}{2} = \\ &= \frac{1}{3} \delta_{ik} \frac{mnv_T^4}{2} 5!! = \frac{5}{2} \frac{mnT^2}{m^2} \delta_{ik} = \frac{5}{2} \frac{pT}{m} \delta_{ik} \end{aligned}$$

Здесь мы вначале воспользовались тем, что при усреднении по сферически симметричному распределению усреднение по направлениям эквивалентно замене:

$$u_k u_i \rightarrow \frac{1}{3} \delta_{ik} u^2$$

а затем формулой

$$\int d\Gamma f^0 v^{2k} = nv_T^{2k} (2k+1)!!, v_T = \sqrt{T/m}$$

Правую часть уравнения переноса тепла вычислим в τ -приближении:

$$- \int d\Gamma I_{st} \frac{mu^2}{2} u_i = -\frac{1}{\tau} \int d\Gamma (f - f^0) \frac{mu^2}{2} u_i = -\frac{q_i}{\tau}$$

Здесь мы воспользовались тем, что в равновесном состоянии поток тепла равен нулю. Таким образом,

$$\frac{\partial q_i}{\partial t} + \nabla_i \left(\frac{5}{2} \frac{pT}{m} \right) = -\frac{q_i}{\tau}$$

В покоящемся газе давление постоянно, а $5/2$ есть теплоемкость c_p . Поэтому уравнение переноса потока тепла перепишется в виде

$$\tau \frac{\partial q_i}{\partial t} + q_i = -\kappa \nabla_i T, \kappa = c_p \frac{p\tau}{m}$$

Если температура меняется по закону $T \sim e^{-i\omega t}$, то

$$q_i = -\frac{\kappa}{1 - i\omega\tau} \nabla_i T$$

Мы видим, что, выражение для потока тепла принимает свой гидродинамический вид

$$q_i = -\kappa \nabla_i T$$

только в случае, когда период температурных колебаний велик по сравнению с временем релаксации

$$\omega\tau \ll 1.$$

Попутно с выяснением пределов применимости гидродинамического приближения мы нашли величину кинетического коэффициента, коэффициента теплопроводности κ .

Метод вычисления кинетических коэффициентов, опирающийся на систему уравнений переноса, называется методом Грэда. Проанализируем, что представляет собой система уравнений гидродинамики вместе с входящими туда кинетическими коэффициентами с точки зрения метода Грэда.

Напомним определение момента функции распределения:

$$n\bar{A}(\mathbf{r}, t) = \int d\Gamma f(\mathbf{r}, \Gamma, t) A(\Gamma)$$

При выводе уравнений гидродинамики для получения уравнения непрерывности нам понадобился один момент: $A(\Gamma) = 1$; вывод уравнения Навье-Стокса потребовал еще три момента: $A(\Gamma) = mv_i$ (при этом, однако, мы не получили замкнутой системы уравнений: появились новые величины - тензоры Π_{ik} и соответственно σ_{ik}); уравнение переноса тепла получилось при рассмотрении переноса величины $A(\Gamma) = E = \frac{mv^2}{2} + \varepsilon_{in}$ (то есть еще один момент, но опять без явного вида q_i). В этом разделе при вычислении тензора σ_{ik} мы ввели еще 5 моментов $A(\Gamma) = m\{u_i u_k\}$. (след тензора равен нулю); и, наконец, при вычислении q_i - еще 3 момента $A(\Gamma) = \frac{mu^2}{2} u_i$.

Общее число введенных таким образом моментов равно 13. Такое приближение претендует на более детальное описание природы, чем это делает гидродинамика, которая получается из 13 -моментного приближения как частный случай решения дисперсионных уравнений для σ_{ik} и q_i .

8.1.9 1.9. Linearization of the Boltzmann Equation

(Линеаризация уравнения Больцмана по малому параметру отклонения от локально-равновесного распределения)

В предыдущем разделе мы нашли в τ -приближении кинетические коэффициенты, исходя из уравнений переноса. Сейчас мы обратимся к изучению наиболее употребительного в настоящее время метода вычисления кинетических коэффициентов - метода Чепмена-Энскога.

Напомним кратко связь гидродинамики с кинетической теорией. Уравнения гидродинамики описывают плотность числа частиц $n(\mathbf{r}, t)$, скорость газа $\mathbf{V}(\mathbf{r}, t)$ и температуру $T(\mathbf{r}, t)$ как функцию координат и времени. Система гидродинамических уравнений является замкнутой только в том случае, когда тензор вязких напряжений и поток тепла выражаются через градиенты n , $\mathbf{V}$, T .

В курсе гидродинамики доказывается, что

$$\begin{aligned}\sigma_{ik} &= \eta \left(\frac{\partial V_k}{\partial x_i} + \frac{\partial V_i}{\partial x_k} - \frac{2}{3} \delta_{ik} \operatorname{div} \mathbf{V} \right) + \zeta \operatorname{div} \mathbf{V} \\ q_i &= -\kappa \nabla_i T\end{aligned}$$

причем кинетические коэффициенты η, ζ, κ рассматриваются как эмпирические параметры.

Вычисление кинетических коэффициентов является основной задачей кинетической теории газов, то есть их выражение через микроскопические характеристики взаимодействия молекул.

При решении такой задачи необходимо помнить, что характерные размеры и времена, на которых меняются макроскопические величины $n(\mathbf{r}, t)$, $\mathbf{V}(\mathbf{r}, t)$, $T(\mathbf{r}, t)$, велики по сравнению со средней длиной свободного пробега молекул. Это означает, что функция распределения f близка к локально-равновесной f^0 , и поэтому

вместо решения нелинейного уравнения Больцмана достаточно решать задачу, линеаризованную по малому отклонению χ от f^0 :

$$\begin{aligned}f &= f_0(1 + \chi), |\chi| \ll 1 \\ f^0 &= n(\mathbf{r}, t) \left(\frac{m}{2\pi T(\mathbf{r}, t)} \right)^{3/2} e^{-\frac{m(\mathbf{v} - \mathbf{v}(\mathbf{r}, t))^2}{2T(\mathbf{r}, t)}},\end{aligned}$$

где χ - мера отклонения состояния газа от равновесного состояния.

Реальная и локально-равновесная функции распределения дают точные значения плотности, скорости и температуры:

$$\begin{aligned}
n &= \int d\Gamma f_0 = \int d\Gamma f_0(1 + \chi) \\
n\mathbf{V} &= \int d\Gamma f_0 \mathbf{v} = \int d\Gamma f_0(1 + \chi) \mathbf{v}
\end{aligned} \tag{1.48}$$

$$nc_v T = \int d\Gamma f_0 \frac{mu^2}{2} = \int d\Gamma f_0(1 + \chi) \frac{mu^2}{2} \tag{1.49}$$

Условие для неравновесной добавки может быть представлено в виде

$$\begin{aligned}
\langle \chi, 1 \rangle &= \int d\Gamma f_0 \chi = 0 \\
\langle \chi, u \rangle &= \int d\Gamma f_0 \chi u = 0 \\
\left\langle \chi, \frac{mu^2}{2} \right\rangle &= \int d\Gamma f_0 \chi \frac{mu^2}{2} = 0
\end{aligned}$$

То есть функция χ ортогональна интегралам движения, если при определении скалярного произведения иметь в виду весовой множитель f^0 .

8.1.10 1.10. The Left Side of the Kinetic Equation

Левая часть уравнения Больцмана в нулевом приближении по χ имеет вид

$$\begin{aligned}
\frac{\partial f}{\partial t} + (\mathbf{v} \nabla) f &\approx \frac{\partial f_0}{\partial t} + (\mathbf{v} \nabla) f_0 = f_0 N, \\
N &= \frac{\partial \ln f_0}{\partial t} + (\mathbf{v} \nabla) \ln f_0.
\end{aligned}$$

Величина N не равна нулю, поскольку параметры $n(\mathbf{r}, t)$, $\mathbf{V}(\mathbf{r}, t)$, $T(\mathbf{r}, t)$ локально-равновесного распределения зависят от времени и координат.

При термодинамическом равновесии плотность газа, скорость и температура являются постоянными величинами, и, следовательно, функция χ есть мера отклонения состояния газа от равновесного состояния, выраженная через градиенты $n(\mathbf{r}, t)$, $\mathbf{V}(\mathbf{r}, t)$, $T(\mathbf{r}, t)$.

Введя скорость $\mathbf{u} = \mathbf{v} - \mathbf{V}$, в которой данный элемент газа покоится, получим

$$\begin{aligned}
N &= \left[\frac{\partial}{\partial t} + (\mathbf{v} \nabla) \right] \left\{ \ln n - \frac{3}{2} \ln T - \frac{m}{2T} (\mathbf{v} - \mathbf{V})^2 \right\} = \\
&= \left[\frac{\partial}{\partial t} + (\mathbf{V} \nabla) \right] \{ \} + (\mathbf{u} \nabla) \{ \} = \frac{1}{n} \frac{dn}{dt} - \\
&- \frac{3}{2} \frac{1}{T} \frac{dT}{dt} + \frac{m}{2T^2} (\mathbf{v} - \mathbf{V})^2 \frac{dT}{dt} + \frac{m}{T} (\mathbf{v} - \mathbf{V}) \frac{d\mathbf{V}}{dt} + \\
&+ \frac{1}{n} (\mathbf{u} \nabla) n + \left(\frac{mu^2}{2T^2} - \frac{3}{2T} \right) (\mathbf{u} \nabla) T + \frac{m}{T} u_\alpha (\mathbf{u} \nabla) V_\alpha
\end{aligned}$$

Заменим в последнем выражении полные производные по времени величин $n(\mathbf{r}, t)$, $\mathbf{V}(\mathbf{r}, t)$, $T(\mathbf{r}, t)$ их градиентами согласно уравнениям гидродинамики, записанным в линейном по градиентам приближении.

Уравнение непрерывности имеет вид

$$\frac{dn}{dt} = -n \operatorname{div} \mathbf{V}$$

Уравнение

$$nC_v \frac{dT}{dt} + \Pi_{ik} \nabla_i V_k + \nabla_i q_i = 0 \quad (1.50)$$

в линейном по градиентам приближении получится, если Π_{ik} и q_i вычислять в нулевом порядке, так как сама операция ∇_i дает первый порядок, а учет χ дает еще один порядок по градиентам. Поэтому

$$\begin{aligned} \nabla_i q_i &= \nabla_i \int d\Gamma f u_i \frac{mu^2}{2} = \nabla_i \int d\Gamma f_0 u_i \frac{mu^2}{2} = 0 \\ \Pi_{ik} &= \int d\Gamma f m u_i u_k = \int d\Gamma f_0 m u_i u_k \end{aligned}$$

По определению $p = 1/3 \Pi_{ii} = \frac{1}{3} \int d\Gamma f_0 m u_i u_i = \frac{2}{3} \int d\Gamma f_0 \frac{mu^2}{2} = \frac{2}{3} n c_V T = nT$.
Симметричный тензор

$$\Pi_{ik} = a \delta_{ik} \int d\Gamma f_0 m u^2 = 3a \delta_{ik} p$$

откуда

$$3p = \Pi_{ii} = 9ap \rightarrow a = 1/3.$$

Поэтому

$$\Pi_{ik} = \delta_{ik} p$$

Тогда уравнение для переноса тепла (1.50) запишется в следующем виде:

$$nC_v \frac{dT}{dt} + p \operatorname{div} \mathbf{V} = 0$$

И перепишем уравнение Навье-Стокса

$$nm \frac{d}{dt} V_i + \nabla_k \Pi_{ik} = 0$$

в линейном по градиентам приближении. В этом приближении

$$\nabla_k \Pi_{ik} \approx \nabla_k p \delta_{ik} = \nabla_i p$$

Поэтому

$$\begin{aligned} mn \frac{d\mathbf{V}}{dt} &= -\nabla p = -n \nabla T - T \nabla n \\ \frac{1}{n} \frac{dn}{dt} - \frac{3}{2} \frac{1}{T} \frac{dT}{dt} + \frac{m}{2T^2} (v - V)^2 \frac{dT}{dt} + \frac{m}{T} (\mathbf{v} - \mathbf{V}) \frac{d\mathbf{V}}{dt} &= \\ &= -\operatorname{div} \mathbf{V} + \operatorname{div} \mathbf{V} - \frac{m}{2T^2} u^2 \frac{2p \operatorname{div} \mathbf{V}}{3n} + \\ &\quad + \frac{m}{nmT} \mathbf{u} (-n \nabla T - T \nabla n) = \\ &= -\frac{m}{3T} u^2 \operatorname{div} \mathbf{V} - \frac{1}{nT} \mathbf{u} (n \nabla T + T \nabla n) \end{aligned}$$

К полученному выражению следует добавить

$$+\frac{1}{n} (u \nabla) n + \left(\frac{mu^2}{2T^2} - \frac{3}{2T} \right) (u \nabla) T + \frac{m}{T} u_\alpha (u \nabla) V_\alpha$$

Члены, пропорциональные ∇n , взаимно уничтожаются. Итак,

$$N = \left(\frac{mu^2}{2T} - \frac{5}{2} \right) (u \nabla) \ln T + \frac{m}{T} \left(u_\alpha u_\beta - \frac{1}{3} \delta_{\alpha\beta} u^2 \right) \nabla_\beta V_\alpha$$

1.11. Линеаризация интеграла столкновений по малому отклонению от локально-равновесного распределения. Оператор столкновения и его свойства. Обоснование τ -приближения

Определим вид интеграла столкновений (см. (1.23))

$$I_{st} = \int d\Gamma_1 d\Gamma' d\Gamma'_1 w' \{ f f_1 - f' f'_1 \}$$

в линейном приближении по малому отклонению от равновесного распределения:

$$\begin{aligned} I_{st} &= \int d^3\Gamma w' \{ f^0 f_1^0 (1 + \chi) (1 + \chi_1) - \\ &\quad - f^{0'} f_1^{0'} (1 + \chi') (1 + \chi'_1) \} \approx \\ &\approx f^0 \int d^3\Gamma w' f_1^0 \{ \chi + \chi_1 - \chi' - \chi'_1 \} \end{aligned}$$

поскольку $f^0 f_1^0 = f^{0'} f_1^{0'}$; напомним, что $d^3\Gamma = d\Gamma_1 d\Gamma' d\Gamma'_1$. Введем обозначение $I_{st} = f_0 \hat{\Omega} \chi$, где

$$\hat{\Omega} \chi = \int d^3\Gamma w' f_1^0 \{ \chi + \chi_1 - \chi' - \chi'_1 \}$$

Скалярное произведение уже было определено выше следующим образом:

$$\langle a, b \rangle = \int d\Gamma f_0 a b$$

Поэтому

$$\langle \varphi, \hat{\Omega} \chi \rangle = \int d\Gamma f_0 \varphi \hat{\Omega} \chi$$

Для одноатомных газов $w = w'$. Отсюда следует самосопряженность оператора Ω .

В самом деле, представим исследуемое скалярное произведение в виде

$$\begin{aligned} \langle \varphi, \hat{\Omega} \chi \rangle &= \int d^4\Gamma f^0 f_1^0 \varphi w' \{ \chi + \chi_1 - \chi' - \chi'_1 \} = \\ &= (\Gamma \leftrightarrow \Gamma_1) = \int d^4\Gamma f^0 f_1^0 w' \varphi_1 \{ \chi + \chi_1 - \chi' - \chi'_1 \} = \\ &= \frac{1}{2} \int d^4\Gamma f^0 f_1^0 w' (\varphi + \varphi_1) \{ \chi + \chi_1 \} - \\ &\quad - \frac{1}{2} \int d^4\Gamma f^{0'} f_1^{0'} w' (\varphi + \varphi_1) \{ \chi' + \chi'_1 \} \end{aligned} \quad (1.51)$$

Первый интеграл в правой части (1.51) симметричен относительно замены $\varphi \longleftrightarrow \chi$. В последнем интеграле делаем замену $\Gamma \longleftrightarrow \Gamma'$; $\Gamma_1 \longleftrightarrow \Gamma'_1$. Учитывая, что $w = w'$ и $f^0 f_1^0 = f^{0'} f_1^{0'}$, находим

$$\begin{aligned} &\int d^4\Gamma f^0 f_1^0 w' (\varphi' + \varphi'_1) \{ \chi + \chi_1 \} = \\ &= \frac{1}{2} \int d^4\Gamma f^{0'} f_1^{0'} w' (\chi + \chi_1) \{ \varphi' + \varphi'_1 \} \end{aligned}$$

Поэтому последний интеграл также не изменяется при преобразовании $\varphi \longleftrightarrow \chi$, что доказывает самосопряженность оператора $\hat{\Omega}$:

$$\langle \varphi, \hat{\Omega} \chi \rangle = \langle \chi, \hat{\Omega} \varphi \rangle.$$

Докажем неотрицательность диагональных матричных элементов этого оператора. Для этого воспользуемся законом возрастания энтропии (см. свойство 3 интеграла столкновений):

$$\int d\Gamma I_{st} \ln f \geq 0$$

который представим в виде

$$\begin{aligned} \int d\Gamma I_{st} \ln f &= \int d\Gamma I_{st} \ln f^0 + \int d\Gamma I_{st} \ln(1 + \chi) \approx \\ &\approx \int d\Gamma I_{st} \chi = \int d\Gamma \chi f_0 \hat{\Omega} \chi = \langle \chi, \hat{\Omega} \chi \rangle \geq 0 \end{aligned}$$

Пусть

$$\hat{\Omega} \psi_n = \Omega_n \psi_n,$$

где ψ_n - полный набор ортогональных функций. Для функции

$$\chi = \sum_m c_m \psi_m; c_m = c_m(r, t), \psi_m = \psi_m(\Gamma) \quad (1.52)$$

имеем

$$\begin{aligned} \langle \chi, \hat{\Omega} \chi \rangle &= \sum_n c_n c_m \langle \psi_m, \hat{\Omega} \psi_n \rangle = \sum_n c_n c_m \Omega_n \langle \psi_m, \psi_n \rangle = \\ &= \sum_n c_n^2 \langle \psi_n, \psi_n \rangle \Omega_n \geq 0. \end{aligned}$$

Откуда следует, что $\Omega_n \geq 0$, так как $c_n^2 \langle \psi_n, \psi_n \rangle \geq 0$. Если функция ψ_n - интеграл движения, то собственное значение $\Omega_n = 0$. Покажем, что ненулевые Ω_n имеют смысл частот релаксации.

Пространственно однородное уравнение Больцмана с линеаризованным интегралом столкновений имеет вид

$$\frac{\partial}{\partial t} (f_0(1 + \chi)) = -f_0 \hat{\Omega} \chi \quad (1.5)$$

Для стационарного локально-равновесного распределения имеем

$$f_0 \frac{\partial}{\partial t} \chi = -f_0 \hat{\Omega} \chi$$

Перепишем его в форме

$$\sum_m \psi_m \frac{\partial c_m}{\partial t} = - \sum_m c_m \Omega_m \psi_m$$

Поскольку ψ_m - ортогональный набор, то

$$\frac{\partial c_m}{\partial t} = -c_m \Omega_m, c_m = c_m(0) e^{-\Omega_m t}$$

Если предположить, что все Ω_n равны, то

$$I_{st} = f_0 \hat{\Omega} \chi = \sum_m f_0 c_m \Omega_m \psi_m = \Omega f_0 \chi = \frac{f - f_0}{\tau} \quad (1.54)$$

Величина Ω обозначена как τ^{-1} . Такое приближение называется приближением времени релаксации или τ -приближением. τ -приближение можно применять и в случае неравных друг другу значений Ω_n , если в приличном приближении можно ограничиться одним членом ряда (1.52).

8.1.11 1.12. Calculation of Viscosity by the Chapman-Enskog Method

Пусть температура газа однородна ($\nabla T = 0$). Тогда неравновесность газа обусловлена неоднородным распределением скорости потока V . В этом случае

$$N = \frac{m}{T} \left(u_\alpha u_\beta - \frac{1}{3} \delta_{\alpha\beta} u^2 \right) \nabla_\beta V_\alpha \quad (1.55)$$

Любой тензор второго ранга есть суперпозиция своих неприводимых частей $T^{(0)}, T_\gamma^{(1)}, \{T_{\alpha\beta}\}$, определенных следующим образом:

$$\begin{aligned} T_{\alpha\beta} &= \delta_{\alpha\beta} T^{(0)} + e_{\alpha\beta\gamma} T_\gamma^{(1)} + \{T_{\alpha\beta}\} \\ T^{(0)} &= \frac{1}{3} T_{\gamma\gamma}; T_\gamma^{(1)} = \frac{1}{2} e_{\gamma\delta\omega} T_{\delta\omega} \\ \{T_{\alpha\beta}\} &= \frac{1}{2} \left(T_{\alpha\beta} + T_{\beta\alpha} - \frac{2}{3} \delta_{\alpha\beta} T_{\gamma\gamma} \right) \end{aligned} \quad (1.56)$$

Применим это представление к тензору $\nabla_\beta V_\alpha$:

$$\nabla_\beta V_\alpha = \frac{1}{3} \delta_{\alpha\beta} \operatorname{div} V + e_{\alpha\beta\gamma} (\operatorname{rot} V)_\gamma + \{\nabla_\beta V_\alpha\}$$

Поскольку

$$\begin{aligned} \left(u_\alpha u_\beta - \frac{1}{3} \delta_{\alpha\beta} u^2 \right) \delta_{\alpha\beta} &= 0, \\ \left(u_\alpha u_\beta - \frac{1}{3} \delta_{\alpha\beta} u^2 \right) e_{\alpha\beta\gamma} &= u_\alpha u_\beta e_{\alpha\beta\gamma} = \\ &= -u_\alpha u_\beta e_{\beta\alpha\gamma} = -u_\beta u_\alpha e_{\beta\alpha\gamma} = -u_\alpha u_\beta e_{\alpha\beta\gamma} = 0, \end{aligned}$$

то

$$\begin{aligned} N &= \frac{m}{T} \left(u_\alpha u_\beta - \frac{1}{3} \delta_{\alpha\beta} u^2 \right) \{\nabla_\beta V_\alpha\} = \\ &= \frac{m}{T} \{u_\alpha u_\beta\} \{\nabla_\beta V_\alpha\}, \end{aligned}$$

так как $(u_\alpha u_\beta - \frac{1}{3} \delta_{\alpha\beta} u^2)$ и $\{\nabla_\beta V_\alpha\}$ - симметричные тензоры.

Таким образом, линеаризованное уравнение Больцмана принимает вид

$$\Omega \chi + \frac{m}{T} \{u_\alpha u_\beta\} \{\nabla_\beta V_\alpha\} = 0. \quad (1.5)$$

Оператор Ω действует только на Γ и не действует на координаты. Поэтому легко избавиться от функции $\{\nabla_\beta V_\alpha\}$.

Ищем решение в виде

$$\chi = \frac{m}{T} \{ \nabla_\beta V_\alpha \} \chi_{\alpha\beta} \rightarrow \Omega \chi_{\alpha\beta} + \{ u_\alpha u_\beta \} = 0.$$

Если решение χ известно, то

$$\begin{aligned} \sigma_{ik} &= p\delta_{ik} - \Pi_{ik} = p\delta_{ik} - \int d\Gamma f^0 (1 + \chi) m u_i u_k = \\ &= p\delta_{ik} - \int d\Gamma f^0 m u_i u_k - \int d\Gamma f^0 \chi m u_i u_k \end{aligned}$$

Второй интеграл уже считался выше и равен $p\delta_{ik}$. Поэтому

$$\sigma_{ik} = - \int d\Gamma f^0 \chi m u_i u_k$$

В силу известного свойства скалярного произведения $\langle u^2 \chi \rangle = 0$ можно в подынтегральном выражении заменить $u_i u_k$ на $\{ u_i u_k \}$. Поэтому

$$\begin{aligned} \sigma_{ik} &= - \int d\Gamma f^0 \chi m \{ u_i u_k \} = -m \langle \{ u_i u_k \} \chi \rangle = \\ &= -\frac{m^2}{T} \{ \nabla_\beta V_\alpha \} \langle \{ u_i u_k \} \chi_{\alpha\beta} \rangle = \eta_{ik\alpha\beta} \{ \nabla_\beta V_\alpha \} \\ \eta_{ik\alpha\beta} &= -\frac{m^2}{T} \langle \{ u_i u_k \} \chi_{\alpha\beta} \rangle = \frac{m^2}{T} \langle \chi_{\alpha\beta} \Omega \chi_{ik} \rangle \end{aligned} \quad (1.58)$$

Выражение (1.58) определяет связь между тензором вязких напряжений и градиентом скорости. Следовательно, тензор $\eta_{ik\alpha\beta}$ является обобщенным кинетическим коэффициентом вязкости.

Ниже мы увидим, что в изотропном случае он сводится к скаляру - коэффициенту первой вязкости η .

Покажем на примере тензора $\eta_{ik\alpha\beta}$, каким образом принцип симметрии кинетических коэффициентов Онсагера непосредственно следует из уравнения Больцмана. Если справедлив принцип детального равновесия $w = w'$, то оператор Ω является самосопряженным:

$$\langle \chi_{\alpha\beta} \Omega \chi_{ik} \rangle = \langle \chi_{ik} \Omega \chi_{\alpha\beta} \rangle \rightarrow \eta_{ik\alpha\beta} = \eta_{\alpha\beta ik}$$

что является содержанием принципа Онсагера.

Вследствие H -теоремы Больцмана диагональные элементы оператора Ω неотрицательны:

$$\eta_{ikik} \geq 0.$$

Это условие означает, что диагональные кинетические коэффициенты всегда неотрицательны. Заметим, что положительность кинетических коэффициентов в термодинамике доказывается из постулата возрастания энтропии, а в кинетической теории и закон возрастания энтропии, и

положительность кинетических коэффициентов являются следствиями уравнения Больцмана и закона унитарности столкновений.

Итак, задача вычисления любого кинетического коэффициента χ сводится к решению уравнения

$$\hat{\Omega} \chi + N = 0 \quad (1.59)$$

причем с точностью до множителя $\chi = \langle \chi, \Omega \chi \rangle$.

Интегрирование этого уравнения может быть точно проведено в простейших модельных случаях. В общем случае оно решается приближенно, и наиболее употребительным приближенным методом решения является так называемый метод моментов, или метод Чепмена-Энскога.

8.1.12 1.13. Derivation of the Chapman-Enskog Method

Обоснование этого метода проводится с помощью вариационного принципа.

Домножим уравнение (1.59) на $f^0 \chi$ и проинтегрируем по Γ :

$$\langle \chi, \Omega \chi \rangle + \langle N, \chi \rangle = 0$$

Рассмотрим класс функций, определенных условием

$$\langle \varphi, \Omega \varphi \rangle + \langle N, \varphi \rangle = 0 \quad (1.60)$$

Легко проверить, что таких функций бесконечно много, поскольку любая функция

$$-\psi \frac{\langle N \psi \rangle}{\langle \psi, \Omega \psi \rangle}$$

удовлетворяет этому уравнению:

$$\frac{\langle N \psi \rangle^2}{\langle \psi, \Omega \psi \rangle^2} \langle \psi, \Omega \psi \rangle - \frac{\langle N \psi \rangle^2}{\langle \psi, \Omega \psi \rangle} = 0$$

Покажем, что из всех функций, удовлетворяющих условию (1.60), максимальное значение для функционала $\langle \varphi, \Omega \varphi \rangle$ даст точное решение кинетического уравнения (1.59). В самом деле, из закона возрастания энтропии следует, что

$$A = \langle (\varphi - \chi), \Omega(\varphi - \chi) \rangle \geq 0.$$

Раскроем это выражение, считая оператор Ω самосопряженным и учитывая соотношения (1.59) и (1.60):

$$\begin{aligned} \langle \varphi, \Omega \varphi \rangle - \langle \varphi, \Omega \chi \rangle - \langle \chi, \Omega \varphi \rangle + \langle \chi, \Omega \chi \rangle &= \\ = \langle \varphi, \Omega \varphi \rangle + \langle \chi, \Omega \chi \rangle - 2\langle \varphi, \Omega \chi \rangle &= \\ = \langle \varphi, \Omega \varphi \rangle + \langle \chi, \Omega \chi \rangle + 2\langle \varphi, N \rangle &= \\ = \langle \chi, \Omega \chi \rangle - \langle \varphi, \Omega \varphi \rangle \geq 0. \end{aligned}$$

Знак равенства имеет место при условии $\chi = \varphi$. Отсюда следует, что уравнение (1.59) можно представить как решение вариационной задачи на условный экстремум функционала $\langle \varphi, \Omega \varphi \rangle$ при условии (1.60).

Приближенное решение уравнения (1.59) будем искать в виде конечного разложения:

$$\varphi = \sum_{n=1}^{n=n_0} c_n \psi_n(\Gamma)$$

где $\{\psi_n(\Gamma)\}$ - некоторый набор линейно независимых функций.

Тогда, как следствие вариационного принципа, наилучшим приближением функции такого вида к точному решению будет функция, коэффициенты c_n которой приводят к максимальному значению величины:

$$\langle \varphi, \Omega \varphi \rangle = \sum_{n=1}^{n=n_0} c_n c_m \Omega_{mn}$$

и удовлетворяют условию (1.60):

$$\sum_{n,m} c_n c_m \Omega_{mn} + \sum_k c_k N_k = 0 \quad (1.61)$$

где $\Omega_{mn} = \langle \psi_m, \Omega \psi_n \rangle$, $N_k = \langle \psi_k, N \rangle$.

Коэффициенты c_n будем искать методом неопределенных множителей Лагранжа. Для этого составим функцию

$$\Phi = \sum_{n,m} c_n c_m \Omega_{mn} - \lambda \left\{ \sum_{n,m} c_n c_m \Omega_{mn} + \sum_k c_k N_k \right\}.$$

Согласно методу Лагранжа,

$$\frac{\partial \Phi}{\partial c_n} = 2(1 - \lambda) \sum_m c_m \Omega_{mn} - \lambda N_k = 0. \quad (1.62)$$

Умножим последнее выражение на c_k и просуммируем по $k = 1 \div n_0$:

$$2(1 - \lambda) \sum_{km} c_k c_m \Omega_{mn} - \lambda \sum_k c_k N_k = 0.$$

Используя то, что обе суммы в последнем выражении равны между собой с точностью до знака (см. (1.61)) и не равны нулю, получаем

$$2(1 - \lambda) + \lambda = 0; \quad \lambda = 2.$$

Найденное значение λ подставим в выражение (1.62). Тогда

$$\sum_m c_m \Omega_{kn} + N_k = 0 \quad (1.63)$$

Таким образом, для определения n_0 коэффициентов c_k мы имеем систему линейных алгебраических неоднородных уравнений.

Если число коэффициентов n_0 стремится к бесконечности, то система уравнений (1.63) эквивалентна исходному интегральному уравнению (1.59) и определяет точное решение задачи в виде разложения по полному набору функций $\{\psi_n(\Gamma)\}$.

В случае конечного числа n_0 эта система уравнений определяет приближенное решение уравнения (1.59), причем, как следует из вариационного принципа, это решение дает значение кинетического коэффициента $k_{n_0} = \langle \varphi, \Omega \varphi \rangle$, которое меньше точного значения этого коэффициента.

Вариационный принцип не дает возможности определить точность вычисления кинетического коэффициента, но гарантирует, что

$$k_1 \leq k_2 \leq \dots \leq k_{n_0} \leq \dots k_\infty.$$

Приближенное решение тем ближе к точному значению (при заданном n_0), чем меньше недиагональные матричные элементы Ω_{mn} по сравнению с диагональными. В частности, если система функций $\{\psi_n(\Gamma)\}$ совпадает с системой собственных функций оператора столкновений, т.е.

$$\hat{\Omega} \psi_n = \Omega_n \psi_n,$$

то матрица Ω_{mn} диагональна и метод моментов сразу приводит к точному решению задачи:

$$c_k = -\frac{N_k}{\Omega_k}.$$

Обычно решение задачи на собственные значения оператора неизвестно, и в качестве функций ψ_n выбирают набор ортогональных полиномов от скорости, причем в качестве ψ_1 берут неоднородность N , так что

$$N_k = \langle \psi_k, N \rangle = \langle N, N \rangle \delta_{k1}.$$

Практика показывает, что метод моментов дает хорошее приближение уже для достаточно небольшого n_0 . Физической причиной этого является то, что в нейтральных газах потенциал взаимодействия молекул - короткодействующий и вероятность столкновения слабо зависит от относительной скорости сталкивающихся частиц.

Обычно уже одномоментное приближение оказывается достаточно удовлетворительным, двухмоментное приближение меняет кинетические коэффициенты не более чем на 10%, а последующие приближения дают поправку не более 1%. Исключением из этого правила является применение метода моментов к плазме. В этом случае хороший результат получается только при $n \approx 10$. Это связано с тем, что вероятность столкновения при кулоновском взаимодействии сильно зависит от относительной скорости сталкивающихся частиц ($\sim 1/v_{\text{отн}}^4$ - формула Резерфорда).

8.1.13 1.14. A One-Moment Approximation

Повторим решение задачи

$$\hat{\Omega}\chi + N = 0$$

в одномоментном приближении. Ищем χ в виде $\chi = cN$. Умножим исходное уравнение на Nf^0 и проинтегрируем по всем Γ :

$$c\Omega_{NN} + \langle N, N \rangle = 0.$$

Отсюда следует, что

$$c = -\frac{\langle N, N \rangle}{\Omega_{NN}}$$

Интеграл столкновений равен

$$I_{st} = f^0 \hat{\Omega}\chi = -f^0 N = -\frac{1}{c} f^0 \chi = -\frac{1}{c} (f - f^0)$$

11куда

$$\tau = -c = \frac{\langle N, N \rangle}{\Omega_{NN}}.$$

В этом приближении оператор Ω сводится к умножению на τ^{-1} .

Раньше мы показали, что тензор вязких напряжений равен

$$\sigma_{ik} = \eta_{ik\alpha\beta} \{ \nabla_\beta V_\alpha \},$$

$$\eta_{ik\alpha\beta} = -\frac{m^2}{T} \langle \{ u_i u_k \} \chi_{\alpha\beta} \rangle,$$

где $\chi_{\alpha\beta}$ удовлетворяют уравнению

$$\Omega\chi_{\alpha\beta} + \{u_\alpha u_\beta\} = 0.$$

[3 τ -приближении

$$\frac{1}{\tau}\chi_{\alpha\beta} + \{u_\alpha u_\beta\} = 0.$$

Следовательно,

$$\chi_{\alpha\beta} = -\tau \{u_\alpha u_\beta\}.$$

Таким образом,

$$\begin{aligned} \eta_{ik\alpha\beta} &= \frac{m^2\tau}{T} \langle \{u_i u_k\}, \{u_\alpha u_\beta\} \rangle = \\ &= \frac{m^2\tau}{T} \int d^3\mathbf{v} f^0 \{u_i u_k\} \{u_\alpha u_\beta\}. \end{aligned} \quad (1.64)$$

Для вычисления этого интеграла следует заметить, что он обращается в нуль, если хотя бы одна из компонент повторяется нечетное число раз. В силу симметрии подынтегрального выражения интеграл можно представить в виде

$$\eta_{ik\alpha\beta} = A\delta_{ik}\delta_{\alpha\beta} + B\delta_{i\alpha}\delta_{k\beta} + C\delta_{i\beta}\delta_{k\alpha}.$$

Поскольку

$$\{u_i u_k\} = u_i u_k - \frac{1}{3}\delta_{ik}u^2 = 0$$

то

$$\eta_{ii\alpha,\beta} = 3A\delta_{\alpha\beta} + B\delta_{\alpha\beta} + C\delta_{\alpha\beta},$$

или

$$3A + B + C = 0.$$

Из явного вида интеграла следует (симметрия кинетических коэффициентов), что $\eta_{ik\alpha\beta} = \eta_{\alpha\beta ik}$; поэтому $B = C$. Тогда получаем, что

$$B = C = -\frac{3}{2}A$$

и

$$\eta_{ik\alpha\beta} = B \left(-\frac{2}{3}\delta_{ik}\delta_{\alpha\beta} + \delta_{i\alpha}\delta_{k\beta} + \delta_{i\beta}\delta_{k\alpha} \right). \quad (1.65)$$

Упростим правую часть соотношения (1.64) по парам индексов i, α и k, β :

$$\begin{aligned} \langle \{u_i u_k\}, \{u_i u_k\} \rangle &= \left\langle \left(u_i u_k - \frac{1}{3}\delta_{ik}u^2 \right), \left(u_i u_k - \frac{1}{3}\delta_{ik}u^2 \right) \right\rangle = \\ &= \left\langle u^4 + \frac{1}{3}u^4 - \frac{2}{3}u^4 \right\rangle = \frac{2}{3}u^4 \end{aligned}$$

С другой стороны, из (1.65) следует, что $\eta_{ikik} = 10B$. Отсюда следует, что

$$\frac{m^2\tau}{T} \int d^3\mathbf{u} f^0 \frac{2}{3} u^4 = 10B$$

Поскольку

$$\langle u^k \rangle = u_T^k (k+1)!!,$$

то

$$B = \frac{m^2\tau}{T} n \left(\frac{T}{m} \right)^2 \frac{2}{30} \times 3 \times 5 = \tau T n = \tau p.$$

Таким образом,

$$\eta_{ik\alpha\beta} = \tau p \left(-\frac{2}{3} \delta_{ik} \delta_{\alpha\beta} + \delta_{i\alpha} \delta_{k\beta} + \delta_{i\beta} \delta_{k\alpha} \right)$$

и

$$\begin{aligned} \sigma_{ik} &= \tau p \left(-\frac{2}{3} \delta_{ik} \delta_{\alpha\beta} + \delta_{i\alpha} \delta_{k\beta} + \delta_{i\beta} \delta_{k\alpha} \right) \{ \nabla_\beta V_\alpha \} = \\ &= \tau p \left(-\frac{2}{3} \delta_{ik} \delta_{\alpha\beta} + \delta_{i\alpha} \delta_{k\beta} + \delta_{i\beta} \delta_{k\alpha} \right) \times \\ &\quad \times \frac{1}{2} \left(\nabla_\beta V_\alpha + \nabla_\alpha V_\beta - \frac{2}{3} \delta_{\alpha\beta} \operatorname{div} \mathbf{V} \right) = \\ &= \eta \left(\nabla_i V_k + \nabla_k V_i - \frac{2}{3} \delta_{ik} \operatorname{div} \mathbf{V} \right). \end{aligned}$$

Обратим внимание, что выражение для коэффициента вязкости в точности совпадает с выражением, которое может быть получено из элементарных соображений.

8.1.14 1.15. Calculation of Thermal Conductivity

Перейдем к вычислению коэффициента теплопроводности методом Чепмена-Энскога. Будем считать, что газ как целое покоится, а его неравновесность обусловлена исключительно неоднородным стационарным распределением температуры $T(\mathbf{R})$, то есть в газе создан градиент температуры. В этом случае неоднородность

$$N = \left(\frac{mu^2}{2T} - \frac{5}{2} \right) (u_\alpha \nabla_\alpha) \frac{1}{T} \ln T,$$

и линеаризованное уравнение Больцмана имеет вид

$$\Omega\chi = - \left(\frac{mu^2}{2T} - \frac{5}{2} \right) u_\alpha \frac{1}{T} \nabla_\alpha \ln T \quad (1.66)$$

Ищем решение этого уравнения в виде

$$\chi = \chi_\alpha \nabla_\alpha \ln T$$

Тогда

$$\Omega\chi_\alpha + \left(\frac{mu^2}{2T} - \frac{5}{2} \right) u_\alpha = 0 \quad (1.67)$$

Пусть решение уравнения (1.66) известно. Вычислим поток энергии

$$q_\alpha = \int d\Gamma f \frac{mu^2}{2} u_\alpha = \int d\Gamma f_0 (1 + \chi) \frac{mu^2}{2} u_\alpha$$

Поскольку при локально-равновесном распределении тепловой поток отсутствует, то

$$\begin{aligned} q_\alpha &= \int d\Gamma f_0 \chi \frac{mu^2}{2} u_\alpha = \int d\Gamma f_0 \chi \left(\frac{mu^2}{2} - \frac{5}{2} T \right) u_\alpha = \\ &= \int d\Gamma f_0 \left(\frac{mu^2}{2} - \frac{5}{2} T \right) u_\alpha \chi_\beta \nabla_\beta \ln T = \\ &= \int d\Gamma f_0 \left(\frac{mu^2}{2T} - \frac{5}{2} \right) u_\alpha \chi_\beta \nabla_\beta T = \\ &= \left\langle \left(\frac{mu^2}{2T} - \frac{5}{2} \right) u_\alpha, \chi_\beta \right\rangle \nabla_\beta T = -\kappa_{\alpha\beta} \nabla_\beta T. \end{aligned}$$

Здесь, добавляя в интеграл член $\frac{5}{2}T$, мы воспользовались тем, что $\langle \chi, u_\alpha \rangle = 0$. Поэтому коэффициент теплопроводности

$$\kappa_{\alpha\beta} = - \left\langle \left(\frac{mu^2}{2T} - \frac{5}{2} \right) u_\alpha, \chi_\beta \right\rangle. \quad (1.68)$$

В τ -приближении уравнение (1.67) переписывается как

$$\frac{1}{\tau} \chi_\alpha + \left(\frac{mu^2}{2T} - \frac{5}{2} \right) u_\alpha = 0$$

и имеет решение

$$\chi_\alpha = \tau \left(\frac{mu^2}{2T} - \frac{5}{2} \right) u_\alpha$$

Вычисление интеграла производится элементарно

$$\kappa_{\alpha\beta} = \tau \int d\Gamma f_0 \left(\frac{mu^2}{2T} - \frac{5}{2} \right)^2 u_\alpha u_\beta = A \delta_{\alpha\beta}$$

След тензора

$$\begin{aligned} \kappa_{\alpha\alpha} &= 3A = \tau \int d\Gamma f_0 \left(\frac{mu^2}{2T} - \frac{5}{2} \right)^2 u^2 = \\ &= \tau n \left\{ \left(\frac{m}{2T} \right)^2 \frac{1}{n} \int d\Gamma f_0 u^6 - 2 \frac{m}{T} \frac{5}{2} \frac{1}{n} \int d\Gamma f_0 u^4 + \right. \\ &\quad \left. + \frac{25}{4} \frac{1}{n} \int d\Gamma f_0 u^2 \right\} = \\ &= \tau n \left\{ \frac{1}{4} \left(\frac{m}{T} \right)^2 \left(\frac{T}{m} \right)^3 7!! + \frac{5}{2} \left(\frac{m}{T} \right) \left(\frac{T}{M} \right)^2 5!! + \right. \\ &\quad \left. + \frac{25}{4} \left(\frac{T}{M} \right) 3!! \right\} = \frac{p\tau}{m} \frac{15}{2} \end{aligned}$$

Поэтому

$$A = \frac{p\tau}{m} \frac{5}{2} = \frac{p\tau c_p}{m}$$

Следовательно,

$$\kappa_{\alpha\beta} = \kappa \delta_{\alpha\beta}, \quad \kappa = \frac{p\tau c_p}{m}$$

8.1.15 1.16. Transfer Phenomena in Gas Maxwellian Molecules

Покажем, что линеаризованное кинстическое уравнение

$$\hat{\Omega}\chi + N = 0$$

может быть точно решено в одном очень важном частном случае, когда вероятность столкновений $gd\sigma$ не зависит от относительной скорости сталкивающихся частиц. Этот случай был обнаружен Максвеллом, и газ, в котором взаимодействие между молекулами приводит к подобной ситуации, называется максвелловским.

Из курса механики известно, что при рассеянии в поле $U \sim r^{-n}$ дифференциальное сечение рассеяния имеет вид

$$d\sigma = \Phi(\theta)g^{-\frac{4}{n}}dO$$

где θ - угол рассеяния; элемент телесного угла $dO = \sin\theta d\theta d\varphi$; g - скорость частицы на бесконечности, а в случае взаимодействия двух молекул - относительная скорость их движения в системе центра инерции. Нетрудно видеть, что при $n = 4$ вероятность столкновений не зависит от g и имеет наиболее простой вид

$$gd\sigma = \Phi(\theta)dO \quad (1.69)$$

Таким образом, максвелловские молекулы взаимодействуют друг с другом по закону

$$U \sim \frac{1}{r^4}$$

Запишем оператор столкновений через дифференциальное сечение рассеяния $d\sigma$ аналогично тому, как мы это

делали для интеграла столкновений. Для этого достаточно вспомнить, что $w'd\Gamma'_1 = gd\sigma$. Поэтому

$$\begin{aligned} \hat{\Omega}\chi &= \int d\Gamma_1 d\Gamma'_1 d\Gamma'_1 f_1^0 (\chi + \chi_1 - \chi' - \chi'_1) w' = \\ &= \int d\Gamma_1 gd\sigma f_1^0 (\chi + \chi_1 - \chi' - \chi'_1) \end{aligned}$$

и для газа максвелловских молекул (1.69) оператор столкновений принимает вид

$$\hat{\Omega}\chi = \int d\Gamma_1 \Phi(\theta) dO f_1^0 (\chi + \chi_1 - \chi' - \chi'_1) \quad (1.70)$$

При определении коэффициента вязкости (см. (1.64)) мы показали, что он может быть найден, если вычислить скалярное произведение:

$$\eta_{ik\alpha\beta} = -\frac{m^2}{T} \langle \{u_i, u_k\}, \chi_{\alpha\beta} \rangle \quad (1.71)$$

при этом $\{u_i, u_k\}$ - неприводимый тензор, а $\chi_{\alpha\beta}$ является решением уравнения

$$\hat{\Omega}\chi_{\alpha\beta} + \{u_i, u_k\} = 0 \quad (1.72)$$

Если мы докажем теперь, что функция $\{u_i, u_k\}$ является собственной функцией оператора столкновений (1.70), то тем самым мы точно решим уравнение (1.72).

Итак, вычислим

$$\hat{\Omega} \{u_\alpha, u_\beta\} = \int d\Gamma_1 dO \Phi(\theta) f_1^0 \times \quad (1.73)$$

$$\times [\{u_\alpha, u_\beta\} + \{u_{\alpha 1}, u_{\beta 1}\} - \{u'_\alpha, u'_{\beta'}\} - \{u'_{\alpha 1}, u'_{\beta 1}\}]$$

В квадратных скобках этого интеграла перейдем к новым переменным - скорости движения центра инерции

сталкивающихся частиц $\mathbf{G}$ и к относительным скоростям сталкивающихся частиц $\mathbf{g}$ и $\mathbf{g}'$ /. Подобная процедура нам уже знакома:

$$\begin{cases} \mathbf{u} = \mathbf{G} + \frac{\mathbf{g}}{2} \\ \mathbf{u}_1 = \mathbf{G} - \frac{\mathbf{g}}{2} \end{cases}, \begin{cases} \mathbf{u}' = \mathbf{G} + \frac{\mathbf{g}'}{2} \\ \mathbf{u}'_1 = \mathbf{G} - \frac{\mathbf{g}'}{2} \end{cases}, |\mathbf{g}| = |\mathbf{g}'|. \quad (1.74)$$

В этих переменных квадратная скобка в (1.73) принимает вид

$$\frac{1}{2} [\{g_\alpha g_\beta\} - \{g'_\alpha g'_\beta\}]$$

Выражение (1.73) содержит интегрирование по азимутальному углу φ . Единственной подынтегральной функцией, зависящей от него, является $\{g'_\alpha g'_\beta\}$. Поэтому имеет смысл усреднить ее по этому углу, тем более, что из соображений симметрии понятно, что от него ничего не должно зависеть.

Неприводимый тензор

$$\overline{\{g'_\alpha g'_\beta\}}^\varphi = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \{g'_\alpha g'_\beta\} d\varphi$$

является, очевидно, функцией угла рассеяния θ .

В самом общем случае тензор второго ранга $T_{\alpha\beta}$, являющийся функцией вектора $\mathbf{A}$, может быть представлен в форме

$$T_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta} f_1(A^2) + e_{\alpha\beta\gamma} A_\gamma f_2(A^2) + \{A_\alpha A_\beta\} f_3(A^2)$$

где $e_{\alpha\beta\gamma}$ - совершенно антисимметричный единичный тензор третьего ранга, а f_1, f_2, f_3 - произвольные функции.

Если $T_{\alpha\beta}$ - неприводимый симметричный тензор, то $f_1 = f_2 = 0$. Действительно, условие $f_2 = 0$ следует из

симметрии тензора $T_{\alpha\beta}$, а условие $f_1 = 0$ следует из требования $T_{\alpha\alpha} = 0$.

Применяя эти соображения к тензору $\overline{\{g'_\alpha g'_\beta\}}^\varphi$, являющемуся функцией вектора $\mathbf{g}$, получим

$$\overline{\{g'_\alpha g'_\beta\}} = f(g^2) \{g_\alpha g_\beta\}$$

Вспоминая, что $\{g'_\alpha g'_\beta\} = g'_\alpha g'_\beta - \frac{1}{3} \delta_{\alpha\beta} g^2$, и домножая обе части на $g_\alpha g_\beta$, получим

$$\overline{\left\{g'_\alpha g'_\beta g_\alpha g_\beta - \frac{1}{3} g^4\right\}}^\varphi = f(g^2) \frac{2}{3} g^4$$

Но $g'_\alpha g_\alpha = g^2 \cos \theta$, где θ - угол рассеяния в системе центра масс. Поэтому

$$f(g^2) = \frac{1}{2} (3 \cos^2 \theta - 1)$$

Подставляя все это в (1.73), получим

$$\begin{aligned}
\hat{\Omega} \{u_\alpha, u_\beta\} &= \\
&= \frac{1}{2} \int d\Gamma_1 f_1^0 \{g_\alpha g_\beta\} \int \Phi(\theta) dO \left[1 - \frac{1}{2} (3 \cos^2 \theta - 1) \right] = \\
&= \frac{3}{4} \int d\Gamma_1 f_1^0 \{g_\alpha g_\beta\} \int \Phi(\theta) \sin^2 \theta dO
\end{aligned}$$

В соответствии с формулами (1.74) в интеграле по Γ_1 перейдем к старым переменным (в лабораторную систему координат):

$$\begin{aligned}
\int d\Gamma_1 f_1^0 \{g_\alpha g_\beta\} &= \int d\Gamma_1 f_1^0 \{(u_\alpha - u_{\alpha 1})(u_\beta - u_{\beta 1})\} = \\
&= \int d\Gamma_1 f_1^0 (\{u_\alpha u_\beta\} + \{u_{\alpha 1} u_{\beta 1}\} - \{u_\alpha u_{\beta 1}\} - \{u_{\alpha 1} u_\beta\}) = \\
&= n \{u_\alpha u_\beta\}
\end{aligned}$$

Здесь второй член в круглых скобках при $\alpha \neq \beta$ обращается в нуль, в силу нечетности подынтегрального выражения, а при $\alpha = \beta$ обращается в нуль следует из того, что интеграл от $\{u_{\alpha 1} u_{\beta 1}\}$ совпадает с интегралом от $\frac{1}{3} \{u_{\alpha 1} u_{\alpha 1}\} = 0$. Обращение в нуль последних двух членов следует из нечетности подынтегрального выражения.

Таким образом, для газа максвелловских молекул $\chi_{\alpha\beta} == \{u_\alpha, u_\beta\}$ является собственной функцией оператора столкновений:

$$\hat{\Omega} \{u_\alpha, u_\beta\} = \frac{3}{4} n \int \Phi(\theta) \sin^2 \theta dO \cdot \{u_\alpha u_\beta\} = \Omega_\eta \{u_\alpha u_\beta\}$$

Тем самым мы точно нашли частоту релаксации вязкого потока:

$$\Omega_\eta = \frac{3}{4} n \int \Phi(\theta) \sin^2 \theta dO \quad (1.75)$$

Подставляя время релаксации вязкого потока $\tau_\eta = \Omega_\eta^{-1}$ в окончательную формулу для вязкости, получим

$$\eta = \tau_\eta p$$

Аналогично можно сосчитать коэффициент теплопроводности максвелловского газа. Газ максвелловских молекул представляет собой случай, когда

$$gd\sigma = \Phi(g, \cos \theta) \sin \theta d\theta d\phi$$

не зависит от g . В общем случае это не так. Однако при вычислении матричных элементов оператора столкновений наибольшую роль играют столкновения, относительная скорость которых порядка тепловой скорости молекул v_T .

Покажем это. Переходя к координатам центра инерции, найдем

$$\begin{aligned}
\langle \varphi, \hat{\Omega} \chi \rangle &= \int d^3 v d^3 v_1 f_1^0 f_1^0 g d\sigma \varphi (\chi + \chi_1 - \chi' - \chi'_1) = \\
&= \int d^3 G d^3 g f^0(\sqrt{2}\mathbf{G}) f^0(\mathbf{g}/\sqrt{2}) g d\sigma \varphi (\chi + \chi_1 - \chi' - \chi'_1)
\end{aligned}$$

Вид матричного элемента показывает, что в сферических координатах интегрирование по g входит с весом

$$g^2 e^{-\frac{mg^2}{4T}}$$

Эта функция имеет достаточно острый максимум в точке $g = 2\sqrt{T/m} = 2v_T$ и основной вклад в матричный элемент вносят значения $g = 2v_T$. При условии, что вероятность столкновения является плавной функцией g , матричный элемент может быть вычислен с помощью теории возмущений по отклонению от истинного сечения рассеяния максвелловских молекул.

8.2 Kinetics of Crystall Systems by Maksimov

Цель данного раздела дать студентам хотя бы общее представление о кинетических явлениях в твердых телах и методах их исследования. Мы ограничимся простейшими моделями структуры кристаллической решетки в диэлектриках и электронной структуры в металлах. Как и в кинетической теории газов, основной задачей будет рассмотрение стационарных процессов переноса в твердых телах, таких как теплопроводность, электропроводность, эффект Холла, термоЭДС. При этом мы будем использовать кинетическое уравнение в его простейшей форме - τ -приближении.

8.2.1 2.1. Crystal Lattice Vibrations

Изучение кинетики твердого тела начнем с диэлектриков. Свойства таких материалов определяются колебаниями кристаллической решетки. Напомним основные положения квантовой теории твердого тела.

В идеальном кристалле атомы колеблются около положений равновесия, которые расположены в узлах строго периодической решетки. Выбрав начало координат в одном из узлов, множество положений определим векторами вида

$$\mathbf{R} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3, \quad (2.1)$$

где $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ - основные периоды решетки, n_1, n_2, n_3 - целые числа. Координату атома, колеблющегося около узла $\mathbf{R}$, запишем в форме

$$\mathbf{r} = \mathbf{R} + \mathbf{u}(\mathbf{R}, t),$$

где $\mathbf{u}(\mathbf{R}, t)$ - смещение от положения равновесия.

Зависимость смещений от времени определяется системой уравнений Ньютона:

$$m\ddot{u}_R^\alpha = F_R^\alpha; \alpha = x, y, z. \quad (2.2)$$

Здесь F_R^α - силы, действующие на атом, колеблющийся около узла $\mathbf{R}$, со стороны остальных атомов. В кристалле, состоящем из N атомов, имеется $3N$ таких уравнений. Обычно амплитуда колебаний мала, поэтому силы можно рассматривать в линейном по амплитудам приближении. Тогда система $3N$ линейных уравнений (2.2) имеет $3N$ независимых решений. Эти решения называются собственными колебаниями решетки. Они имеют вид, очень похожий на плоские волны в сплошной среде:

$$u^\alpha(\mathbf{R}, t) = u^\alpha e^{i\mathbf{k}\mathbf{R} - i\omega t} \quad (2.3)$$

В отличие от случая сплошной среды, волновой вектор $\mathbf{k}$ определен неоднозначно. Векторы $\mathbf{k}$ и $\mathbf{k} + \mathbf{B}$ определяют одно и то же собственное колебание, если

$$\mathbf{B} = m_1\mathbf{b}_1 + m_2\mathbf{b}_2 + m_3\mathbf{b}_3, \quad (2.4)$$

причем

$$\mathbf{b}_i \mathbf{a}_k = 2\pi \delta_{ik}. \quad (2.5)$$

Здесь m_1, m_2, m_3 - целые числа. Векторы $\mathbf{b}$ задают положения узлов обратной решетки, основные периоды которой есть $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3$. В силу условия (2.5) колебания с волновыми векторами $\mathbf{k}$ и $\mathbf{k} + \mathbf{b}$ неразличимы.

Для простоты будем считать, что положения равновесия атомов образуют простую кубическую решетку с периодом a . Тогда обратная решетка тоже - простая кубическая решетка с периодом $2\pi/a$. При этом волновой вектор $\mathbf{k}$ всегда можно поместить внутрь куба

$$-\pi/a \leq k_\alpha \leq \pi/a; \alpha = x, y, z. \quad (2.6)$$

Этот элементарный куб в пространстве волновых векторов называют зоной Бриллюэна.

Строго говоря, периодичность конечного кристалла нарушается на границах. Чтобы не заниматься свойствами кристалла, связанными с его границами, на колебания кристалла накладываются условия Борна-Кармана. Согласно этим условиям, кристалл имеет форму куба размера L , причем атомы на противоположных гранях колеблются одинаково:

$$\begin{aligned} \mathbf{u}\left(-\frac{L}{2}, y, z\right) &= \mathbf{u}\left(\frac{L}{2}, y, z\right) \\ \mathbf{u}\left(y, -\frac{L}{2}, z\right) &= \mathbf{u}\left(y, \frac{L}{2}, z\right) \\ \mathbf{u}\left(y, z, -\frac{L}{2}\right) &= \mathbf{u}\left(y, z, \frac{L}{2}\right) \end{aligned} \quad (2.7)$$

Ясно, что для кристалла достаточно больших размеров искусственный характер этих условий роли не играет. Волны вида (2.3) удовлетворяют условиям Борна-Кармана, если волновой вектор принимает одно из $3N$ значений вида

$$k_i = \frac{2\pi}{L} l_i, \text{ где } l_i - \text{целые числа.}$$

Фазовый объем обратного пространства, приходящийся на одно колебание, равен $\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3$. В элементе куба (2.6) объема $d^3\mathbf{k}$ находится

$$\left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 d^3k$$

состояний вида (2.3) и суммирование по этим состояниям можно заменить на интегрирование по объему зоны Бриллюэна (2.6):

$$\sum_{\mathbf{k}} \rightarrow \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3\mathbf{k}, \sum_{\mathbf{k}} 1 = N \quad (2.8)$$

Таким образом, в простом идеальном кристалле, состоящем из N атомов, возможны собственные колебания с различными значениями волнового вектора, причем, как можно показать, для каждого $\mathbf{k}$ имеются три ветви колебаний, различающихся значениями частоты и направлением поляризации амплитуды $\mathbf{u}_\alpha$, всего $3N$ колебаний.

Согласно квантовой механике, энергия каждого колебания может принимать лишь дискретные значения, равные

$$E_{\mathbf{k},s} = \hbar\omega_{\mathbf{k},s} \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

(s - номер ветви). Это означает, что энергия колебаний кристалла полностью определяется указанием номера n возбуждения для каждого собственного колебания с волновым вектором $\mathbf{k}$ и номером ветви s :

$$n = n(\mathbf{k}, s).$$

В целях наглядности, вместо слов номер n возбуждения собственного колебания принято говорить число фононов с заданными k, s . Если кристалл находится в состоянии термодинамического равновесия, то это число задается распределением Бозе:

$$n(\mathbf{k}, s) = \left(e^{\frac{\hbar\omega_{\mathbf{k},s}}{T}} - 1 \right)^{-1} \quad (2.9)$$

Аналогию между номером возбуждения и числом бозечастиц можно распространить и на случай неравновесного состояния кристалла, описывая это состояниис функцией распределения фононов

$$n = n(\mathbf{k}, s, \mathbf{r}, t). \quad (2.10)$$

Такая функция показывает, сколько фононов с заданным "импульсом" $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ и энергией $\varepsilon = \hbar\omega_{\mathbf{k},s}$ имеется в данный момент в данном месте. Строгое обоснование возможности такого описания опирается на теорию неравновесной матрицы плотности и выходит за рамки курса. Стоит лишь заметить, что одновременное задание положения и импульса фонона в (2.10) предполагает классический характер поступательного движения, как и в случае обычного газа, состоящего из молекул. Последнее имеет место, если распределение мало меняется на расстояниях порядка длины волны характерных колебаний λ .

Оценим ее. Характерная энергия колебений по порядку величины совпадает с температурой T . Если s - характерная скорость звука, то

$$\lambda = \frac{c}{\omega} = \frac{\hbar c}{k_B T} = \frac{10^{-6}}{T} (\text{ cm}),$$

и, следовательно, распределением (2.10) можно пользоваться практически во всех кинетических задачах.

8.2.2 2.2. Kinetic Equation for Phonons. Thermal Conductivity of Dielectrics

Напишем кинетическое уравнение для фононов. Если фононы не рассеиваются, то их распределение удовлетворяет условию непрерывности в фазовом пространстве ($\mathbf{k}, \mathbf{r}$):

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla(vn) = 0 \quad (2.11)$$

Скорость распространения фононов в квазиклассическом пределе определяется, очевидно, скоростью распространения волновых пакетов, то есть групповой скоростью колебаний:

$$\mathbf{v} = \frac{\partial \omega}{\partial \mathbf{k}} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial \mathbf{k}} \quad (2.12)$$

Если фононы рассеиваются друг на друге или на примесях, то в правую часть уравнения (2.11) следует добавить интеграл столкновений в виде

$$I_{st} = \frac{1}{\tau} (n - n_0)$$

где τ - время релаксации, а n_0 - равновесная функция распределения фононов. В результате кинетическое уравнение принимает вид

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla(vn) = -\frac{1}{\tau} (n - n_0). \quad (2.13)$$

Найдем теплопроводность диэлектрика. Один фонон дает вклад в поток энергии, равный $v \varepsilon$. Полная плотность потока энергии фононов кристалла равна

$$\mathbf{q} = \sum_{\mathbf{k}, s} \mathbf{v} \varepsilon n \quad (2.14)$$

где суммирование идет по всем состояниям кристалла единичного объема (в формуле (2.8) нужно принять $V = 1$).

Умножая (2.13) на $\mathbf{v} \varepsilon$ и суммируя, получим

$$\frac{\partial q_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_\beta} \sum v_\alpha v_\beta \varepsilon n_0 = -\frac{q_\alpha}{\tau} \quad (2.15)$$

Здесь мы воспользовались тем, что равновесное распределение вклада в поток энергии не дает. Кроме того, в левой

части тензор потока энергии записан в нулевом приближении по отклонению от термодинамического равновесия (в духе кинетической теории газов). Поскольку равновесное (точнее локально-равновесное) распределение зависит от координат только через температуру, то

$$\frac{\partial}{\partial x_\beta} \sum v_\alpha v_\beta \varepsilon n_0 = \frac{1}{\tau} \kappa_{\alpha\beta} \nabla_\beta T,$$

причем тензор теплопроводности имеет вид

$$\kappa_{\alpha\beta} = \tau \frac{\partial}{\partial T} \sum v_\alpha v_\beta \varepsilon n_0 \quad (2.16)$$

Уравнение (2.15) принимает вид

$$\frac{\partial q_\alpha}{\partial t} + \frac{1}{\tau} \mathfrak{S} \tau_{\alpha\beta} \nabla_\beta T = -\frac{q_\alpha}{\tau}, \quad (2.17)$$

и для стационарного случая получим знакомую из кинетической теории газов формулу

$$q_\alpha = -\kappa_{\alpha\beta} \nabla_\beta T \quad (2.18)$$

Мы видим, что в общем случае теплопроводность кристалла описывается тензором теплопроводности (2.16). В кубических кристаллах все три главные оси кристалла эквивалентны, и интегрирование по направлениям так же, как и в случае газа, сводится к замене

$$v_\alpha v_\beta = \frac{1}{3} \delta_{\alpha\beta} v^2$$

Благодаря этому обстоятельству, тензор $\kappa_{\alpha\beta}$ диагонален:

$$\kappa_{\alpha\beta} = \kappa \delta_{\alpha\beta}, \text{ где } \kappa = \frac{1}{3} \tau \frac{\partial}{\partial T} \sum v^2 \varepsilon n_0.$$

В дебаевском приближении все три акустические ветви совпадают и равны $\omega_1 = \omega_2 = \omega_3 = ck$ для всех k ; c скорость звука. Это дает

$$\kappa = \frac{1}{3} \tau c^2 \frac{\partial}{\partial T} \sum \varepsilon n_0 = \frac{1}{3} \tau c^2 \frac{\partial E}{\partial T} = \frac{1}{3} \tau c^2 C. \quad (2.19)$$

Здесь E - энергия фононов в единице объема, C - удельная теплоемкость кристалла. Как и следовало ожидать, коэффициент теплопроводности кристалла очень похож по виду на коэффициент теплопроводности газов:

$$\kappa = \frac{C_p p}{m \Omega} = \frac{C_p n T \tau}{m} = \tau v_T^2 C_p.$$

8.2.3 2.3. Dependence of Thermal Conductivity of Dielectrics on T

Для определения температурной зависимости коэффициента теплопроводности диэлектриков от температуры проанализируем величины, входящие в формулу (2.19).

Температурная зависимость теплоемкости от температуры известна из курса статистической физики: при высоких температурах (температура $T \gg T_D$, где T_D - температура Дебая кристалла) $C = 3N$, где N - число атомов в единице объема, при низкой температуре $C \sim T^3$, $T \ll T_D$. Для определения температурной зависимости времени релаксации вернемся к системе уравнений, определяющих движение атомов кристалла:

$$m \ddot{u}_R^\alpha = F_R^\alpha.$$

До сих пор мы ограничивались в разложении сил F по смещениям линейным приближением и нашли, что атомы совершают чисто гармонические колебания, которые мы интерпретировали как свободное движение фононов. Если

в разложении F удержать квадратичные по u члены, то движение атомов кристалла становится ангармоничным.

С точки зрения фононов ангармонизм выглядит как взаимодействие фононов, приводящее к тому, что один фонон может развалиться на два и, наоборот, два фонона могут слиться в один. Например, перемножение двух колебаний вида (2.3):

$$\begin{aligned} e^{i\mathbf{k}_1 \mathbf{R} - i\omega_1 t} e^{i\mathbf{k}_2 \mathbf{R} - i\omega_2 t} &= e^{i(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2) \mathbf{R} - i(\omega_1 + \omega_2)t} = \\ &= e^{i\mathbf{k}_1 \mathbf{R} - i\omega_1 t} \end{aligned}$$

в квантовой механике интерпретируется как процесс слияния двух фононов в один, причем выполняются законы сохранения импульса и энергии:

$$\begin{aligned} \hbar \mathbf{k}_1 + \hbar \mathbf{k}_2 &= \hbar \mathbf{k} \\ \hbar \omega_1 + \hbar \omega_2 &= \hbar \omega \end{aligned} \quad (2.20)$$

Если при столкновении фононов импульс сохраняется, то полный импульс фононов

$$P = \sum_{\mathbf{k}, s} \hbar \mathbf{k} n_{\mathbf{k}, s}$$

является интегралом движения. Это значит, что поток фононов может быть отличен от нуля в состоянии равновесия, то есть при отсутствии градиента температуры.

Поскольку поток фононов неизбежно сопровождается переносом энергии, то мы получаем отличный от нуля поток энергии $\mathbf{q}$, когда $\nabla T = 0$. Согласно определению коэффициента теплопроводности $\mathbf{q} = -\kappa T$, и из этих рассуждений следует, что $\kappa = \infty$. Это находится в очевидном противоречии с реальным положением вещей, на что впервые обратил внимание Пайерлс.

Разрешение парадокса Пайерлса заключается в том, что импульс фонона не является однозначно определенной

величиной: векторы $\mathbf{k}$ и $(\mathbf{k} + \mathbf{B})$ определяют одно и то же колебание, если вектор $\mathbf{B}$ - вектор обратной решетки. Поэтому закон сохранения импульса должен выполняться с точностью до вектора вида $\mathbf{B}$, и наряду с процессами типа (2.20), которые называют нормальными процессами, возможны так называемые процессы переброса, при которых полный импульс фононов меняется на некоторый вектор обратной решетки $\hbar\mathbf{B}$:

$$\begin{aligned}\hbar\mathbf{k}_1 + \hbar\mathbf{k}_2 &= \hbar\mathbf{k} + \hbar\mathbf{B} \\ \hbar\omega_1 + \hbar\omega_2 &= \hbar\omega\end{aligned}\tag{2.21}$$

При столкновениях с перебросом излишний импульс фононов передается решетке в целом, и полный импульс фононов перестает быть интегралом движения.

Ясно, что время релаксации полного импульса фононов определяется частотой процессов с перебросом. Минимальное значение отличного от нуля волнового вектора $\mathbf{B}$ равно $\frac{2\pi}{a}$. Следовательно, процесс (2.21) возможен, если хотя бы один из векторов $\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2$ близок к $\frac{\pi}{a}$. Отсюда можно заключить, что частота процессов переброса пропорциональна числу фононов с большим волновым вектором, и, как следствие этого,

$$\frac{1}{\tau} \sim \sum_{|\mathbf{k}| \simeq \frac{\pi}{a}} n_{\mathbf{k}}.$$

Итак, нас интересуют фононы с импульсом $|\mathbf{k}| \simeq \frac{\pi}{a}$, то есть с энергией порядка температуры Дебая, $\varepsilon \approx T_D$. Число таких фононов определяется распределением Бозе:

$$n_{|\mathbf{k}| \simeq \frac{\pi}{a}} = (e^{\frac{\varepsilon}{T}} - 1)^{-1} \approx \begin{cases} \frac{T}{\varepsilon}, & (T \geq T_D), \\ e^{-\frac{\varepsilon}{T}}, & (T \ll T_D). \end{cases}$$

Теплоемкость фононов зависит от температуры как

$$c \sim \begin{cases} \text{const}, & (T \geq T_D) \\ T^3 & (T \leq T_D) \end{cases}$$

Таким образом, при высоких температурах теплопроводность

$$\kappa \sim \frac{1}{T}, \quad (T \geq T_D).$$

При низких температурах ($T \ll T_D$) теплопроводность экспоненциально велика. Эксперимент же при низких температурах приводит к зависимости T^3 . Для объяснения этого обстоятельства вспомним, что, наряду с рассеянием друг на друге, фононы могут рассеиваться на примесях и границах кристалла. Если считать эти процессы рассеяния независимыми, то полная вероятность рассеяния является суммой вероятностей каждого процесса, и, следовательно,

$$\frac{1}{\tau} = \left(\frac{1}{\tau}\right)_{\text{ангармонизм}} + \left(\frac{1}{\tau}\right)_{\text{границы}} + \left(\frac{1}{\tau}\right)_{\text{примеси}}.$$

Частоты релаксации, связанные со столкновениями с границами и примесями, от температуры не зависят. Поэтому при достаточно низких температурах, когда ролью ангармонизма можно пренебречь, время релаксации перестает зависеть от температуры, и зависимость теплопроводности от температуры сводится к температурной зависимости теплоемкости, что и объясняет наблюдаемое уменьшение теплопроводности при очень низких температурах:

$$\kappa = \frac{1}{3} \tau c^2 C \sim T^3.$$

Если кристалл достаточно чистый и рассеянием на примесях можно пренебречь, то низкотемпературное поведение

коэффициента теплопроводности будет целиком обусловлено столкновениями фононов со стенками. Если L - размер кристалла, то в этом случае

$$\tau \simeq \frac{L}{c} \text{ и } \kappa \sim L.$$

Теплопроводность зависит от размеров кристалла. Этот результат аналогичен случаю кнудсеновского газа.

Если в кристалле имеются примеси, то длинноволновые фононы испытывают на примесях так называемое Релеевское рассеяние, когда вероятность рассеяния в единицу времени

$$\tau^{-1} \sim \omega^4$$

(аналогичная зависимость имеет место при рассеянии света частицами, размеры которых много меньше длины волны света). При низких температурах основной вклад в теплопроводность вносят длинноволновые акустические фононы с частотой $\omega \sim T$, для которых $\tau^{-1} \sim T^4$. Поскольку для таких фононов теплоемкость $C \sim T^3$, то при низких температурах

$$\kappa \sim T^{-1}.$$

8.2.4 2.4. Transfer Phenomena in Metals. Electrical Conductivity

Рассмотрим кинетику электронов проводимости в металлах.

Электроны проводимости в хороших металлах можно рассматривать в приличном приближении как свободный идеальный газ, обладающий следующими особенностями:

1. Электроны подчиняются статистике Ферми и при всех температурах, при которых металл находится в твердом состоянии (т.е. ниже температуры плавления), элек-

троны образуют почти вырожденный ферми-газ, в равновесии описывающийся распределением Ферми:

$$f_0 = \left\{ e^{\frac{\varepsilon - \varepsilon_F}{T}} + 1 \right\}^{-1}.$$

2. Роль импульса играет квазиимпульс, который так же, как и импульс фононов, определен неоднозначно: квазиимпульс p и квазиимпульс $p + \hbar B$ отвечают одному и тому же состоянию (B - любой вектор обратной решетки).
3. Энергетический спектр электронов состоит из зон. Энергия электрона, принадлежащего одной из зон, является периодической функцией квазиимпульса:

$$\varepsilon(\mathbf{p}) = \varepsilon(\mathbf{p} + \hbar \mathbf{B}).$$

Поскольку состояния, имеющие энергию меньше энергии ε_F , полностью заняты, а состояния, лежащие выше, - совершенно пусты, то основную роль в явлениях переноса играют электроны, энергия которых близка к ε_F . Уравнение

$$\varepsilon(\mathbf{p}) = \varepsilon_F$$

в пространстве квазиимпульсов образует поверхность, называемую ферми-поверхностью. Движение электронов, приводящее к переносу заряда (электрический ток) и переносу энергии (поток тепла), в пространстве импульсов определяется перераспределением электронов вблизи поверхности Ферми. Обычно поверхность Ферми почти целиком лежит внутри одной зоны.

Поэтому в дальнейшем мы будем учитывать только одну зону и для простоты будем полагать, что спектр внутри этой зоны имеет вид спектра свободных электронов:

$$\varepsilon(\mathbf{p}) = \frac{p^2}{2m}.$$

Так же, как и в случае кинетики фононов, кинетическое уравнение для электронов будем записывать в τ -приближении:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \nabla(\mathbf{v}f) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}}(\dot{\mathbf{p}}f) = -\frac{1}{\tau}(f - f_0). \quad (2.22)$$

Левая часть этого уравнения, как всегда, есть уравнение непрерывности в фазовом пространстве $(\mathbf{r}, \mathbf{p})$. Здесь

$$v_\alpha = \frac{\partial \varepsilon}{\partial p_\alpha}, \quad \dot{p}_\alpha = eE_\alpha + \frac{e}{c}[\mathbf{v} \times \mathbf{B}]_\alpha$$

Так же, как и в случае газа и газа фононов, интеграл столкновений обращается в нуль, когда распределение электронов f есть распределение Ферми f_0 . Коэффициент τ имеет смысл среднего времени свободного пробега электрона и одновременно - времени релаксации электронного газа. Действительно, если функция распределения однородна ($\frac{\partial f}{\partial r_\alpha} = 0$), но имеет неравновесную зависимость от импульса, то в отсутствие внешнего поля ($\dot{p}_\alpha = 0$) эволюция распределения описывается простейшим уравнением релаксации

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{1}{\tau}(f - f_0). \quad (2.23)$$

Пусть в начальный момент времени $f = f_{in}(p)$. Тогда

$$(f(t, p) - f_0(p)) = (f_{in}(p) - f_0(p)) e^{-t/\tau}$$

и распределение электронов за время порядка τ становится равновесным.

Рассмотрим в этом приближении задачу электропроводности. В постоянном однородном электрическом поле

функция распределения стационарна и не зависит от координат. В этом случае уравнение (2.22) принимает вид

$$eE_\alpha \frac{\partial f}{\partial p_\alpha} = -\frac{1}{\tau}(f - f_0). \quad (2.24)$$

В металлах электрическое поле не может быть большим. В противном случае поле сильно разгоняет электроны, создается большой электрический ток, выделяется много

омического тепла, и металл плавится. Решение уравнения (2.24) в слабом электрическом поле мало отличается от равновесного, и его можно искать в форме разложения по слабому отклонению от равновесного распределения

$$f = f_0 + f_1.$$

Поэтому в левой части уравнения (2.24) можно заменить f на f_0 :

$$eE_\alpha \frac{\partial f_0}{\partial p_\alpha} = -\frac{1}{\tau} (f - f_0) \quad (2.25)$$

Отсюда имеем

$$f = f_0 - \tau e E_\alpha \frac{\partial f_0}{\partial p_\alpha} \quad (2.26)$$

Это решение можно рассматривать как два первых члена разложения по степеням $\tau e E_\alpha$ сдвинутой функции Ферми:

$$f = f_0 (p_\alpha - \tau e E_\alpha). \quad (2.27)$$

Это выражение имеет наглядный физический смысл. В электрическом поле импульс электрона линейно растет и за время свободного пробега изменяется на величину $\tau e E_\alpha$, а затем электрон отдает это приращение примеси. Чтобы найти создаваемую электрическим полем плотность тока, необходимо вычислить интеграл

$$j_\alpha = \sum_p e v_\alpha f(p) \quad (2.28)$$

Подставим сюда решение (2.26) и воспользуемся тем, что в равновесии электрический ток обращается в нуль:

$$j_\alpha = - \sum_p e v_\alpha \tau e E_\beta \frac{\partial f_0}{\partial p_\beta} \quad (2.29)$$

Интегрируя по частям, находим

$$j_\alpha = \tau e^2 E_\beta \sum_p \frac{\partial v_\alpha}{\partial p_\beta} f_0 \quad (2.30)$$

Так как $\frac{\partial v_\alpha}{\partial p_\beta} = (1/m) \delta_{\alpha\beta}$, то интеграл с точностью до множителя равен плотности электронов n , и мы получаем

$$j_\alpha = \frac{\tau e^2 n}{m} E_\alpha$$

Коэффициент пропорциональности между плотностью тока и напряженностью электрического поля есть коэффициент электропроводности

$$\sigma = \frac{n e^2}{m} \tau \quad (2.31)$$

Это - формула Друде.

Если электрическое поле меняется с частотой ω , то с такой же частотой совершает колебания функция распределения. Поэтому первый член в (2.22) отличен от нуля, и в левой части уравнения (2.25) добавляется еще один член:

$$-i\omega f_1 + eE_\alpha e^{-i\omega t} \frac{\partial f_0}{\partial p_\alpha} = -\frac{1}{\tau} f_1 \quad (2.32)$$

Если переписать это уравнение в форме

$$eE_\alpha e^{-i\omega t} \frac{\partial f_0}{\partial p_\alpha} = -\left(\frac{1}{\tau} - i\omega\right) f_1 \quad (2.33)$$

то становится очевидным, что величину (2.31) следует заменить τ на $\frac{\tau}{1-i\omega\tau}$:

$$\sigma = \frac{ne^2}{m\left(\frac{1}{\tau} - i\omega\right)} = \left(\frac{ne^2}{m}\tau\right) \frac{1}{1-i\omega\tau} \quad (2.34)$$

Таким образом, частотная дисперсия электропроводности характеризуется безразмерным параметром $\omega\tau$.

С увеличением частоты поля проводимость падает и появляется сдвиг фаз между полем и током.

Пусть теперь к металлу приложено постоянное электрическое поле и перпендикулярное к нему постоянное магнитное поле. В этом случае на электроны действует сила Лоренца ($\dot{p}_\alpha = eE_\alpha + \frac{e}{c}[\mathbf{v}, \mathbf{B}]_\alpha$), и уравнение (2.22) принимает вид

$$\frac{\partial}{\partial p_\alpha} \left(eE_\alpha + \frac{e}{c}[\mathbf{v}, \mathbf{B}]_\alpha \right) f = -\frac{1}{\tau} (f - f_0). \quad (2.35)$$

Умножим обе части этого уравнения на ev_β и просуммируем по импульсу:

$$\sum_p ev_\beta \frac{\partial}{\partial p_\alpha} \left(eE_\alpha + \frac{e}{c}[\mathbf{v}, \mathbf{B}]_\alpha \right) f = -\frac{1}{\tau} j_\beta$$

(равновесное распределение вклада в правую часть этого уравнения не дает). Слева снова интегрируем по частям:

$$-\sum_p \frac{e}{m} \left(eE_\beta + \frac{e}{c}[\mathbf{v}, \mathbf{B}]_\beta \right) f = -\frac{1}{\tau} j_\beta$$

Суммирование по импульсу первого члена образует плотность электронов, а второго - плотность электрического тока:

$$-\frac{e}{m} \left(eE_\beta n + \frac{1}{c}[\mathbf{j}, \mathbf{B}]_\beta \right) = -\frac{1}{\tau} j_\beta$$

Это уравнение удобно переписать в форме

$$E_\beta = \frac{1}{\sigma} j_\beta + R[\mathbf{B}, \mathbf{j}]_\beta. \quad (2.36)$$

Коэффициент

$$R = \frac{1}{nec} \quad (2.3)$$

называется константой Холла. Пусть электрический ток в вытянутом вдоль оси x металлическом параллелепипеде течет вдоль этого направления, а магнитное поле направлено по оси z . Тогда три компоненты векторного уравнения (2.36) имеют вид

$$E_x = \frac{1}{\sigma} j, \quad (2.38)$$

$$E_y = RBj, \quad (2.39)$$

$$E_z = 0. \quad (2.40)$$

Поперечное холловское поле E_y возникает из-за закручивания электронных траекторий в направлении, перпендикулярном магнитному полю и току.

Теперь вычислим в тау-приближении теплопроводность металла. Для решения этой задачи рассмотрим стационарное кинетическое уравнение Больцмана с учетом слабой неоднородности, обусловленной неоднородностью температуры $T(\mathbf{r})$:

$$\frac{\partial}{\partial r_\alpha} (\dot{r}_\alpha f_0) + eE_\alpha \frac{\partial f_0}{\partial p_\alpha} = -\frac{1}{\tau} (f - f_0). \quad (2.41)$$

В левой части уравнения функция распределения заменена на локально-равновесное распределение Ферми:

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

в котором температура и химический потенциал являются функциями температуры. Пробразуем первый член:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial r_\alpha} (\dot{r}_\alpha f_0) &= (\mathbf{v} \nabla) f_0 = \frac{\partial f_0}{\partial(\varepsilon/T)} (\mathbf{v} \nabla) \frac{\varepsilon - \mu}{T} = \\ &= -\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} (\mathbf{v} \nabla \mu) - \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \frac{\varepsilon - \mu}{T} (\mathbf{v} \nabla T). \end{aligned}$$

Уравнение (2.41) принимает вид

$$\left(-\frac{\varepsilon - \mu}{T} (\mathbf{v} \nabla T) + e\mathbf{E}' \mathbf{v} \right) \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} = -\frac{1}{\tau} (f - f_0) \quad (2.42)$$

где $e\mathbf{E}' = e\mathbf{E} - \nabla \mu$ — эффективная электрическая сила.

Для краткости введем обозначения для локального электрического тока и локального потока энергии:

$$\mathbf{J} = e\mathbf{v}, \quad \mathbf{Q} = (\varepsilon - \mu)\mathbf{v}$$

и получим рабочую форму кинетического уравнения:

$$(-(\mathbf{Q} \nabla \ln T) + \mathbf{j} \mathbf{E}') \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} = -\frac{1}{\tau} f_1 \quad (2.43)$$

Отсюда сразу находим решение

$$f_1 = \tau ((\mathbf{Q} \nabla \ln T) - \mathbf{j} \mathbf{E}') \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}$$

которое используем для расчета плотности потока энергии и плотности электрического тока:

$$\mathbf{q} = \sum_p \mathbf{Q} f_1 = \tau \sum_p \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \mathbf{Q} (\mathbf{Q} \nabla \ln T) - \tau \sum_p \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \mathbf{Q} (\mathbf{j} \mathbf{E}') \quad (2.44)$$

$$\mathbf{j} = \sum_p \mathbf{J} f_1 = \tau \sum_p \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \mathbf{J} (\mathbf{Q} \nabla \ln T) - \tau \sum_p \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \mathbf{J} (\mathbf{j} \mathbf{E}') \quad (2.45)$$

Последний интеграл дает вычисленный выше коэффициент электропроводности:

$$\begin{aligned}\sigma_{\alpha\beta} &= -\tau \sum_p \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} J_\alpha J_\beta = \delta_{\alpha\beta} \sigma \\ \sigma &= -\frac{1}{3} e^2 \tau \sum_p \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} v^2 = \frac{n e^2 \tau}{m}\end{aligned}\quad (2.46)$$

Напомним, что усреднение тензора по углам эквивалентно замене

$$J_\alpha J_\beta \rightarrow \delta_{\alpha\beta} \frac{1}{3} J^2$$

Первый интеграл в (2.44) определяет коэффициент теплопроводности:

$$\begin{aligned}q_\alpha &= -\kappa_{\alpha\beta} (\nabla T)_\beta \\ \kappa_{\alpha\beta} &= -\frac{1}{T} \tau \sum_p \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} Q_\alpha Q_\beta = \\ &= -\frac{1}{T} \tau \sum_p \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} v_\alpha v_\beta (\varepsilon - \mu)^2 = \delta_{\alpha\beta} \kappa \\ \kappa &= -\frac{1}{3T} \tau \sum_p \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} v^2 (\varepsilon - \mu)^2 = -\frac{2}{3Tm} \tau \sum_p \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \varepsilon (\varepsilon - \mu)^2\end{aligned}\quad (2.47)$$

Интегралы этого вида вычисляются с помощью разложения в ряд, известного из курса статистической физики:

$$\begin{aligned}-\sum_p \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} F(\varepsilon) &\simeq -\sum_p \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \left(F(\mu) + \frac{1}{2} (\varepsilon - \mu)^2 F''(\mu) \right) = \\ &= g(\mu) \left[F(\mu) + \frac{\pi^2 T^2}{6} F''(\mu) \right], \quad g(\mu) = \frac{3n}{2\mu}\end{aligned}\quad (2.48)$$

Отсюда получаем коэффициент теплопроводности

$$\kappa = \frac{2}{3Tm} \tau g(\mu) \frac{\pi^2 T^2}{6} 2\mu = \frac{1}{3} \pi^2 \frac{\tau n T}{m}\quad (2.49)$$

В τ -приближении отношение этого коэффициента к коэффициенту электропроводности не зависит от сорта металла и линейно растет с температурой:

$$\frac{\kappa}{\sigma} = \frac{\pi^2 T}{3e^2}$$

Это - закон Видемала-Франца. Несмотря на приближенный характер приведенного вывода этого закона, он хорошо выполняется в простых металлах. Степень выполнения этого закона характеризует степень применимости τ -приближения.

Соотношения (2.44), (2.45) содержат перекрестные члены, определяемые интегралом:

$$\begin{aligned}\gamma_{\alpha\beta} &= -\tau \sum_p \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} Q_\alpha J_\beta = \gamma \delta_{\alpha\beta}, \\ \gamma &= -\frac{1}{3} \tau e \sum_p \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} (\varepsilon - \mu) v^2 = \frac{1}{3} \tau e g(\mu) \frac{\pi^2 T^2}{3m} = \frac{\pi^2 T^2 n \tau e}{6m\mu}.\end{aligned}$$

Таким образом, термодинамика необратимых процессов в металле описывается системой уравнений

$$\mathbf{q} = -\kappa \nabla T + \gamma \mathbf{E}', \quad (2.50)$$

$$\mathbf{j} = -\frac{\gamma}{T} \nabla T + \sigma \mathbf{E}'. \quad (2.51)$$

Тот факт, что перекрестные процессы определяются одним коэффициентом, является отражением общего закона термодинамики необратимых процессов - принципа симметрии Онсагера.

В изолированном металле тока нет. Возникает компенсирующее электрическое поле. Из (2.51) находим

$$\mathbf{E}' = \frac{\gamma}{T\sigma} \nabla T.$$

Это поле называется термоэлектрической силой, или термоЭДС. Подставляя это поле в (2.50), находим поток тепла в изолированном теле:

$$\mathbf{q} = -\left(\kappa - \frac{\gamma^2}{T\sigma}\right) \nabla T.$$

Отношение второго коэффициента к первому мало:

$$\frac{\gamma^2}{T\sigma\kappa} = \frac{\pi^2 T^2}{12\mu^2} \ll 1,$$

и его можно не учитывать.

В присутствии внешнего магнитного поля имеется поток тепла в направлении, перпендикулярном градиенту температур. Это явление называется эффектом Ледюка-Реге и аналогично эффекту Холла.

8.2.5 2.5. Dependence of the Transfer Coefficients in Metals on Temperature

Для полного определения кинетических коэффициентов нам осталось выяснить зависимость времени релаксации от температуры.

Электроны в металле могут сталкиваться друг с другом, с примесями, с фононами. Эти процессы можно считать независимыми и определять полную вероятность рассеяния электрона как сумму вероятностей рассеяния на остальных электронах W_{e-e} , рассеяния на примесях и других статических неоднородностях решетки W_{e-i} и рассеяния на колеблющихся ионах, образующих кристаллическую решетку, W_{e-ph} :

$$W = W_{e-e} + W_{e-i} + W_{e-ph}$$

Следовательно, полная частота столкновений есть сумма частот столкновений:

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_{e-e}} + \frac{1}{\tau_{e-i}} + \frac{1}{\tau_{e-ph}}$$

Обычно рассеянием электронов на электронах можно пренебречь по сравнению с рассеянием на примесях и фононах. Поэтому

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_{e-ph}} + \frac{1}{\tau_{e-ph}} \quad (2.52)$$

Подставляя (2.52) в выражения для проводимости (2.31), паходим

$$\rho = \frac{1}{\sigma} = \frac{m}{Ne^2} \left(\frac{1}{\tau_{e-imp}} + \frac{1}{\tau_{e-ph}} \right) = \rho_i + \rho_{ph}. \quad (2.53)$$

Мы видим, что полное сопротивление складывается по правилу сложения последовательных сопротивлений из сопротивления на примесях, пропорционального числу примесей и не зависящего от температуры:

$$\rho_{imp} = c \cdot \text{const.}$$

(c - концентрация примесей), и из сопротивления на фононах, которое пропорционально числу фононов N_{ph} , и, следовательно,

$$\rho_{ph} \sim N_{ph} \sim \begin{cases} T, & T \geq T_D \\ T^3, & T \ll T_D \end{cases} \quad (2.54)$$

Когда примесей нет (идеальный кристалл), то сопротивление целиком определяется рассеянием на фононах:

$$\rho_{id} = \rho_{ph}$$

а для реального металла с примесями можно написать

$$\rho_{real} = \rho_{id} + \rho_{imp}$$

Это равенство, согласно которому сопротивление реального металла равно сопротивлению идеального металла,

обращающемуся в нуль при нуле температур, плюс независящес от температуры сопротивление на примесях, называется правилом Маттисена.

Рассмотрим сопротивление идеального металла подробнее. На екперименте при высоких тсмпературах сопротивление металла пропорционально температуре в полном соответствии с (2.54). Но при низких температурах вместо ожидаемого закона T^3 на эксперименте наблюдается зависимость

$$\rho_{id} \sim T^5. \quad (2.55)$$

Анализ этого противоречия приводит к тому, что при рассеянии важен не только сам факт рассеяния (характеристикой этого факта является время между "соударениями" электрона с фононами τ), но и то, на какой угол при этом рассеивается электрон. Действительно, интересующая нас величина - время релаксации - опрсделяется тем временем, за которое электрон эффективно затормозится, то есть потеряет компоненту импульса, направленную по полю.

Напомним, что даже при очень низких температурах T электронный газ сильно "разогрет" в том смысле, что большая часть электонов имеет энергию порядка $\varepsilon_F \approx 1\text{eV} \approx 10^4\text{ K}$. Возбуждение вырожденного при низких температурах электронного газа представляет собой перенос электрона с заполненного состояние на вакантное. При этом перенос имеет место только между состояниями с импульсами вблизи поверхности Ферми, $p_F = \sqrt{2m\varepsilon_F}$ - импульс Ферми. Поэтому изменение состояния представляет собой поворот импульса с величиной p_F на некоторый угол. Разница между энергиями начального и конечного состояний и есть энергия возбуждения, равная по порядку величины температуре $T \ll \varepsilon_F$. Изменение состояния электрона, то есть изменение импульса, связано с погло-

щением или испусканием одного фонона с энергией порядка температуры (при температурах $T \leq T_D$). Изменение импульса электрона за одно столкновение по порядку величины равно $T/c \ll p_F$, где c - скорость звука. Итак, за одно столкновение импульс электрона поворачивается случайным образом на угол T/ε_F . Этот поворот происходит за одно столкновение, то есть за время τ . Случайный знак угла поворота позволяет считать, что угол поворота меняется диффузионным образом и зависит от времени как $t^{1/2}$. Поворот на угол порядка единицы происходит за время

$$\tau_{eff} \sim \left(\frac{cp_F}{T}\right)^2 \tau_{ph} \simeq \tau_{ph} \left(\frac{T_D}{T}\right) \quad (2.56)$$

Здесь мы воспользовались тем, что число электронов в единице объема есть

$$N \simeq p_F^3 = a^{-3}$$

где a - объем элементарной ячейки, а дебаевская температура $T_D = \hbar\omega_{\max} \simeq \hbar cp_{\max} \simeq \frac{\hbar c}{a}$. Поэтому $cp_F \simeq T_D$.

Итак, при низких температурах

$$\rho = \frac{m}{Ne^2\tau} \sim N_{ph} \cdot T^2 \sim T^5$$

При высоких температурах "эффект поворота" также имеет место. Однако за одно столкновение угол поворота равен ω_D/ck_F и не зависит от температуры.

И наконец, обратимся к явлению теплопроводности. Прежде всего заметим, что в металлах тепло переносится по двум каналам - электронами проводимости и, как в диэлектриках, фононами. Поэтому имеет место сложение проводимостей. Электроны распространяются со скоростью

v_F , а фононы - со скоростью звука c . Поскольку

$$\frac{v_F}{c} \simeq \frac{p_F^2}{m} \frac{1}{p_F c} \simeq \frac{\varepsilon_F}{T_D} \gg 1,$$

то электроны распространяются значительно быстрее и решеточной теплопроводностью можно пренебречь. Итак, можно считать, что (см. (2.49))

$$\kappa^{-1} = \frac{3}{\pi^2} \frac{m}{NT\tau}$$

Ограничимся рассмотрением теплопроводности идеальных кристаллов. При высоких температурах, очевидно,

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_{ph}} \sim T$$

и, следовательно, теплосоппротивление не зависит от температуры.

Чему же равно время релаксации потока тепла при низких температурах $T \ll T_D$? Напомним, что поток тепла определяется формулой

$$\mathbf{q} = \sum \mathbf{v}(\varepsilon - \mu)f, \mu = \varepsilon_F \quad (2.57)$$

Значит, с каждым электроном связан элементарный поток тепла $\mathbf{v}(\varepsilon - \mu)$. Характерное значение величины $(\varepsilon - \mu) \sim T$. И за одно столкновение с фононом эта величина изменяется на величину порядка энергии одного теплового фонона, то есть T . Мы видим, что торможение элементарного потока происходит за одно столкновение и описанный выше диффузионный процесс релаксации не имеет места и следует положить $\tau = \tau_{ph}$.

Таким образом, имеем

$$\frac{1}{\kappa} \sim \frac{1}{T\tau} \sim \begin{cases} \text{const}, & T \geq T_D \\ T^2, & T \ll T_D \end{cases}$$

Такое поведение теплосоппротивления находит свое подтверждение на опыте.

8.2.6 2.6. Residual Resistance

Покажем, что задача вычисления коэффициента электропроводности в рамках кинетического уравнения Больцмана в случае рассеяния электронов на примесях имеет точное решение.

С учетом анализа задачи в τ -приближении запишем кинетическое уравнение с реальным интегралом столкновений в форме

$$eE_\alpha \frac{\partial f_0}{\partial p_\alpha} = - \sum_{p'} W_{p'p} [f(1-f') - f'(1-f)] \quad (2.58)$$

Нелинейные слагаемые подынтегрального выражения сокращаются, и интеграл столкновений упрощается:

$$eE_\alpha \frac{\partial f_0}{\partial p_\alpha} = - \sum_{p'} W_{p'p} (f_1 - f'_1) \quad (2.59)$$

Будем искать решение этого уравнения в том виде, который оно имело бы в τ -приближении (2.26):

$$f_1 = -\tau e E_\alpha v_\alpha \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \quad (2.60)$$

где $v_\alpha = \frac{\partial \varepsilon}{\partial p_\alpha}$. Но теперь τ - искомый параметр. Подстановка последнего выражения в (2.59) дает

$$eE_\alpha v_\alpha \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} = \tau e E_\alpha \sum_{p'} W_{p'p} \left(v_\alpha \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} - v'_\alpha \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon'} \right) \quad (2.61)$$

Существенно, что рассеяние электронов на примесях является упругим процессом. Это позволяет производную по

энергии вынести из-под знака интеграла по p' :

$$eE_\alpha v_\alpha \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} = \tau e E_\alpha \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \int g(\varepsilon') d\varepsilon' \int \frac{d\Omega}{4\pi} W_{p'p} (v_\alpha - v'_\alpha) \quad (2.62)$$

Здесь $g(\varepsilon) = \frac{2^{1/2} m^{3/2} \varepsilon^{1/2}}{\pi^2 \hbar^3}$ - плотность состояний.

Напомним, что при низких температурах

$$\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} = -\delta(\varepsilon - \varepsilon_F)$$

Поэтому все импульсы в уравнении (2.62) принадлежат поверхности Ферми, и интеграл в (2.62) сводится к интегралу по углу рассеяния θ ($\mathbf{p}\mathbf{p}' = p^2 \cos \theta$). Выделим из вероятности столкновений закон сохранения:

$$W_{p'p} = w(\theta) \delta(\varepsilon - \varepsilon')$$

Получаем

$$\begin{aligned}
& eE_\alpha v_\alpha \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} = \\
& = \tau eE_\alpha \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} g(\varepsilon_F) \int d\varepsilon' \int \frac{d\Omega}{4\pi} w(\theta) \delta(\varepsilon - \varepsilon') (v_\alpha - v'_\alpha)
\end{aligned} \tag{2.63}$$

Интегрируя по ε' и опуская $eE_\alpha \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}$, приходим к простому уравнению

$$v_\alpha = \tau g(\varepsilon_F) \int \frac{d\Omega}{4\pi} w(\theta) (v_\alpha - v'_\alpha) \tag{2.64}$$

Из соображений симметрии следует, что интеграл справа направлен по v_α и фактически это - скалярное уравнение. Стандартным приемом решения такого уравнения является умножение этого уравнения на v_α и сокращение на $v_\alpha^2 = v_F^2$:

$$1 = \tau g(\varepsilon_F) \int \frac{d\Omega}{4\pi} w(\theta) (1 - \cos \theta). \tag{2.65}$$

Таким образом, точное решение уравнения Больцмана показывает, что величина $1/\tau$, введенная в рамках τ -приближения как феноменологический параметр, связана с вероятностью столкновений соотношением

$$\frac{1}{\tau} = g(\varepsilon_F) \int \frac{d\Omega}{4\pi} w(\theta) (1 - \cos \theta). \tag{2.66}$$

Эта величина отличается от суммарной вероятности столкновений электрона с примесями $\sum_{p'} W_{p'p}$ множителем $(1 - \cos \theta)$, который отражает влияние обратных столкновений (приход).

8.3 Kinetics of Amorphous Systems by Maksimov

Термодинамика и кинетика кристаллических диэлектриков связана с элементарными возбуждениями, называемыми фононами. При низких температурах основную роль играют акустические фононы, для которых частота ω и волновой вектор q связаны соотношением

$$\omega = v_s q, \tag{3.1}$$

где v_s - скорость звука, одинаковая для всех акустических фононов. При температурах $T < T_D$ ($T_D = \hbar \omega_D$ - температура Дебая, определяемая максимальной частотой ω_D акустических фононов) звуковой спектр элементарных возбуждений (3.1) приводит к кубической температурной зависимости теплоемкости системы:

$$C \sim T^3. \tag{3.2}$$

Такая температурная зависимость теплоемкости позволяет объяснить кубическую температурную зависимость теплопроводности диэлектриков при низких температурах. Это легко понять, используя качественную газокинетическую оценку для теплопроводности:

$$\kappa = \frac{1}{3} C v_s \ell, \tag{3.3}$$

где ℓ - длина свободного пробега фононов, которые переносят энергию (тепло). При низких температурах число фононов мало и столкновениями между ними можно

пренебречь. Поэтому длина свободного пробега ℓ связана лишь с рассеянием фононов на примесях или на границах образца и, таким образом, не зависит от температуры. Это обстоятельство и объясняет закон $\kappa \sim T^3$ для теплопроводности кристалла. Кубические зависимости для теплоемкости и теплопроводности были экспериментально подтверждены.

Следует отметить, что в области низких температур, когда свойства конденсированных систем определяются длинноволновыми фононами, кристаллическая структура (дальний порядок) является несущественным обстоятельством для описания элементарных возбуждений с помощью фононов. Поэтому подобные температурные зависимости следует ожидать и для аморфных диэлектриков (отсутствует дальний порядок). Однако экспериментально было обнаружено, что при низких температурах $T < 1$ К теплоемкость и теплопроводность в таких системах ведут себя совершенно другим образом. Теплоемкость ведет себя линейно с температурой, а теплопроводность квадратично:

$$C \sim T, \quad \kappa \sim T^2. \quad (3.4)$$

Линейная температурная зависимость теплоемкости характерна для вырожденного ферми-газа. Однако в диэлектриках свободных электронов нет.

Среди множества моделей, предложенных для объяснения этих аномалий, наиболее плодотворной оказалась модель двухуровневых систем. В этой модели предполагается, что атом или группа атомов совершают квантовомеханическое туннелирование между двумя энергетически близкими положениями равновесия. Пусть разность энер-

гий между этими положениями равновесия есть E . Предполагается, что в аморфных диэлектриках этот параметр равномерно распределен в некоторой широкой области энергий порядка 1 К.

Из курса статистической физики известно, что с двухуровневыми системами (ДУС), имеющими энсргию возбуждения E , связана теплоемкость Шоттки, которая в расчете на один ДУС имеет вид

$$c(E) = \frac{E^2}{4T^2} \operatorname{sech}^2 \left(\frac{E}{2T} \right) \quad (3.5)$$

Если считать, что P характеризует равномерную функцию распределения ДУС по энергиям, то число ДУС в интервале энергий dE равно

$$dP(E) = P dE \quad (3.6)$$

Тогда теплоемкость ансамбля двухуровневых систем дается выражением

$$C(T) = \int_0^\infty P \frac{E^2}{4T^2} \operatorname{sech}^2 \left(\frac{E}{2T} \right) dE \quad (3.7)$$

Ввиду быстрой сходимости интеграла верхний предел заменен на бесконечность. Оценивая этот интеграл, получим

$$C(T) = \left(\frac{\pi^2}{6} \right) PT \quad (3.8)$$

Таким образом, линейная температурная зависимость теплоемкости может быть объяснена в рамках модели ДУС с распределением (3.6).

8.3.1 3.1. Tunnel Model

Для описания теплопроводности нам потребуется более детальное описание туннельного движения. Предположим, что туннелирующая частица движется в двухъямном потенциале. Пусть гамильтониан частицы массы m , описывающий движение в одной изолированной яме, есть

$$H_1 = \hat{p}^2/2m + V_1, \quad (3.9)$$

где $\hat{p}$ - оператор импульса частицы, движущейся в гармоническом потенциале V_1 . Аналогичное выражение можно записать для той же частицы в другой яме:

$$H_2 = \hat{p}^2/2m + V_2. \quad (3.10)$$

Пусть E_1 и E_2 и ϕ_1 и ϕ_2 - соответственно собственные значения и собственные функции, отвечающие основному состоянию частицы в каждой из ям, рассматриваемых как изолированные. При достаточно низких температурах можно ограничиться рассмотрением лишь основных состояний в обеих ямах. Поэтому движение частицы может быть описано в рамках модели двухуровневых систем (ДУС). Если две ямы расположены достаточно близко, то ямы не могут считаться изолированными, движение происходит в суммарном потенциале $V = V_1 + V_2$ и описывается полным гамильтонианом:

$$H_0 = H_1 + (V - V_1) = H_2 + (V - V_2) \quad (3.11)$$

В базисе ϕ_1 и ϕ_2 гамильтониан частицы, движущейся в двухъямном потенциале V , есть

$$H_0 = \begin{vmatrix} E_1 + \langle \phi_1 | (V - V_1) | \phi_1 \rangle & \langle \phi_2 | H | \phi_1 \rangle \\ \langle \phi_1 | H | \phi_2 \rangle & E_2 + \langle \phi_2 | (V - V_2) | \phi_2 \rangle \end{vmatrix}. \quad (3.12)$$

В области, где ϕ_1 не мало, малым оказывается выражение $(V - V_1)$. Поэтому можно пренебречь матричным элементом $\langle \phi_1 | (V - V_1) | \phi_1 \rangle$ по сравнению с E_1 . По этой же причине в (3.12) можно выбросить матричный элемент $\langle \phi_2 | (V - V_2) | \phi_2 \rangle$. Тогда, если за нуль энергии принять значение $(E_1 + E_2)/2$, гамильтониан системы принимает вид

$$H_0 = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} -\Delta & \Delta_0 \\ \Delta_0 & +\Delta \end{vmatrix}. \quad (3.13)$$

Параметр

$$\Delta_0 = 2 \langle \phi_2 | H_0 | \phi_1 \rangle = 2 \langle \phi_1 | H_0 | \phi_2 \rangle \quad (3.14)$$

характеризует расщепление уровней, обусловленное возможностью туннелирования. Мы полагаем ямы одинаковыми, но положение дна этих ям отличается на величину $\Delta = (E_1 - E_2)$. В курсе квантовой механики доказывается, что если две ямы разделены потенциальным барьером высотой V_0 и шириной d , то

$$\Delta_0 = \hbar \Omega e^{-\lambda} \quad (3.15)$$

где туннельный параметр

$$\lambda = d \left(\frac{2mV_0}{\hbar^2} \right)^{1/2} \quad (3.16)$$

а Ω - частота колебаний частицы в яме. Итак, каждый ДУС характеризуется двумя параметрами Δ и λ . Эти параметры в неупорядоченной системе флуктуируют.

Сделаем дополнительное предположение относительно распределения туннельных параметров $P(\Delta, \lambda)$. Будем считать, что параметры Δ и λ равномерно распределены. Тогда выражение

$$dP(\Delta, \lambda) = Pd\Delta d\lambda \quad (3.17)$$

определяет число ДУС в интервале параметров $d\Delta d\lambda$. Равномерное распределение Δ в неупорядоченной системе кажется естественным предположением, а равномерное распределение туннельного параметра λ можно обосновать, предположив, что высота туннельного барьера одинакова для всех ДУС, в то время, как расстояние d между ямами двухъямного потенциала распределено равномерно в некотором интервале. Из (3.15) и (3.17) следует, что распределение для параметров Δ, Δ_0 может быть записано в виде

$$dP(\Delta, \Delta_0) = \frac{P}{\Delta_0} d\Delta d\Delta_0. \quad (3.18)$$

8.3.2 3.2. The Interaction of Two Level System with Phonons

Пусть $\hat{u}$ - оператор смещения узлов кристаллической решетки. Энергия двухуровневой системы $\Delta(u)$ зависит от смещений окружающих атомов. Пусть введенный выше параметр Δ соответствует значению u , отвечающему положению равновесия колеблющихся атомов. Понятно, что энергия ДУС может зависеть только от относительного смещения узлов решетки друг от друга (должна меняться плотность кристалла вблизи ДУС). В длинноволновом приближении можно ввести поле смещений $u(r)$ для узлов с координатой r . Поэтому энергия взаимодействия ДУС с колебаниями зависит лишь от производных величины $u(r)$. Поскольку гамильтониан взаимодействия есть скаляр, то интересующая нас скалярная величина, характеризующая зависимость энергии ДУС от производных оператора смещения, имеет вид

$$H_{\text{int}} = \gamma \text{div } \hat{u} \quad (3.19)$$

где γ - константа взаимодействия.

Из курса статистической физики известно, что оператор смещения в узле x , выраженный через операторы рождения и уничтожения фононов, имеет вид

$$\hat{u} = \sum_k \vec{e}_k \left(\frac{\hbar}{2\rho\omega_k} \right)^{1/2} (\hat{a}_k e^{ikx} + \hat{a}_k^+ e^{-ikx}). \quad (3.20)$$

Здесь $\vec{e}_k$ - единичный вектор в направлении поляризации фонона с волновым вектором k , ω_k - частота такого фонона, $\hat{a}_k$ и $\hat{a}_k^+$ - операторы рождения и уничтожения фонона, ρ - плотность вещества. Из последнего соотношения следует, что

$$\text{div } \hat{u} = i \sum_k k \left(\frac{\hbar}{2\rho\omega_k} \right)^{1/2} (\hat{a}_k e^{ikx} - \hat{a}_k^+ e^{-ikx}). \quad (3.21)$$

Двухуровневые системы, по существу, являются точечными дефектами. Поэтому если ДУС находится в начале координат, то в (3.21) можно положить $x = 0$. Для акустических фононов $\omega_k = v_s k$. Поэтому взаимодействие фонона с ДУС в базисе функций ϕ_1 и ϕ_2 может быть представлено в виде

$$V = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} -\delta & 0 \\ 0 & +\delta \end{vmatrix}. \quad (3.22)$$

Это выражение описывает изменение энергии ДУС Δ за счет поглощения и испускания фононов. Причем матричные элементы имеют операторную природу относительно операторов рождения и уничтожения фононов:

$$\delta = i\gamma \sum_k \left(\frac{\hbar\omega_k}{2\rho v_s^2} \right)^{1/2} (a_k - a_k^+). \quad (3.23)$$

Возможной зависимостью недиагональных матричных элементов Δ_0 от длинноволновых акустических колебаний мы пренебрегаем.

Функции ϕ_1 и ϕ_2 не являются собственными для оператора (3.13). В то же время поглощение и испускание фонона происходит между собственными состояниями гамильтониана (3.13). Найдем эти собственные состояния. Пусть нормированная собственная функция основного состояния ДУС имеет вид

$$\psi_1 = \phi_1 \cos \theta + \phi_2 \sin \theta. \quad (3.24)$$

Тогда собственная функция возбужденного состояния ДУС ψ_2 , ортогональная ψ_1 (как собственная функция эрмитового оператора, соответствующего другому собственному значению), имеет вид

$$\psi_2 = \phi_1 \sin \theta - \phi_2 \cos \theta.$$

В отсутствие туннелирования ψ_1 и ψ_2 должны переходить в ϕ_1 и ϕ_2 . Поэтому потребуем, чтобы при $\Delta_0 \rightarrow 0$ ψ_1 переходило в ϕ_1 , а ψ_2 - в ϕ_2 . Иными словами, необходимо, чтобы при

$$\Delta_0 \rightarrow 0 \Rightarrow \theta \rightarrow 0. \quad (3.25)$$

В базисе ϕ_1 и ϕ_2 можно записать

$$\psi = \begin{pmatrix} \cos \theta \\ \sin \theta \end{pmatrix}. \quad (3.26)$$

Секулярное уравнение для изолированного ДУС имеет вид

$$\begin{vmatrix} \frac{1}{2} & -\Delta & \Delta_0 \\ \Delta_0 & +\Delta & \end{vmatrix} \begin{pmatrix} \cos \theta \\ \sin \theta \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \cos \theta \\ \sin \theta \end{pmatrix}. \quad (3.27)$$

Из (3.27) получаем уравнение на собственные значения E :

$$(-\Delta/2 - E)(-\Delta/2 - E) = \Delta_0^2/4. \quad (3.28)$$

Откуда следует, что

$$E_{1,2} = \pm \frac{E}{2}, E = \sqrt{\Delta^2 + \Delta_0^2}. \quad (3.29)$$

Из двух найденных решений нас интересует то, которое удовлетворяет условию (3.25). Значению $-E/2$ отвечает собственная функция, удовлетворяющая условию

$$-\Delta \cos \theta + \Delta_0 \sin \theta = -E \cos \theta. \quad (3.30)$$

Тогда получаем

$$\tan \theta = \frac{-E + \Delta}{\Delta_0}, \quad (3.31)$$

что удовлетворяет условию (3.25), так как при $\Delta_0 \rightarrow 0$

$$\tan \theta \sim \frac{\Delta_0}{\Delta} \rightarrow 0.$$

Найдем вид оператора взаимодействия в базисе собственных функций $\Psi_{1,2}$:

$$\begin{aligned} V_{11} = -V_{22} &= \langle \cos \theta \phi_1 + \sin \theta \phi_2 | V | \cos \theta \phi_1 + \sin \theta \phi_2 \rangle = \\ &= -\frac{\delta}{2} \cos^2 \theta + \frac{\delta}{2} \sin^2 \theta = -\frac{\delta}{2} \cos 2\theta, \end{aligned} \quad (3.32)$$

$$\begin{aligned} V_{12} = V_{21} &= \langle \cos \theta \phi_1 + \sin \theta \phi_2 | V | \sin \theta \phi_1 - \cos \theta \phi_2 \rangle = \\ &= -\frac{\delta}{2} \cos \theta \sin \theta - \frac{\delta}{2} \sin \theta \cos \theta = -\frac{\delta}{2} \sin 2\theta. \end{aligned} \quad (3.33)$$

Заметим, что

$$\begin{aligned} \sin 2\theta &= \frac{2 \tan \theta}{1 + \tan^2 \theta} = \frac{2 \frac{-E+\Delta}{\Delta_0}}{1 + \left(\frac{-E+\Delta}{\Delta_0} \right)^2} = -\frac{\Delta_0}{E}, \\ \cos 2\theta &= \frac{\Delta}{E}. \end{aligned}$$

Итак, в базисе собственных функций оператора (3.13) гамильтониан ДУС, взаимодействующей с фононами, имеет вид

$$H = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} -E & 0 \\ 0 & E \end{vmatrix} + \frac{\delta}{2} \begin{vmatrix} \frac{\Delta}{E_0} & \frac{\Delta_0}{E} \\ \frac{\Delta}{E} & \frac{\Delta_0}{E} \end{vmatrix}. \quad (3.34)$$

Напомним, что δ есть оператор, выраженный через фононные операторы a и a^+ . Отсюда следует, что матричный элемент перехода ДУС из возбужденного состояния 2 в основное состояние 1 с испусканием резонансного фонона, имеющего энергию E , при условии, что в начальном состоянии имеется n_k фононов, равен

$$\langle 1, n_k + 1 | H_{\text{int}} | 2, n_k \rangle = \gamma \frac{\Delta_0}{E} \left(\frac{\hbar k}{2\rho v_s} \right)^{1/2} \sqrt{n_k + 1}. \quad (3.3)$$

Здесь мы воспользовались тем, что в H_{int} входит оператор a_k^+ , имеющий ненулевой матричный элемент

$$\langle n_k + 1 | a_k^+ | n_k \rangle = \sqrt{n_k + 1}. \quad (3.36)$$

Аналогично для поглощения фонона имеем

$$\langle 2, n_k - 1 | H_{\text{int}} | 1, n_k \rangle = \gamma \frac{\Delta_0}{E} \left(\frac{\hbar k}{2\rho v_s} \right)^{1/2} \sqrt{n_k} \quad (3.37)$$

Фактически в системе имеются и другие фононы, число которых не изменяется при однофононном процессе, и поэтому отличен от нуля лишь диагональный матричный элемент, взятый по состояниям остальных фононов, который равен единице.

8.3.3 3.3. Single - Phonon Relaxation of Two Level System

Пусть p_1 и p_2 есть вероятность двухуровневой системе находиться в основном и возбужденном состоянии соответственно с энергиями $-E/2$ и $E/2$. При этом

$$p_1 + p_2 = 1. \quad (3.38)$$

Эволюция заселенностей может быть описана кинетическим уравнением

$$\dot{p}_1 = -\omega_{21}p_1 + \omega_{12}p_2. \quad (3.39)$$

Здесь ω_{21} - вероятность перехода из основного состояния 1 в возбужденное состояние 2, и ω_{12} - вероятность перехода из возбужденного состояния 2 в основное состояние 1.

Из золотого правила Ферми и (3.35), и (3.37) следует, что

$$\omega_{21} = \frac{2\pi}{\hbar} \gamma^2 \left(\frac{\Delta_0}{E} \right)^2 \left(\frac{\hbar k}{2\rho v_s} \right) n_k, \quad (3.40)$$

$$\omega_{12} = \frac{2\pi}{\hbar} \gamma^2 \left(\frac{\Delta_0}{E} \right)^2 \left(\frac{\hbar k}{2\rho v_s} \right) (n_k + 1). \quad (3.41)$$

Пусть фононная подсистема находится в равновесии, отвечающем температуре T , а подсистема ДУС выведена из равновесия. Поэтому в (3.40) и (3.41) число фононов n_k можно заменить их равновесным значением $\bar{n}_k$ при температуре T . Тогда

$$\dot{p}_1 = \tau_0^{-1} (-\bar{n}_k p_1 + (\bar{n}_k + 1) p_2) \quad (3.42)$$

где введено обозначение

$$\tau_0^{-1} = \frac{2\pi}{\hbar} \gamma^2 \left(\frac{\Delta_0}{E} \right)^2 \left(\frac{\hbar k}{2\rho v_s} \right). \quad (3.43)$$

В состоянии теплового равновесия при температуре T заселенности p_1 и p_2 не зависят от времени и совпадают со своими равновесными значениями p_1^0 и p_2^0 :

$$\frac{p_2^0}{p_1^0} = \frac{\bar{n}_k}{(\bar{n}_k + 1)} = \exp\left(-\frac{E}{T}\right) \quad (3.44)$$

Из этого соотношения и соотношения (3.42), как и ожидалось, следует, что в состоянии равновесия $\dot{p}_1 = 0$.

Из (3.38) и (3.39) получаем, что

$$\begin{aligned} \dot{p}_1 &= \tau_0^{-1} (-\bar{n}_k p_1 + (\bar{n}_k + 1) (1 - p_1)) = \\ &= -\tau_0^{-1} [(2\bar{n}_k + 1) p_1 - (\bar{n}_k + 1)]. \end{aligned} \quad (3.45)$$

Если $p_1 = p_1^0$, то правая часть (3.45) обращается в нуль. Поэтому

$$\dot{p}_1 = \frac{\partial (p_1 - p_1^0)}{\partial t} = -\tau_0^{-1} (2\bar{n}_k + 1) (p_1 - p_1^0). \quad (3.46)$$

Определим время релаксации как

$$\tau^{-1} = \tau_0^{-1} (2\bar{n}_k + 1). \quad (3.47)$$

Эта величина определяет скорость возбуждения (релаксации) ДУС при поглощении (испускании) одного фонона с заданным волновым вектором k . Полную скорость

релаксации получим, просуммировав (3.47) по всем волновым векторам, для которых фононы имеют резонансную энергию E , отвечающую энергии возбуждения ДУС.

Фононная плотность состояний в модели Дебая дается выражением

$$g(E) = \frac{E^2}{2\pi^2 \hbar^3 v_s^2}, \quad (3.48)$$

а бозе-фактор имеет вид

$$\bar{n}(E) = \frac{1}{e^{\frac{E}{T}} - 1}. \quad (3.49)$$

Таким образом, для скорости релаксации ДУС, учитывающей однофононные процессы, имеем

$$\begin{aligned} \tau^{-1}(E, \Delta_0) &= \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} \cdot \gamma^2 \frac{\Delta_0^2}{E^2} \left(\frac{\hbar \omega_k}{2\rho v_s^2} \right) \frac{E^2}{2\pi^2 \hbar^3 v_s^3} \left(\frac{2}{e^{\frac{E}{T}} - 1} + 1 \right) = \\ &= \frac{\gamma^2}{v_s^5} \frac{\Delta_0^2 E}{2\pi \rho \hbar^4} \coth \left(\frac{E}{2T} \right) \end{aligned} \quad (3.50)$$

При температуре T наибольшую концентрацию (наибольший фазовый объем) имеют так называемые тепловые ДУС, для которых

$$\Delta_0 \approx E \approx T \quad (3.51)$$

Отсюда следует, что для таких ДУС

$$\tau^{-1}(T) \sim T^3 \quad (3.52)$$

что наблюдается во многих релаксационных экспериментах.

8.3.4 3.4. Phonon Relaxation on Two Level System

Считаем, что система ДУС находится в равновесном состоянии, отвечающем температуре T , а фононная подсистема выведена из равновесия.

Запишем для фононов кинетическое уравнение, аналогичное (3.39):

$$\dot{n}_k = -\frac{2\pi}{\hbar} \gamma^2 \left(\frac{\Delta_0}{E} \right)^2 \left(\frac{\hbar k}{2\rho v_s} \right) [n_k p_1^0 - (n_k + 1) p_2^0] \quad (3.53)$$

Здесь первый член учитывает уход фононов и пропорционален числу ДУС в основном состоянии, когда происходит поглощение фонона, вероятность которого определяется матричным элементом (3.37). Второй член отвечает за приход фононов и пропорционален числу ДУС в возбужденном состоянии p_2 и определяется матричным элементом (3.41). Множитель

$(n_k + 1)$ учитывает возможность спонтанного и вынужденного испускания фононов, а уравнение (3.53) аналогично известному уравнению теории излучения Эйнштейна. Воспользуемся тем, что для двухуровневой системы с энергией возбуждения E

$$p_1^0 = \frac{1}{e^{-\frac{E}{T}} + 1}, \quad p_2^0 = \frac{1}{e^{\frac{E}{T}} + 1}. \quad (3.54)$$

Тогда

$$\dot{n}_k = -\frac{2\pi}{\hbar}\gamma^2 \left(\frac{\Delta_0}{E}\right)^2 \left(\frac{\hbar k}{2\rho v_s}\right) [n_k (p_1^0 - p_2^0) - p_2^0]. \quad (3.55)$$

Понимая, что правая часть этого уравнения обращается в нуль, то есть

$$p_2^0 = n_k^0 (p_1^0 - p_2^0). \quad (3.56)$$

Поэтому

$$\dot{n}_k = -\frac{2\pi}{\hbar}\gamma^2 \left(\frac{\Delta_0}{E}\right)^2 \left(\frac{\hbar k}{2\rho v_s}\right) (p_1^0 - p_2^0) [n_k - n_k^0]. \quad (3.57)$$

Определим скорость поглощения фононов в единицу времени одним ДУС с параметрами E, Δ_0 следующим образом:

$$\begin{aligned} \tau_k^{-1} &= \frac{2\pi}{\hbar}\gamma^2 \left(\frac{\Delta_0}{E}\right)^2 \left(\frac{\hbar k}{2\rho v_s}\right) (p_1^0 - p_2^0) = \\ &= \frac{2\pi}{\hbar}\gamma^2 \left(\frac{\Delta_0}{E}\right)^2 \left(\frac{\hbar k}{2\rho v_s}\right) \left(\frac{1 - e^{-\frac{E}{T}}}{1 + e^{\frac{E}{T}}}\right) = \\ &= \frac{\pi\gamma^2\omega}{\rho v_s^2} \left(\frac{\Delta_0}{E}\right)^2 \tanh \frac{E}{2T}. \end{aligned} \quad (3.58)$$

Эту величину можно интерпретировать так же, как обратное время свободного пробега фононов относительно поглощения одним ДУС с туннельными параметрами Δ_0, E .

8.3.5 3.5. Low-Temperature Thermal Conductivity of Amorphous Systems

Перейдем теперь к вычислению теплопроводности в модели, когда тепло переносится фононами, рассеиваемыми на двухуровневых системах. Полную скорость релаксации (обратное время свободного пробега фононов) получим, усреднив выражение (3.58) по распределению (3.18).

Для дальнейшего удобно в распределении (3.18) перейти к переменным

$$E = (\Delta^2 + \Delta_0^2)^{1/2}, \Delta_0 \quad (3.59)$$

Имеем

$$dE = \frac{\Delta d\Delta}{E}$$

Поэтому распределение ДУС по параметрам E, Δ_0 принимает вид

$$dP(E, \Delta_0) = P \frac{E}{\Delta \Delta_0} dE d\Delta_0 = P \frac{E}{\sqrt{E^2 - \Delta_0^2} \Delta_0} dE d\Delta_0 \quad (3.60)$$

Усредним (3.58) по ДУС с заданной энергией E и различным допустимым при этом E значениям $|\Delta_0| \leq E$:

$$\begin{aligned} r_{ph}^{-1}(\omega) &= PE \frac{\pi\gamma^2\omega}{E^2\rho v_s^2} \tanh e^{\frac{E}{2T}} \int_{-E}^E \frac{d\Delta_0 \Delta_0^2}{\Delta_0 \sqrt{E^2 - \Delta_0^2}} = \\ &= P \frac{\pi\gamma^2\omega}{\rho v_s^2} \tanh e^{\frac{E}{2T}} \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \frac{dx}{\sqrt{1-x^2}} = P \frac{\pi^2\gamma^2\omega}{2\rho v_s^2} \tanh \frac{\hbar\omega}{2T} \end{aligned} \quad (3.61)$$

Для обратной длины свободного пробега фононов с заданной частотой получим

$$\ell_{ph}^{-1}(\omega) = \frac{\pi^2 \gamma^2 \omega}{2\rho v_s^3} \tanh \frac{\hbar\omega}{2T} \quad (3.62)$$

Теплопроводность оценивается из газокинетических соображений суммированием по всем фононам:

$$\kappa(T) = \frac{1}{3} \sum_{\omega_k} C(\omega_k) v \ell_{ph}(\omega_k) \quad (3.63)$$

где $C(\omega_k)$ - теплоемкость фононов заданной частоты. Из физических соображений ясно, что основную роль играют тепловые фононы. Их теплосмкость пропорциональна T^3 , а длина свободного пробега теплового фонона, как это следует из (3.62), обратно пропорциональна энергии фонона $\hbar\omega \sim T$, если для тепловых фононов пренебречь зависимостью множителя $\tanh \frac{\hbar\omega}{2T}$ от температуры. Поэтому коэффициент теплопроводности для механизма, когда тепло переносится фононами, рассоеваемыми на ДУС, имеет температурную зависимость

$$\kappa(T) \sim T^2 \quad (3.64)$$

что и наблюдается в эксперименте.

8.3.6 3.6. Time Dependence of the Heat Capacity of Amorphous Systems

В рассматриваемой модели распределение туннельных параметров допускает большое значение высоты потенциального барьера. Это означает, что не все ДУС релаксируют одинаково быстро и число ДУС, вовлекаемых в релаксацию, зависит от времени. Это, в частности, должно проявляться в зависимости от времени теплоемкости системы. Для исследования этого явления найдем вначале распределение ДУС с заданной энергией возбуждения по времени туннелирования $\tau(E, \Delta_0)$.

Из (3.50) имеем

$$\tau(E, \Delta_0) = \frac{\gamma^2}{v_s^5} \frac{\Delta_0^2 E}{2\pi\rho\hbar^4} = \tau_{\min}(E) \left(\frac{E}{\Delta_0} \right)^2 \quad (3.65)$$

где

$$\tau_{\min}^{-1}(E) = \frac{\gamma^2}{v_s^5} \frac{E^3}{2\pi\rho\hbar^4} \quad (3.66)$$

Откуда следует соотношение

$$d\tau = -2\tau_{\min}(E) E^2 \frac{d\Delta_0}{\Delta_0^3} \quad (3.67)$$

которое удобно переписать в виде

$$\frac{d\Delta_0}{\Delta_0} = -\frac{\Delta_0^2 d\tau}{2\tau_{\min}(E) E^2} \quad (3.68)$$

Тогда

$$P \frac{E}{\Delta \Delta_0} dE d\Delta_0 = -P \frac{E}{\Delta} \frac{\Delta_0^2}{2\tau_{\min}(E) E^2} d\tau dE = -P \frac{E}{\Delta} \frac{1}{2\tau} d\tau dE \quad (3.69)$$

Воспользуемся тем, что

$$\frac{E}{\Delta} = \frac{E}{\sqrt{E^2 - \Delta_0^2}} = \frac{1}{\sqrt{1 - \left(\frac{\Delta_0}{E}\right)^2}} = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{\tau_{\min}}{\tau}}} \quad (3.70)$$

Поэтому распределение параметров ДУС по энергиям и временам релаксации имеет вид

$$P(\tau, E) = -P \frac{1}{2\tau \sqrt{1 - \frac{\tau_{\min}}{\tau}}} d\tau dE \quad (3.71)$$

Тогда распределение по скоростям релаксации τ^{-1} запишется как

$$P(\tau^{-1}, E) = P \frac{1}{2\tau^{-1} \sqrt{1 - \frac{\tau_{\min}}{\tau}}} d\tau^{-1} dE \quad (3.72)$$

Замечательной особенностью полученного распределения является его резкое возрастание для малых скоростей (больших времен) релаксации. За время эксперимента $t_0 > \tau_{\min}$ число ДУС, испытавших релаксацию, например, перешедших из основного в возбужденное состояние, дается выражением

$$\begin{aligned} N(E) &= \frac{P}{2} \int_{t_0^{-1}}^{\tau_{\min}^{-1}} \frac{1}{\tau^{-1} \sqrt{1 - \frac{\tau_{\min}}{\tau}}} d\tau^{-1} = \\ &= \int_{\frac{\tau_{\min}}{t_0}}^1 \frac{dx}{x \sqrt{(1-x)}} = \int_1^{\frac{t_0}{\tau_{\min}}} \frac{dx}{\sqrt{x(1-x)}} \end{aligned} \quad (3.73)$$

Поскольку

$$\int_1^a \frac{d\tau}{\sqrt{\tau(\tau-1)}} = \ln(2a + 2\sqrt{a(a-1)} - 1) \approx \ln(4a) \quad (3.74)$$

то

$$N(E) = \frac{P}{2} \ln \left(\frac{4t_0}{\tau_{\min}(E)} \right) \quad (3.75)$$

Отсюда следует, что число ДУС с данной энергией E , испытавших релаксацию, логарифмически растет со временем. Отсюда, в частности, следует, что теплосмкость зависит от времени эксперимента логарифмически:

$$\begin{aligned} C(t_0) &= \frac{P}{2} \ln \left(\frac{4t_0}{\tau_{\min}(E)} \right) \int_0^\infty \frac{E^2}{4T^2} \operatorname{sech}^2 \left(\frac{E}{2T} \right) dE \approx \\ &\approx \frac{\pi^2}{12} PT \ln \left(\frac{4t_0}{\tau_{\min}(T)} \right) \end{aligned} \quad (3.76)$$

демонстрируя тем самым неэргодичное поведение аморфной системы.

8.3.7 3.7. Saturation of Resonant Absorption

Если звуковая волна обладает достаточно малой амплитудой, то она не влияет на заселенность уровней ДУС. По мере увеличения этой амплитуды заселенность возбужденного состояния возрастает и достигает своего максимального значения

$p_2 = p_1 = 1/2$. Это связано с тем, что подсистема ДУС находится в квазиравновесии с фоновым термостатом, что обеспечивает положительность температуры, когда максимальная заселенность верхнего уровня не превышает $1/2$. Из (3.45) и (3.38) следует, что

$$-\dot{p}_2 = \tau_0^{-1} [(\bar{n}_k + 1) p_2 - \bar{n}_k (1 - p_2)] \quad (3.77)$$

скорость заселения возбужденного состояния действительно достигает своего максимального значения при $p_2 = 1/2$ (в режиме насыщения) и равна

$$-\dot{p}_{2\max} = \frac{1}{2\tau_0}. \quad (3.78)$$

Тогда максимальная поглощаемая мощность при резонансном поглощении равна

$$\dot{Q}_s = \hbar\omega \sum_{j, |E_j - \hbar\omega| < \Gamma} \dot{p}_{2\max}. \quad (3.79)$$

Здесь суммирование проводится по всем ДУС, находящимся в резонансе с поглощаемым звуком, при этом Γ - ширина линии поглощения. Полная поглощаемая мощность равна

$$\begin{aligned} \dot{Q}_s &= P\hbar\omega \cdot \frac{1}{2} 2\Gamma \int_0^{\tau_{\min}^{-1}(\hbar\omega)} P \frac{1}{\tau} \frac{1}{2\tau^{-1} \sqrt{1 - \frac{\tau_{\min}}{\tau}}} d\tau^{-1} = \\ &= P\hbar\omega \cdot \Gamma \frac{1}{2} \tau_{\min}^{-1}(\hbar\omega) \int_0^1 \frac{1}{\sqrt{1-x}} dx = P\hbar\omega \cdot \Gamma \tau_{\min}^{-1}(\hbar\omega) = \\ &= \frac{\gamma^2 \Gamma P \omega^4}{v_s^5 2\pi\rho}. \end{aligned} \quad (3.80)$$

8.3.8 3.8. The Dielectric Constant of Amorphous Systems

До сих пор мы рассматривали только акустические свойства диэлектрических стекол. Если туннелирующая частица обладает некоторым эффективным зарядом q , то ДУС может обладать дипольным моментом. В состоянии ϕ_1 ДУС обладает дипольным моментом

$$p_0 = q \int \phi_1^* x \phi_1 dx \quad (3.81)$$

В состоянии ϕ_2 дипольный момент равен

$$\int \phi_2^* x \phi_2 = -p_0$$

Тогда дипольный момент в состоянии ψ_1 равен

$$\begin{aligned} p_1 &= \int \psi_1^* x \psi_1 dx = \\ &= \int (\phi_1^* \cos \theta + \phi_2^* \sin \theta) x (\phi_1 \cos \theta + \phi_2 \sin \theta) dx \approx \\ &\approx \int \phi_1^* x \phi_1 \cos^2 \theta + \phi_2^* x \phi_2 \sin^2 \theta = p_0 \cos 2\theta = p_0 \frac{\Delta}{E} \end{aligned} \quad (3.82)$$

(Здесь мы пренебрегли перекрестным членом $\int \phi_1^* x \phi_2 \approx 0$). В состоянии ψ_2 дипольный момент равен

$$p_2 = \int \psi_2^* x \psi_2 dx = -p_0 \frac{\Delta}{E}$$

Заметим, что для симметричных ДУС, когда $\Delta = 0$, дипольный момент для собственных состояний $\psi_{1,2}$ отсутствует. Дипольный момент p_1 отвечает состоянию с энергией $-E/2$, дипольный момент p_2 - состоянию с энергией $E/2$. Тогда в состоянии термодинамического равновесия для среднего дипольного момента имеем

$$\bar{p} = p_0 \frac{\Delta}{E} \tanh\left(\frac{E}{2T}\right). \quad (3.83)$$

Во внешнем электрическом поле в состоянии ϕ_1 дипольный момент равен p_0 , и частица в электрическом поле ϵ приобретает дополнительную энергию $p_0\epsilon$. В состоянии ϕ_2 приобретается энергия $-p_0\epsilon$. Поэтому вместо разности энергий Δ в гамильтониане следует писать $\Delta + 2\epsilon p_0$. Поляризуемость определяется как

$$\tilde{\alpha} = \frac{\partial \bar{p}}{\partial \epsilon} = 2p_0 \frac{\partial \bar{p}}{\partial \Delta}. \quad (3.84)$$

Поскольку

$$\frac{\partial}{\partial \Delta} \frac{\Delta}{E} \tanh\left(\frac{E}{2T}\right) = \frac{\Delta_0^2}{E^3} \tanh\frac{E}{2T} + \frac{\Delta^2}{2E^2T} \operatorname{sech}\frac{E}{2T}, \quad (3.85)$$

то

$$\tilde{\alpha} = \frac{2p_0^2\Delta_0^2}{3E^3} \tanh\frac{E}{2T} + \frac{p_0^2\Delta^2}{3E^2T} \operatorname{sech}\frac{E}{2T}. \quad (3.86)$$

Для аккуратности мы ввели множитель $1/3$, учитывающий произвольную ориентацию дипольных моментов ДУС.

Проанализируем полученное выражение для поляризуемости в двух предельных случаях $\Delta_0 \gg \Delta$ и $\Delta_0 \ll \Delta$. В первом случае поляризуемость определяется слагаемым $\frac{2p_0^2\Delta_0^2}{3E^3} \tanh\frac{E}{2T}$ и обусловлена изменением дипольного момента, связанным с поглощением резонансного фотона. Во втором случае внешнее поле изменяет энергию ДУС и тем самым выводит его из равновесия с окружающей средой. Это приводит к перераспределению энергии между уровнями. Во втором случае электромагнитное поле не должно быть резонансным. Отклик, связанный с описанным процессом, называется релаксационным, в отличие от первого слагаемого, называемого резонансным откликом.

8.3.9 3.9. Jump Conduction

Выше были рассмотрены кинетические свойства аморфных диэлектриков. В таких системах отсутствует перенос заряда, и поэтому их электропроводность равна нулю. Обычно проводимость имеет место в кристаллах, в которых электроны коллективизированы. Это металлы. В них имеются широкие не полностью заполненные зоны, обеспечивающие проводимость. Если вещество не является кристаллом, то зонная картина не имеет места. Электроны локализованы вблизи атомов и обладают большим разбросом энергий при переходе от одного узла к другому. Если перекрытие этих локализованных одноэлектронных волновых функций мало, то проводимости нет. Однако если перекрытие не мало, то в системе может иметь место прыжковая проводимость с участием фононов. Перейдем к математическому описанию этого явления.

Определим локализованные состояния электронов как состояния, в которых волновая функция экспоненциально спадает с расстоянием:

$$\psi(r) \sim \frac{1}{r} \exp\left(-\frac{r}{a_B}\right), a_B = \frac{\kappa \hbar^2}{m^* e^2}.$$

Величина a_B называется радиусом локализации или боровским радиусом, κ - диэлектрическая проницаемость, m^* - эффективная масса электрона, e - заряд электрона. Пусть концентрация примесей N мала, так что $Na_B^3 \ll 1$. Проводимость в такой системе обусловлена прыжками электрона между локализованными состояниями. Энергия локализованных состояний предполагается разбросанной в некотором интервале энергий так, что два узла с одинаковой энергией находятся на очень большом расстоянии. С одной стороны, вероятность прыжка между двумя узлами, находящимися на расстоянии r_{ij} , пропорциональна квадрату интеграла перекрытия между локализованными состояниями:

$$\exp\left(-\frac{2r_{ij}}{a_B}\right)$$

С другой стороны, прыжок между состояниями, на которых энергия электрона соответственно равна ε_i и ε_j , возможен, если при этом разница энергий компенсируется поглощением одного фонона с энергией $\varepsilon_{ij} = \varepsilon_i - \varepsilon_j$. Вероятность такого процесса пропорциональна числу фононов с энергией ε_{ij} при температуре T :

$$\exp\left(-\frac{\varepsilon_{ij}}{T}\right)$$

Все узлы можно соединить воображаемым сопротивлением R_{ij} , обратно пропорциональным вероятности перехода:

$$R = R_0 e^{u_{ij}}, u_{ij} = \frac{2r_{ij}}{a_B} + \frac{\varepsilon_{ij}}{T}.$$

Такая случайная (в силу случайного разброса ε_{ij}) сетка сопротивлений моделирует изолятор и называется сеткой АбрахамсаМиллера.

8.3.10 3.10. Mott's Law

Энергии электронов будем отсчитывать от уровня химического потенциала. Пусть плотность состояний вблизи уровня Ферми равна g_μ . Рассмотрим узлы, энергия которых попадает в некоторый интервал $-\varepsilon/2, \varepsilon/2$. Число узлов с такой энергией $N(\varepsilon) = g_\mu \varepsilon$, а среднее расстояние между ними порядка

$$\bar{r}_{ij} \approx [N(\varepsilon)]^{-\frac{1}{3}}.$$

Для рассматриваемого множества узлов имеем

$$u_{ij} = \frac{2}{a_B [N(\varepsilon)]^{\frac{1}{3}}} + \frac{\varepsilon}{T} = \frac{2}{a_B g^{1/3} \varepsilon^{\frac{1}{3}}} + \frac{\varepsilon}{T}.$$

Определим ε из условия минимума u_{ij} (минимального сопротивления):

$$\begin{aligned} \frac{du_{ij}}{d\varepsilon} = 0, \varepsilon = \varepsilon_{\min} &= \left(\frac{T}{g^{1/3} a_B}\right)^{3/4} = (T^3 T_M)^{1/4} \\ T_M &= (g_\mu a_B^3)^{-1} \end{aligned}$$

Характерная длина прыжка

$$\bar{r} \approx \left(\frac{a_B}{g_\mu T} \right)^{1/4} = a_B \left(\frac{T_M}{T} \right)^{1/4}$$

Видно, что характерная длина прыжка зависит от температуры. Отсюда название - проводимость с переменной длиной прыжка. При этом сопротивление имеет вид

$$\rho = \rho_0 \exp a_B \left(\frac{T_M}{T} \right)^{1/4}$$

и называется законом Мотта. Этот закон легко обобщается на системы различной размерности (пленки, проволоочки). При этом для размерности d имеем

$$\rho = \rho_0 \exp a_B \left(\frac{T_M}{T} \right)^{1/(d+1)} \quad (3.87)$$

8.3.11 3.11. The Coulomb Gap

Между электронами имеется кулоновское отталкивание. Это взаимодействие может изменять плотность состояний на уровне Ферми. Фактически обращает его в нуль, как это видно из дальнейшего. В предыдущем разделе было показано, что прыжковая проводимость определяется плотностью одноэлектронных состояний вблизи уровня Ферми.

Покажем, каким образом это кулоновское взаимодействие влияет на плотность состояний и, как следствие, на прыжковую проводимость. При температуре, равной нулю, все состояния с $\varepsilon < 0$ заполнены, а с $\varepsilon > 0$ - свободны. Напомним, что энергия состояний отсчитывается от уровня Ферми. Рассмотрим два узла, находящиеся на расстоянии r_{ij} , при этом узел i с энергией $\varepsilon_i < 0$ занят, а узел j с энергией $\varepsilon_j > 0$ свободен.

Унесем электрон с узла i на бесконечность. Тогда энергия уровня на узле j уменьшится и станет равной

$$\varepsilon_j - \frac{e^2}{\kappa r_{ij}}$$

Эта энергия должна быть больше энергии ε_i . В противном случае электрону было бы выгодно с самого начала сидеть на узле j . Таким образом, имеем

$$\varepsilon_j - \varepsilon_i - \frac{e^2}{\kappa r_{ij}} > 0$$

Рассмотрим узлы из интервала

$$\varepsilon_j - \varepsilon_i < \varepsilon.$$

Тогда имеем ограничение снизу на r_{ij} и сверху для N :

$$\varepsilon > \frac{e^2}{\kappa r_{ij}}, \quad N(\varepsilon) = r_{ij}^{-3} < \left(\frac{\kappa \varepsilon}{e^2} \right)^3.$$

Последнему неравенству заведомо удовлетворяет плотность состояний

$$g(\varepsilon) = \frac{dN(\varepsilon)}{d\varepsilon} \sim \frac{\kappa^3}{e^6} (\varepsilon - \mu)^2$$

Видно, что кулоновское взаимодействие приводит к обращению в нуль плотности состояний на уровне Ферми. Этот закон называется мягкой кулоновской щелью.

В двумерном случае из аналогичных рассуждений следует, что

$$N(\varepsilon) = r_{ij}^{-2} < \left(\frac{\varkappa\varepsilon}{e^2}\right)^2, \quad g(\varepsilon) = \frac{dN(\varepsilon)}{d\varepsilon} \sim \frac{\varkappa^2}{e^4} |\varepsilon - \mu|.$$

8.3.12 3.12. The Efros-Shklovskii Law

При выводе закона Мотта плотность состояний на уровне Ферми предполагалась постоянной. В случае кулоновской щели

$$g(\varepsilon) \sim \left(\frac{\varkappa}{e^2}\right)^d |\varepsilon|^{d-1}$$

Тогда число узлов с характерной энергией порядка ε равно

$$N(\varepsilon) \sim g(\varepsilon)\varepsilon = \left(\frac{\varkappa\varepsilon}{e^2}\right)^d$$

и среднее расстояние между такими узлами равно

$$\bar{r}_{ij} \approx [N(\varepsilon)]^{-1/d} = \frac{e^2}{\varkappa\varepsilon}$$

Для сетки Миллера-Абрахамса имеем

$$u_{ij} = \frac{2e^2}{a_B \varkappa \varepsilon} + \frac{\varepsilon}{T}$$

Это выражение имеет минимум при

$$\varepsilon = \varepsilon_{\min} = \left(\frac{e^2 T}{a_B \varkappa}\right)^{1/2} = (T \cdot T_{ES})^{1/2}$$

Интересно, что проводимость при этом не зависит от размерности системы и равна

$$\rho = \rho_0 \exp\left(\frac{T_{ES}}{T}\right)^{1/2}, \quad T_{ES} = \frac{e^2}{a_B \varkappa}. \quad (3.88)$$

Ширина кулоновской щели находится из условия

$$g(\Delta) = \left(\frac{\varkappa}{e^2}\right)^d |\Delta|^{d-1} = g_\mu$$

когда плотность состояний, определяемая кулоновской щелью, становится равной плотности состояний в отсутствие кулоновского взаимодействия. Тогда

$$\Delta = g_\mu^{1/(d-1)} \left(\frac{\varkappa}{e^2}\right)^{-d/(d-1)}$$

При температурах $T > \Delta$ определяющую роль играют возбуждения вне кулоновской щели и для проводимости имеет место закон Мотта (3.87). При температурах $T < \Delta$ в проводимости участвуют электроны внутри кулоновской щели и наблюдается зависимость Эфроса-Шкловского (3.88).

8.4 Linear Response Theory by Maksimov

Наряду с методом кинетического уравнения для расчета кинетических и релаксационных характеристик системы широко используется метод расчета, основанный на теории линейного отклика. В этом подходе кинетические характеристики системы выражаются через ее равновесные характеристики. Рассматриваемая система, исходно находящаяся в равновесии, медленно выводится из равновесия достаточно слабым внешним возмущением. Для решения задач подобного типа существует хорошо разработанный формализм, основанный на методе функций Грина. Ключевым понятием в этом подходе является матрица плотности, или статистический оператор.

8.4.1 4.1. The Density Matrix

Рассмотрим квантово-механическую систему с большим числом степеней свободы. Разделим эту систему на две - подсистему i и подсистему j . Пусть Ψ - полная волновая функция системы, ψ_i - набор базисных векторов подсистемы i , а θ_j - набор базисных функций подсистемы j . Тогда волновая функция Ψ может быть представлена в виде линейной комбинации:

$$\Psi = \sum_{ij} C_{ij} \psi_i \theta_j \quad (4.1)$$

Пусть A - квантово-механический оператор, действующий в пространстве подсистемы i . Из курса квантовой механики известно, что если система находится в состоянии с волновой

функцией ψ , то значение некоторого квантово-механического оператора A в этом состоянии определяется как

$$\bar{A} = \langle \psi | A | \psi \rangle \quad (4.2)$$

Если система является частью большой системы, то

$$\begin{aligned} \bar{A} &= \left\langle \sum_{i'j'} C_{i'j'} \psi_{i'} \theta_{j'} \left| A \right| \sum_{ij} C_{ij} \psi_i \theta_j \right\rangle = \\ &= \sum_{ij} \sum_{i'j'} C_{i'j'} C_{ij} \langle \theta_{j'} | \theta_j \rangle \langle \psi_{i'} | A | \psi_i \rangle = \\ &= \sum_{i'i} \left(\sum_j C_{i'j} C_{ij} \right) \langle \psi_{i'} | A | \psi_i \rangle = \sum_{i'i} \rho_{ii'} A_{i'i} = Sp \rho A, \end{aligned}$$

где $\rho_{ii'} = \sum_j C_{ij} C_{ji'}^+$, $A_{i'i} = \langle \psi_{i'} | A | \psi_i \rangle$. Здесь мы ввели оператор ρ , называемый матрицей плотности, формально записанный в базисе собственных функций подсистемы i , но параметрически зависящий от переменных подсистемы j . Легко убедиться, что оператор ρ - эрмитов. Тогда он может быть приведен к диагональному виду с вещественными диагональными элементами.

Пусть $|i(t)\rangle$ - набор зависящих от времени собственных функций оператора ρ , также зависящего от времени. Тогда в этом базисе

$$\rho = \sum_i \rho_i |i(t)\rangle \langle i(t)|$$

Если A - единичный оператор, то $\bar{A} = \langle \Psi | 1 | \Psi \rangle = 1$. Поэтому $Sp \rho = 1$ и

$$\sum_i \rho_i = 1.$$

Если $A = |i'(t)\rangle \langle i'(t)|$, то

$$\bar{A} = \langle \Psi | i'(t) \rangle \langle i'(t) | \Psi \rangle = |\langle i'(t) | \Psi \rangle|^2 \geq 0.$$

С другой стороны,

$$\bar{A} = Sp(\rho |i'(t)\rangle \langle i'(t)|) = \rho_{i'}$$

Поэтому $\rho_i \geq 0$.

Итак,

$$\begin{aligned} \bar{A} &= \sum_i \rho_i A_i = Sp(\rho A); \\ \rho_i &= \langle i | \rho | i \rangle, A_i = \langle i | A | i \rangle. \end{aligned} \quad (4.3)$$

Мы видим, что значения диагональных матричных элементов оператора ρ могут быть интерпретированы как вероятности нахождения системы в том или ином квантово-механическом состоянии. Если все ρ_i , за исключением одного, равны нулю, то система находится в чистом состоянии и описывается волновой функцией. В противном случае говорят, что система находится в смешанном состоянии.

В этом случае для нахождения среднего значения величины, определяемой оператором A , используется рецепт, даваемый соотношением (4.3). Легко убедиться, что необходимое и достаточное условие нахождения системы в чистом состоянии есть $\rho = \rho^2$.

Найдем уравнение эволюции для матрицы плотности, аналогичное уравнению Шредингера. Поскольку

$$|i(t)\rangle = e^{-iHt}|i(0)\rangle,$$

где H - гамильтониан системы, то

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \sum_i \rho_i e^{-iHt} |i(0)\rangle \langle i(0)| e^{iHt} = -i(H\rho - \rho H) = i[\rho H].$$

Последнее уравнение называется уравнением Лиувилля.

Если подсистема j есть термостат с температурой T , то в равновесии

$$\rho_0 = e^{-H/T} / Sp(e^{-H/T})$$

8.4.2 4.2. Response to Mechanical Disturbance

Пусть адиабатически ($\varepsilon \rightarrow +0$) в момент времени $t = -\infty$ включается механическое возмущение, периодически зависящее от времени:

$$V = - \left[e^{-i(\omega+i\varepsilon)t} B_\omega + e^{-i(-\omega+i\varepsilon)t} B_{-\omega} \right], B_\omega^+ = B_{-\omega}, \varepsilon > 0 \quad (4.4)$$

Обратим внимание, что тепловое возмущение (создание градиента температур) не может быть представлено в таком виде.

Чтобы найти временную эволюцию матрицы плотности, воспользуемся уравнением Лиувилля ($\hbar = 1$):

$$i\frac{\partial \rho}{\partial t} = [H + V, \rho]$$

причем для $\rho(t)$

$$\rho(-\infty) = \rho_0 = e^{-H/T} / Sp(e^{-H/T})$$

В представлении взаимодействия

$$\rho_i = e^{iHt} \rho e^{-iHt}, \rho_i(-\infty) = \rho_0 \quad (4.5)$$

и подчиняется уравнению

$$i\frac{\partial \rho_i(t)}{\partial t} = [V(t), \rho_i(t)], V(t) = e^{iHt} V e^{-iHt} \quad (4.6)$$

Тогда (4.5), (4.6) эквивалентны интегральному уравнению

$$\rho_i(t) = \rho_0 + \frac{1}{i} \int_{-\infty}^t [V(t'), \rho_i(t')] dt' \quad (4.7)$$

или

$$\rho = \rho_0 + \frac{1}{i} \int_{-\infty}^t e^{-iH(t-t')} [V, \rho] e^{iH(t-t')} dt' \quad (4.8)$$

В линейном по возмущению приближении получим

$$\rho = \rho_0 + \frac{1}{i} \int_{-\infty}^t e^{-iH(t-t')} [V, \rho_0] e^{iH(t-t')} dt' = \quad (4.9)$$

$$= \rho_0 + \frac{1}{i} \int_{-\infty}^t [V(t' - t), \rho_0] dt' \quad (4.10)$$

Для вычисления коммутатора можно воспользуемся тождеством Кубо: ²

$$\begin{aligned} [A, e^{-\beta H}] &= -e^{-\beta H} \int_0^\beta e^{\lambda H} [A, H] e^{-\lambda H} d\lambda = \\ &= -e^{-\beta H} \int_0^\beta [A(-i\lambda), H] d\lambda \end{aligned}$$

Тогда получается еще одна форма представления матрицы плотности в линейном по возмущению приближении:

$$\rho = \rho_0 \left(1 - \int_0^\beta \int_{-\infty}^t e^{\lambda H} \frac{1}{i} [V(t' - t), H] e^{-\lambda H} d\lambda \right)$$

Отсюда следует, что $S(0) = 0$. Дифференцируем последнее выражение по β :

$$\partial S(\beta) / \partial \beta = -\exp(\beta H) [A, H] \exp(-\beta H)$$

Интегрируя последнее уравнение от 0 до β с учетом начального условия, получим

⁰² Положим $[A, \exp(-\beta H)] = \exp(-\beta H) \cdot S(\beta)$. Перепишем это выражение в виде

$$\exp(\beta H) A \exp(-\beta H) - A = S(\beta)$$

$$S(\beta) = - \int_0^\beta d\lambda \exp(\lambda H) [A, H] \exp(-\lambda H)$$

откуда следует тождество Кубо:

$$\begin{aligned} [A, \exp(-\beta H)] &= - \exp(-\beta H) \int_0^\beta d\lambda \exp(\lambda H) [A, H] \exp(-\lambda H) \\ &= \rho_0 \left(1 - \int_0^\beta \int_{-\infty}^t \frac{1}{i} [V(t' - t - i\lambda), H] d\lambda \right) = \\ &= \rho_0 \left(1 - \int_0^\beta \int_{-\infty}^t \dot{V}(t' - t - i\lambda) dt' d\lambda \right) \end{aligned} \quad (4.11)$$

Воспользуемся полученными формулами для нахождения в линейном приближении среднего значения любой наблюдаемой величины A :

$$\begin{aligned} \bar{A} &= Sp(\rho_0 A) = \bar{A}_0 + \frac{1}{i} \int_{-\infty}^t Sp([V(t' - t), \rho_0] A) dt' = \\ &= \bar{A}_0 + \int_{-\infty}^\infty \frac{1}{i} \theta(t - t') Sp([A(t), V(t')] \rho_0) dt' = \\ &= \bar{A}_0 + \int_{-\infty}^\infty \langle\langle A(t), V(t') \rangle\rangle dt' \end{aligned} \quad (4.12)$$

где для запаздывающей функции Грина введено обозначение

$$\langle\langle A(t), V(t') \rangle\rangle_0 = -i\theta(t - t') Sp([A(t), V(t')] \rho_0) \quad (4.13)$$

Можно также воспользоваться формулой (4.11) и получить

$$\bar{A} = \bar{A}_0 - \int_0^\beta \int_{-\infty}^t Sp \rho_0 \dot{V}(t' - t - i\lambda) A dt' d\lambda = \quad (4.14)$$

$$= \bar{A}_0 + \int_0^\beta \int_{-\infty}^t \langle V(t' - i\lambda) \dot{A}(t) \rangle dt' d\lambda \quad (4.15)$$

причем

$$\dot{V} = \frac{1}{i} [V, H].$$

8.4.3 4.3. Two-Time Delayed Functions of Green and FDT

Напомним определение запаздывающей функции Грина и ее спектральное представление:

$$\begin{aligned} \langle\langle A(t) | B(t') \rangle\rangle &= -i\theta(t - t') Sp(\rho [A(t), B(t')]) = \\ &= -i\theta(t - t') Z^{-1} \sum_{\mu\nu} (\exp(-\beta E_\mu) - \exp(-\beta E_\nu)) \times \\ &\times \exp(i(E_\mu - E_\nu)(t - t')) A_{\mu\nu} B_{\nu\mu}. \end{aligned}$$

где $A(t), B(t)$ - операторы A и B в представлении Гайзенберга, $\rho = \exp(-\beta H)$ - матрица плотности, $Z = \text{Sp} \exp(-\beta H)$, μ, ν - собственные состояния гамильтониана H . Из спектрального представления, в частности, следует, что запаздывающая функция Грина зависит только от разности времен $t - t'$.

Выведем соотношение, называемое флуктуационно-диссипационной теоремой (ФДТ). Для этого вычислим фурье-компоненту функции Грина в верхней части комплексной полуплоскости:

$$\begin{aligned} \langle\langle A | B \rangle\rangle_{\omega+i\varepsilon} &= -i \int_{-\infty}^{\infty} \theta(t) e^{i(\omega+i\varepsilon)t} \text{Sp}(\rho [A(t), B(t')]) \\ \langle\langle A | B \rangle\rangle_{\omega+i\varepsilon} &= -i \int_{-\infty}^{\infty} \theta(t) e^{i(\omega+i\varepsilon)t} e^{i(E_\mu - E_\nu)t} dt \dots = \\ &= - \frac{e^{i(\omega+E_\mu-E_\nu+i\varepsilon)t}}{(\omega + E_\mu - E_\nu + i\varepsilon)} \Big|_0^\infty \dots = \\ &= Z^{-1} \sum_{\mu\nu} \frac{1}{(\omega + E_\mu - E_\nu + i\varepsilon)} (e^{-\beta E_\mu} - e^{-\beta E_\nu}) A_{\mu\nu} B_{\nu\mu} \end{aligned} \quad (4.16)$$

Используя формулу Сохоцкого

$$\frac{1}{(\omega + E_\mu - E_\nu + i\varepsilon)} = P \frac{1}{(\omega + E_\mu - E_\nu + i\varepsilon)} - i\pi \delta(\omega + E_\mu - E_\nu + i\varepsilon) \quad (4.17)$$

получим

$$\begin{aligned} \text{Im} \langle\langle A | B \rangle\rangle_{\omega+i\varepsilon} &= \\ &= -\pi Z^{-1} \sum_{\mu\nu} \delta(\omega + E_\mu - E_\nu) \exp(-\beta E_\mu) \times \\ &\times (1 - \exp(-\beta(E_\nu - E_\mu))) A_{\mu\nu} B_{\nu\mu} \end{aligned} \quad (4.18)$$

Домножим (4.18) на $\frac{e^{-i\omega t}}{\pi} \coth(\beta\omega/2) = \frac{e^{-i\omega t}}{\pi} \frac{1+\exp(-\beta\omega)}{1-\exp(-\beta\omega)}$ и проинтегрируем по ω . В результате получим

$$\begin{aligned} &\int \text{Im} \langle\langle A | B \rangle\rangle_{\omega+i\varepsilon} \frac{e^{-i\omega t}}{\pi} \coth(\beta\omega/2) d\omega = \\ &= - \sum_{\mu\nu} e^{-i(E_\nu - E_\mu)t} \exp(-\beta E_\mu) \times \\ &\times (1 + \exp(-\beta(E_\nu - E_\mu))) A_{\mu\nu} B_{\nu\mu} = \\ &= -\text{Sp}(\rho(A(t)B + BA(t))) = -\langle A(t)B + BA(t) \rangle. \end{aligned} \quad (4.19)$$

Фурье-компонента коррелятора $\langle A(t)B + BA(t) \rangle$ связана с фурье-компонентой мнимой части функции Грина соотношением

$$\int \langle A(t)B + BA(t) \rangle e^{\omega t} = -2 \text{Im} \langle\langle A | B \rangle\rangle_{\omega+i\varepsilon} \coth(\beta\omega/2). \quad (4.20)$$

Это один из вариантов записи флуктуационно-диссипационной теоремы, связывающей равновесные флуктуации, определяемые корреляторами, с диссипациями, определяемыми

мнимой частью этих корреляторов. Таким образом, для использования ФДТ необходимо знать функцию Грина, точнее ее мнимую часть.

Получим уравнение эволюции функции Грина. Напомним, что по определению

$$\langle\langle A(t) | B \rangle\rangle = -i\theta(t)\langle[A(t), B]\rangle \quad (4.21)$$

$$\langle\langle A | B \rangle\rangle_\omega = \int_{-\infty}^{\infty} dt \langle\langle A(t) | B \rangle\rangle e^{i(\omega+i\delta)t} \quad (4.22)$$

$$\langle\langle A(t) | B \rangle\rangle = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt \langle\langle A | B \rangle\rangle_\omega e^{-i(\omega+i\delta)t} \quad (4.23)$$

Из уравнения (4.21) имеем

$$\frac{d}{dt} \langle\langle A(t) | B \rangle\rangle = -i\delta(t)\langle[A, B]\rangle + \langle\langle \dot{A}(t) | B \rangle\rangle. \quad (4.24)$$

Взяв от соотношения (4.24) фурье-преобразование в соответствии с (4.22), получим уравнение эволюции для фурье-компоненты функции Грина:

$$-i\omega \langle\langle A | B \rangle\rangle_\omega = -i\langle[A, B]\rangle + \langle\langle \dot{A} | B \rangle\rangle_\omega. \quad (4.25)$$

Первый член в правой части (4.25) есть среднее значение коммутатора операторов A и B . При выводе последнего соотношения в левой части было выполнено интегрирование по частям и учтено, что при $t = -\infty$ подынтегральное выражение обращается в нуль из-за θ -функции, а при $t = \infty$ из-за множителя при $\exp(-\delta\infty) \rightarrow 0$, поскольку ω берется в верхней полуплоскости. Видно, что уравнение для $\langle\langle A | B \rangle\rangle_\omega$ содержит функцию Грина $\langle\langle \dot{A} | B \rangle\rangle_\omega$, где $\dot{A} = \frac{d}{dt}A(t) = \frac{1}{i}[A, H]$. Уравнение, аналогичное (4.25), возникает в цепочке Боголюбова при исследовании эволюции классических функций распределения, когда в уравнение для функции распределения входят функции распределения более высокого порядка.

Покажем, что для эрмитовых операторов запаздывающая функция Грина - вещественна. Это свойство следует из следующей цепочки преобразований:

$$\begin{aligned} & \langle\langle A(t), B(t') \rangle\rangle^* = \\ & = i\theta(t-t') \langle B^+(t') A^+(t) - A^+(t) B^+(t') \rangle = \\ & = -i\theta(t-t') \langle A^+(t) B^+(t') - B^+(t') A^+(t) \rangle = \\ & = \langle\langle A^+(t), B^+(t') \rangle\rangle = \langle\langle A(t), B(t') \rangle\rangle. \end{aligned} \quad (4.26)$$

8.4.4 4.4. Response to an Electric Field. Electrical Conductivity

Рассмотрим реакцию системы на переменное внешнее электрическое поле. В этом случае возмущение имеет вид

$$\begin{aligned} V_t &= - \sum e_j (\mathbf{E} \mathbf{x}_j) \cos(\omega t) e^{\varepsilon t} = \\ &= -(\mathbf{E} \mathbf{P}) \cos(\omega t) e^{\varepsilon t}; \varepsilon \rightarrow 0, \varepsilon > 0, \end{aligned} \quad (4.27)$$

где e_j - заряд j -частицы, $\mathbf{x}_j$ - радиус-вектор ее положения, $\mathbf{E}$ - электрическое поле, $\mathbf{P} = \sum e_j \mathbf{x}_j$ - оператор вектора дипольного момента. Под влиянием этого возмущения в системе

возникает электрический ток, причем V - оператор возмущения, а E - его амплитуда. Подставляя это выражение в (4.12), получим

$$\begin{aligned}\overline{J_\alpha}(t) &= \int_{-\infty}^{\infty} \langle \langle J_\alpha(t), V_{t'}(t') \rangle \rangle dt' \\ V_{t'}(t') &= -(\mathbf{EP}) \cos(\omega t') e^{\varepsilon t'} \\ J_\alpha(t) &= \sum e_j \dot{x}_{j\alpha}(t) = \dot{P}_\alpha(t)\end{aligned}\quad (4.28)$$

В этом выражении нет постоянного слагаемого $\langle J_\alpha \rangle = 0$, так как в равновесии (при отсутствии возмущения) ток равен нулю.

Воспользуемся тем, что для эрмитовых операторов запаздывающая функция Грина вещественна (см. (4.26)). Тогда

$$\begin{aligned}\overline{J_\alpha}(t) &= - \int_{-\infty}^{\infty} \langle \langle J_\alpha(t), P_\beta(t') \rangle \rangle E_\beta \cos(\omega t') e^{\varepsilon t'} dt' = \\ &= - \operatorname{Re} \int_{-\infty}^{\infty} \langle \langle J_\alpha(t), P_\beta(t') \rangle \rangle E_\beta e^{-i\omega t'} e^{\varepsilon t'} dt' = \\ &= - \operatorname{Re} \int_{-\infty}^{\infty} \langle \langle J_\alpha(t), P_\beta(t') \rangle \rangle E_\beta e^{i(\omega+i\varepsilon)(t-t')} e^{-i(\omega+i\varepsilon)t} dt'\end{aligned}$$

Поэтому

$$\begin{aligned}\overline{J_\alpha}(t) &= - \operatorname{Re} (\langle \langle J_\alpha, P_\beta \rangle \rangle_\omega e^{-i\omega t + \varepsilon t} E_\beta) = \\ &= \operatorname{Re} (\sigma_{\alpha\beta} e^{-i\omega t + \varepsilon t} E_\beta) \\ \sigma_{\alpha\beta}(\omega) &= - \langle \langle J_\alpha, P_\beta \rangle \rangle_\omega = \\ &= - \int_{-\infty}^{\infty} \langle \langle J_\alpha, P_\beta(t') \rangle \rangle e^{\varepsilon t' - i\omega t'} dt'\end{aligned}\quad (4.29)$$

Для полноты изложения заметим, что переход к пределу $\varepsilon \rightarrow 0$ осуществляется после перехода к термодинамическому пределу $V \rightarrow \infty, N \rightarrow \infty, \frac{V}{N} \rightarrow \text{const}$.

Итак, адиабатическое включение взаимодействия приводит к возникновению в системе электрического тока с конечной проводимостью, то есть необратимому процессу. Статическая

проводимость получается из (4.29) предельным переходом $\omega \rightarrow 0$:

$$\sigma_{\alpha\beta} = - \int_{-\infty}^{\infty} \langle \langle J_\alpha, P_\beta(t') \rangle \rangle e^{\varepsilon t'} dt' \quad (4.30)$$

Перепишем (4.30) в виде (сделав циклическую перестановку операторов под знаком Sp):

$$\sigma_{\alpha\beta}(\omega) = i \int_{-\infty}^0 dt e^{\varepsilon t - i\omega t} Sp \{ [P_\beta(t)\rho] J_\alpha \}$$

и воспользуемся тождеством Кубо:

$$[P_\beta(t)\rho] = -i\rho_0 \int_0^\beta d\lambda e^{\lambda H} \dot{P}_\beta(t) e^{-\lambda H}$$

В результате получим формулу для проводимости

$$\begin{aligned}\sigma_{\alpha\beta}(\omega) &= \int_0^\beta d\lambda \int_0^\infty dt e^{-\varepsilon t + i\omega t} \langle e^{\lambda H} J_\beta(-t) e^{-\lambda H} J_\alpha \rangle_0 = \\ &= \int_0^\beta d\lambda \int_0^\infty dt e^{-\varepsilon t + i\omega t} \langle J_\beta J_\alpha(t + i\lambda) \rangle_0\end{aligned}$$

которая собственно и называется формулой Кубо для проводимости.

В статическом пределе имеем

$$\sigma_{\alpha\beta}(0) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_0^\beta d\lambda \int_0^\infty dt e^{-\varepsilon t} \langle J_\beta J_\alpha(t + i\lambda) \rangle_0$$

Таким образом, задача вычисления проводимости сводится к расчету временных корреляционных функций токов в условиях статистического равновесия.

Существуют различные приближенные методы расчета этих корреляторов, которые, однако, существенно выходят за рамки курса. Тем не менее в качестве примера использования формул Кубо рассмотрим электропроводность, исходя из простейших предположений о поведении временных корреляционных функций.

Рассмотрим выражение

$$\sigma_{\alpha\beta} = i \int_{-\infty}^0 \langle [J_\alpha, P_\beta(t)] \rangle_0 e^{\varepsilon t} dt$$

Из физических соображений следует, что корреляция между значениями двух физических величин, взятых в различные моменты времени, ослабевает с ростом разделяющего их временного промежутка. Предположим, что это ослабление имеет экспоненциальную зависимость с характерной временной постоянной τ :

$$\langle [J_\alpha, P_\beta(t)] \rangle \approx \langle [J_\alpha, P_\beta] \rangle_0 e^{-\frac{|t|}{\tau}}.$$

Для коррелятора при совпадающих временах имеем

$$\langle [J_\alpha, P_\beta] \rangle_0 = \left\langle \left[\sum_i \frac{e}{m} p_i^\alpha, \sum_j e x_j^\beta \right] \right\rangle = -i \delta_{\alpha\beta} \frac{e^2}{m} N,$$

где N - полное число электронов в системе. В результате имеем

$$\sigma_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta} \frac{e^2}{m} N \int_{-\infty}^0 e^{-\frac{|t|}{\tau}} e^{\varepsilon t} dt = \delta_{\alpha\beta} \frac{e^2}{m\tau} N$$

Это коэффициент пропорциональности между полным током, текущим во всем объеме проводника, и электрическим полем. Для единичного объема получим

$$\sigma_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta} \frac{e^2 n}{m\tau}$$

где n - плотность электронов. Мы опять получили формулу Друде, ранее найденную с помощью кинетического уравнения. Конечно же, задачей микроскопической теории является как раз вычисление этого τ , для чего и существуют современные методы теоретической физики.

8.4.5 4.5. Brownian Motion

В качестве еще одного приложения метода функций Грина исследуем смещение броуновской частицы. Даже если мы интересуемся только случаем высоких температур (когда результат является не квантовым, а классическим и постоянная Планка выпадает из ответа), удобнее задачу решать квантовомеханически с самого начала, введя операторы смещения частицы x в гайзенберговском представлении

$$x(t) = \exp(iHt)x\exp(-iHt)$$

Средний квадрат смещения определяется коррелятором

$$\langle (x(t) - x(0))(x(t) - x(0)) \rangle, \quad (4.31)$$

$$\langle \dots \rangle = Z^{-1} \text{Sp}(\exp(-\beta H) \dots). \quad (4.32)$$

Учтем, что коррелятор от двух одинаковых операторов зависит только от разности времен. Поэтому

$$\langle x(t)x(t) \rangle = \langle x(0)x(0) \rangle \quad (4.33)$$

а интересующий нас коррелятор (4.31) имеет вид

$$2\langle x(0)x(0) \rangle - \langle x(t)x(0) + x(0)x(t) \rangle \quad (4.34)$$

Вычислим вначале коррелятор $\langle x(t)x(0) + x(0)x(t) \rangle$. Для этого положим в соотношении (4.25) $A = B = x$:

$$-i\omega \langle x | x \rangle_\omega = -i \langle [x, x] \rangle + \langle \dot{x} | x \rangle_\omega \quad (4.35)$$

Затем в соотношении (4.25), сделав подстановку $A = \dot{x}$, $B = x$, получим

$$-i\omega \langle \dot{x} | x \rangle_\omega = -i \langle [\dot{x}, x] \rangle + \langle \ddot{x} | x \rangle_\omega \quad (4.36)$$

Для вычисления $\langle \ddot{x} | x \rangle_\omega$ воспользуемся уравнением Ланжевена для $\ddot{x}$:

$$\ddot{x} = -\nu \dot{x} + f(t) \quad (4.37)$$

где ν - сила трения, а $f(t)$ - ланжевенский источник - случайная сила, такая, что среднее значение коррелятора

$$\langle f(t)f(t') \rangle \sim \delta(t - t')$$

Подставим в (4.36) выражение для $\ddot{x}$ из (4.37). Тогда возникнут две функции Грина $\langle \dot{x} | x \rangle_\omega$ и $\langle f | x \rangle_\omega$. Последняя функция Грина определяется коррелятором $\langle f(t)x \rangle$ - координаты в нулевой момент времени и силы в момент времени t . В силу принципа причинности этот коррелятор отличен от нуля только при $t < 0$. С другой стороны, в функцию Грина этот коррелятор входит в комбинации с множителем $\theta(t)$. Поэтому $\langle \langle f(t) | x \rangle \rangle = 0$ и, следовательно, $\langle \langle f | x \rangle \rangle_\omega = 0$

Учитывая, что $[x, x] = 0$ и $[\dot{x}, x] = -\frac{i}{m}$, (временно положим массу $m = 1$). Тогда

$$\begin{aligned} -i\omega \langle x | x \rangle_\omega &= \langle \dot{x} | x \rangle_\omega, \\ i\omega \langle \dot{x} | x \rangle_\omega &= 1 + \nu \langle \dot{x} | x \rangle_\omega. \end{aligned} \quad (4.38)$$

Откуда

$$\langle\langle x | x \rangle\rangle_\omega = \frac{i}{\omega(i\omega - \nu)} \quad (4.39)$$

и

$$\text{Im}\langle\langle x | x \rangle\rangle_\omega = -\frac{\nu}{\omega(\nu^2 + \omega^2)} \quad (4.40)$$

Подставим (4.40) в (4.19):

$$\langle x(t)x + xx(t) \rangle = \int \frac{\nu}{\omega(\nu^2 + \omega^2)} \frac{e^{-i\omega t}}{\pi} \coth(\beta\omega/2) d\omega \quad (4.41)$$

Тогда для квадрата смещения получим

$$\begin{aligned} & \langle (x(t) - x(0))(x(t) - x(0)) \rangle = \\ & = \int \frac{\nu}{\omega(\nu^2 + \omega^2)} \frac{1 - e^{-i\omega t}}{\pi} \coth(\beta\omega/2) d\omega \end{aligned} \quad (4.42)$$

По своему физическому смыслу интеграл (4.42) вещественный. Поэтому фактически нас интересует интеграл

$$I(t) = \frac{1}{\pi} \int (1 - \cos(\omega t)) \coth(\beta\omega/2) \frac{\nu}{\omega(\nu^2 + \omega^2)} d\omega \quad (4.43)$$

который при высоких температурах, когда при $\beta \rightarrow \infty$ имеем $\coth(\beta\omega/2) \rightarrow \frac{2}{\beta\omega}$, сводится к

$$\frac{2}{\beta\pi} \int (1 - \cos(\omega t)) \frac{\nu}{\omega^2(\nu^2 + \omega^2)} d\omega \quad (4.44)$$

Заметим, что $I(0) = 0$, и вычислим производную (фактор $\frac{2}{\beta\pi}$ будет восстановлен в конце):

$$\partial I / \partial t = \int \sin(\omega t) \frac{\nu}{\omega(\nu^2 + \omega^2)} d\omega \quad (4.45)$$

При $t = \infty$

$$\begin{aligned} \partial I / \partial t &= \int \sin(\omega t) \frac{\nu}{\omega(\nu^2 + (\omega)^2)} d\omega = \\ &= \int \sin z \frac{\nu}{z(\nu^2 + (z/t)^2)} dz = 1/\nu \int \sin z / z dz = \pi/\nu \end{aligned}$$

Вторая производная

$$\partial^2 I / \partial t^2 = \int \cos(\omega t) \frac{\nu}{(\nu^2 + \omega^2)} d\omega = \int \exp(i\omega t) \frac{\nu}{(\nu^2 + \omega^2)} d\omega \quad (4.46)$$

Этот интеграл вычисляется замыканием в верхней части комплексной полуплоскости, где подынтегральное выражение имеет простой полюс $\omega = i\varepsilon$. Тогда

$$\int \exp(i\omega t) \frac{\nu}{(\nu^2 + \omega^2)} d\omega = 2\pi i \frac{\exp(-\nu t)}{2i\nu} = \pi \exp(-\nu t) \quad (4.47)$$

Интегрируя с граничным условием на ∞ , получим

$$\begin{aligned}\partial I / \partial t &= \int \sin(\omega t) \frac{\nu}{\omega(\nu^2 + (\omega)^2)} d\omega = \\ &= \int \sin z \frac{\nu}{z(\nu^2 + (z/t)^2)} dz = 1/\nu \int \sin z / z dz = \pi/\nu\end{aligned}$$

Интегрируя еще раз с граничным условием в нуле, получим

$$I(t) = \pi/\nu^2 e^{-\nu t} + \pi t/\nu - \pi/\nu^2 \quad (4.4.8)$$

Восстанавливая опущенный ранее фактор $\frac{2}{\beta\pi}$ и, для полного удовлетворения, массу броуновской частицы, находим

$$\overline{(\Delta x)^2} = \frac{2}{m\beta\nu} t - \frac{2}{m\beta\nu^2} (1 - \exp(-\nu t)). \quad (4.4.9)$$

В трехмерном случае $\overline{(\Delta x)^2} = \overline{(\Delta y)^2} = \overline{(\Delta z)^2} = \overline{(\Delta r)^2}/3$ и

$$\overline{(\Delta r)^2} = 6 \left(\frac{1}{m\beta\nu} t - \frac{1}{m\beta\nu^2} (1 - \exp(-\nu t)) \right). \quad (4.50)$$

На больших временах, как и следовало ожидать,

$$\overline{(\Delta r)^2} = Dt \quad (4.5)$$

где $D = 6t/\nu T$ - коэффициент диффузии. На малых временах

$$\overline{(\Delta r)^2} = \frac{6t^2}{m\beta} = \overline{v^2} t^2 \quad (4.52)$$

Этот результат тоже физически понятен, так как на малых временах имеет место баллистический пробег броуновской частицы с тепловой скоростью.

8.4.6 4.6. Bloch Equations and Electron Paramagnetic Resonance

Эффект ЭПР является одним из самых мощных инструментов исследования строения твердого тела. ЭПР и другие

кинетические явления в разреженных спиновых системах описываются уравнениями Блоха.

Рассмотрим немагнитное твердое тело с малой концентрацией парамагнитных примесей. Парамагнитная примесь - это атом с ненулевым магнитным моментом, который имеется у атома с ненулевым полным моментом электронных оболочек. Для простоты рассмотрим случай, когда полный момент атома есть электронный спин $S = 1/2$. Оператор магнитного момента такого атома описывается матрицами Паули:

$$\hat{\mu}^\alpha = \mu_B \hat{\sigma}^\alpha$$

где μ_B - магнетон Бора. В магнитном поле, направленном по оси Z , при нулевой температуре магнитные моменты всех примесей направлены по магнитному полю. Намагниченность тела - магнитный момент единицы объема - равен $M^z = N_{im}\mu_B$, где N_{im} - плотность парамагнитных примесей. Но при отличной от нуля температуре из-за тепловых флуктуаций часть магнитных моментов направлена против поля и

$$M^z = N_{im}\mu_B (\rho_{++} - \rho_{--}),$$

где ρ_{++} - вероятность направления момента по полю, а ρ_{--} -вероятность направления момента против поля. Одновременно, вообще говоря, становятся отличными от нуля и поперечные компоненты намагниченности. Чтобы такую ситуацию описать, следует обобщить понятие распределения вероятностей (ρ_{++}, ρ_{--}), введя двумерную эрмитову матрицу плотности

$$\rho = \begin{pmatrix} \rho_{++} & \rho_{+-} \\ \rho_{-+} & \rho_{--} \end{pmatrix}, \text{Sp} \rho = \rho_{++} + \rho_{--} = 1, \rho_{-+}^* = \rho_{+-} \quad (4.53)$$

используя которую поперечные компоненты намагниченности можно записать в форме

$$M^x = N_{im}\mu_B \text{Sp}(\rho \hat{\sigma}^x) = N_{im}\mu_B (\rho_{+-} + \rho_{-+}) = 2N_{im}\mu_B \text{Re} \rho_{+-} \quad (4.54)$$

$$M^y = N_{im}\mu_B \text{Sp}(\rho \hat{\sigma}^y) = N_{im}\mu_B (i\rho_{+-} - i\rho_{-+}) = -2N_{im}\mu_B \text{Im} \rho_{+-} \quad (4.55)$$

При описании статистических свойств системы магнитных примесей можно пренебречь их взаимодействием. Тогда, как в идеальном газе, каждый спин представляет из себя квазизамкнутую подсистему, и матрица плотности этой подсистемы удовлетворяет квантовому уравнению Лиувилля:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + i[H, \rho] = 0 \quad (4.56)$$

Термодинамически равновесная матрица плотности коммутирует с гамильтонианом и имеет вид распределения Гиббса:

$$\rho^{(0)} = \frac{\exp(-\beta \hat{H})}{\text{Sp} \exp(-\beta \hat{H})}$$

В частности, если система находится в однородном магнитном поле, направленном по оси Z , то

$$\begin{aligned} \hat{H} = -\mu_B B_0 \hat{\sigma}^z, \rho_{++}^{(0)} &= \frac{\exp(\beta \mu_B B_0)}{\exp(\beta \mu_B B_0) + \exp(-\beta \mu_B B_0)} = \\ &= \frac{1}{\exp(-2\beta \mu_B B_0) + 1} \end{aligned}$$

Это - распределение Ферми с нулевым химическим потенциалом.

Для описания кинетики системы магнитных моментов следует учесть необратимое взаимодействие спинов с колебаниями решетки, так называемую спин-решеточную релаксацию.

По аналогии с описанием кинетики электронов это взаимодействие вводится в правую часть уравнения (4.56), которое принимает вид уравнения Больцмана:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + i[H, \rho] = St\rho \quad (4.57)$$

Ограничимся общепринятым τ -приближением с двумя временами релаксации для продольной и поперечных компонент матрицы плотности:

$$\frac{\partial \rho_{++}}{\partial t} + i(H_{+-}\rho_{-+} - \rho_{+-}H_{-+}) = -\frac{1}{\tau_1}(\rho_{++} - \rho_{++}^{(0)}) \quad (4.58)$$

$$\frac{\partial \rho_{+-}}{\partial t} + i(H_{++} - H_{--})\rho_{+-} + iH_{+-}(\rho_{--} - \rho_{++}) = -\frac{1}{\tau_2}\rho_{+-} \quad (4.59)$$

Эти уравнения называются уравнениями Блоха. В силу нормировки и эрмитовости матрицы плотности уравнения для ρ_{--} и ρ_{-+} следуют из двух последних уравнений.

В качестве важнейшего применения уравнений Блоха рассмотрим задачу об электронном парамагнитном резонансе (ЭПР). Пусть большое постоянное магнитное поле B_0 направлено по оси Z , а слабое переменное поле B_1 - по оси X ($B_1 \ll B_0$):

$$H = -\mu_B B_0 \sigma^z - \mu_B B_1 \sigma^x \cos \omega t$$

В этой задаче уравнения (4.58), (4.59) имеют вид

$$\frac{\partial \rho_{++}}{\partial t} - (\omega_1 \cos \omega t) \text{Im} \rho_{+-} = -\frac{1}{\tau_1}(\rho_{++} - \rho_{++}^{(0)}) \quad (4.60)$$

$$\frac{\partial \rho_{+-}}{\partial t} - i\omega_0 \rho_{+-} + i\left(\frac{1}{2}\omega_1 \cos \omega t\right) \delta \rho = -\frac{1}{\tau_2}\rho_{+-} \quad (4.61)$$

где $\omega_{0,1} = 2\mu_B B_{0,1}$, $\delta \rho = (\rho_{++} - \rho_{--})$. Предполагается, что частота прецессии спина в постоянном магнитном поле достаточно велика:

$$\omega_0 \gg \frac{1}{\tau_1}, \frac{1}{\tau_2} \quad (4.62)$$

При $B_1 = 0$ уравнение (4.60) дает релаксацию к равновесию за время τ_1 , а (4.61) описывают прецессию с частотой ω_0 , которая затухает за время τ_2 .

При $B_1 \neq 0$ уравнения (4.60), (4.61) суть однородная система уравнений с осциллирующими коэффициентами. В классической механике подобные уравнения возникают при исследовании явления, которое называется параметрическим резонансом.

Рассмотрим важный случай малого переменного поля:

$$B_1 \ll B_0. \quad (4.63)$$

Как мы увидим ниже, в этом случае параметрический резонанс имеет место, когда частота переменного магнитного поля ω близка к частоте прецессии ω_0 . При условии (4.63) числа заполнения ρ_{++}, ρ_{--} , как это следует из (4.60), меняются на масштабе τ_1 , а поперечная компонента ρ_{+-} , согласно (4.61), заметно меняется за время $1/\omega_0$. Поэтому в уравнении (4.61) можно игнорировать зависимость функции $\delta \rho$ от времени и искать решение в виде

$$\rho_{+-} = ae^{i\omega t} + be^{-i\omega t} \quad (4.64)$$

Подставим (4.64) в (4.61):

$$\begin{aligned} \left(\frac{1}{\tau_2} - i\omega_0 + i\omega\right) ae^{i\omega t} + \left(\frac{1}{\tau_2} - i\omega_0 - i\omega\right) be^{-i\omega t} + \\ + i\omega_1 \delta \rho (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) = 0 \end{aligned}$$

и приравняем нулю суммарные коэффициенты при $e^{i\omega t}$ и $e^{-i\omega t}$:

$$a = -\frac{\omega_1 \delta \rho}{\omega - \omega_0 - i\frac{1}{\tau_2}}, \quad b = \frac{\omega_1 \delta \rho}{\omega + \omega_0 + i\frac{1}{\tau_2}}$$

При условии (4.62) один из этих коэффициентов велик, когда $\omega \simeq \pm\omega_0$. Для определенности будем считать, что $\omega \simeq \omega_0$, и будем пренебрегать коэффициентом b :

$$\rho_{+-} = -\frac{\omega_1 \delta \rho}{\omega - \omega_0 - i\frac{1}{\tau_2}} e^{i\omega t} \quad (4.65)$$

Это решение подставим в (4.60):

$$\frac{\partial \rho_{++}}{\partial t} + \omega_1^2 \delta \rho \cos \omega t \operatorname{Im} \left[\frac{e^{i\omega t}}{\omega - \omega_0 - i\frac{1}{\tau_2}} \right] = -\frac{1}{\tau_1} (\rho_{++} - \rho_{++}^{(0)}) \quad (4.66)$$

Из вида этого уравнения следует, что при временах, больших по сравнению с τ_1 , устанавливается почти стационарное заполнение верхнего и нижнего уровней с небольшими осцилляциями, амплитуда которых пропорциональна B_1^2 . Стационарное заполнение легко найти, усреднив уравнение (4.66) по периоду осцилляций. С учетом того, что

$$\left\langle \frac{\partial \rho_{++}}{\partial t} \right\rangle = 0, \quad \langle e^{i\omega t} \cos \omega t \rangle = \frac{1}{2}$$

получаем

$$\frac{1}{2} \omega_1^2 \delta \rho \operatorname{Im} \left[\frac{1}{\omega - \omega_0 - i\frac{1}{\tau_2}} \right] = -\frac{1}{\tau_1} (\rho_{++} - \rho_{++}^{(0)}) \quad (4.67)$$

Поскольку $\rho_{++} = \frac{1}{2}(1 + \delta\rho)$, $\rho_{++} - \rho_{++}^{(0)} = \frac{1}{2}(\delta\rho - \delta\rho^{(0)})$, то

$$\begin{aligned} \delta\rho - \delta\rho^{(0)} &= -\tau_1 \omega_1^2 \delta \rho \operatorname{Im} \left[\frac{1}{\omega - \omega_0 - i\frac{1}{\tau_2}} \right] = \\ &= -\frac{\tau_1}{\tau_2} \frac{\omega_1^2}{(\omega - \omega_0)^2 + \left(\frac{1}{\tau_2}\right)^2} \delta \rho \end{aligned}$$

и разность заполнения уровней имеет резонансную зависимость от частоты переменного поля:

$$\delta\rho = \delta\rho^{(0)} \frac{1}{1 + \frac{\tau_1}{\tau_2} \frac{\omega_1^2}{(\omega - \omega_0)^2 + \left(\frac{1}{\tau_2}\right)^2}} \quad (4.68)$$

В центре резонанса эффект максимален и имеет зависимость от амплитуды переменного поля вида:

$$\min \delta\rho = \delta\rho^{(0)} \frac{1}{1 + \tau_1 \tau_2 \omega_1^2}$$

увеличением B_1 наступает насыщение и заселенности уровней становятся равными друг другу:

$$\delta\rho \rightarrow 0$$

Экспериментально ЭПР характеризуется видом зависимости от ω интенсивности поглощения энергии переменного магнитного поля. Вычислим интенсивность

поглощения магнитной энергии как среднее по периоду осцилляций значение производной от энергии магнитного поля. Согласно электродинамике сплошных сред имеем

$$Q = \frac{1}{4\pi} \left\langle H \frac{\partial B}{\partial t} \right\rangle = \frac{1}{4\pi} \left\langle (B - 4\pi M) \frac{\partial B}{\partial t} \right\rangle = - \left\langle M_x \frac{\partial B_x}{\partial t} \right\rangle.$$

Подставим сюда (4.54) и (4.65):

$$\begin{aligned} Q &= \omega B_1 2\mu_B N_{im} \langle R e \rho_{+-} \sin \omega t \rangle = \\ &= -\omega \omega_1 N_{im} \operatorname{Re} \left[\frac{\omega_1 \delta \rho}{\omega - \omega_0 - i \frac{1}{\tau_2}} \right] \langle e^{i\omega t} \sin \omega t \rangle = \\ &= \frac{1}{2} \omega \omega_1^2 N_{im} \delta \rho \frac{\frac{1}{\tau_2}}{(\omega - \omega_0)^2 + \left(\frac{1}{\tau_2}\right)^2} \end{aligned}$$

Теперь остается подставить сюда (4.68):

$$Q = \frac{1}{2\tau_2} N_{im} \delta \rho^{(0)} \frac{\omega \omega_1^2}{(\omega - \omega_0)^2 + \left(\frac{1}{\tau_2}\right)^2 + \frac{\tau_1}{\tau_2} \omega_1^2}$$

Итак, поглощение энергии переменного магнитного поля имеет вид узкого резонанса, высота и ширина которого растут с ростом B_1^2 . Насыщение в центре резонанса наступает, когда

$$\omega_1 \gg 1/\sqrt{\tau_1 \tau_2}$$

8.5 Kinetic Phenomena in Plasma by Maksimov

8.5.1 5.1. The Vlasov Equation

Рассмотрим полностью ионизованную плазму (отсутствуют нейтральные частицы). Считаем, что ионы неподвижны и создают однородный положительно заряженный фон. Такая модель называется моделью желе. Тогда суммарная плотность зарядов запишется в следующем виде:

$$\rho = \rho_e + \rho_i, \rho_i = \text{const}, \quad (5.1)$$

где ρ_e, ρ_i - плотности электронов и ионов. В силу электронейтральности

$$\rho_i = -\frac{1}{V} \int \rho_e dV \quad (5.2)$$

Функция распределения электронов $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ полностью определяет состояние плазмы. Например,

$$\rho(\mathbf{r}, t) = e \int d^3 \mathbf{v} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) + \rho_i \quad (5.3)$$

Функция распределения подчиняется кинетическому уравнению

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \nabla f + \dot{\mathbf{v}} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} = -I_{st}, \quad (5.4)$$

где I_{st} - интеграл столкновений. В силу дальнегодействующего характера кулоновского взаимодействия в полностью ионизованной плазме функция распределения меняется не

только за счет столкновений, но и за счет движения в самосогласованном электрическом поле. В отличие от нейтрального газа, член $\dot{\mathbf{v}} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}}$ в плазме может быть существенным даже в отсутствие внешнего поля.

Пусть $\mathbf{E}$ - самосогласованное электрическое поле. Тогда

$$\dot{\mathbf{v}} = \frac{e}{m} \mathbf{E}, \text{rot } \mathbf{E} = 0, \text{div } \mathbf{E} = 4\pi\rho, \quad (5.5)$$

где e - заряд электрона. Полная система уравнений, описывающая плазму, имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \nabla f + \frac{e}{m} \mathbf{E} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} &= -I_{st} \\ \text{div } \mathbf{E} &= 4\pi \left(\rho_i + e \int d^3\mathbf{v} f + \rho_{ext} \right) \\ \text{rot } \mathbf{E} &= 0 \end{aligned} \quad (5.6)$$

и называется системой уравнений Власова.

8.5.2 5.2. The Equilibrium Solution of the Vlasov Equation

Стационарное равновесное распределение обращает в нуль интеграл столкновений. Поэтому

$$\begin{aligned} \mathbf{v} \nabla f + \frac{e}{m} \mathbf{E} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} &= 0 \\ \text{div } \mathbf{E} &= 4\pi \left(\rho_i + e \int d^3\mathbf{v} f + \rho_{ext} \right) \\ \text{rot } \mathbf{E} &= 0 \end{aligned} \quad (5.7)$$

При высоких температурах равновесное распределение есть распределение Больцмана:

$$f = \text{const} \cdot e^{-\frac{1}{T} \left(\frac{mv^2}{2} + e\varphi(\mathbf{r}) \right)} \quad (5.8)$$

где φ - потенциал электрического поля, $\mathbf{E} = -\nabla\varphi$. Как и следует ожидать, в этом случае

$$\mathbf{v} \nabla f = f \mathbf{v} \nabla \ln f = \frac{e}{T} \mathbf{v} \mathbf{E} f \quad (5.9)$$

$$\frac{e}{m} \mathbf{E} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} = -\frac{e}{T} \mathbf{v} \mathbf{E} f. \quad (5.10)$$

Уравнение Пуассона имеет вид

$$\Delta\varphi = -4\pi (\rho_i + \rho_e + \rho_{ext})$$

Мы рассматриваем случай высоких температур, когда $\varphi(\mathbf{r}) < T$. В силу электронейтральности $\rho_i + \rho_e^0 = 0$. Тогда, разлагая экспоненту в (5.8) по малому параметру $e\varphi/T$, получим

$$f = \text{const} e^{-\frac{1}{T} \left(\frac{mv^2}{2} + e\varphi(\mathbf{r}) \right)} = f_0 \left(1 - \frac{e\varphi}{T} \right), f_0 = \text{const} e^{-\frac{1}{T} \frac{mv^2}{2}}. \quad (5.11)$$

Тогда

$$\Delta\varphi - 4\pi e^2 n^0 \varphi / T = -4\pi \rho_{ext} \quad (5.12)$$

$$n_0 = \int f_0 d^3\mathbf{v}$$

где мы ввели в систему уравнений плотность сторонних зарядов ρ_{ext} . Решение этого уравнения может быть записано в виде

$$\varphi(r) = \int d^3\mathbf{r}' \rho_{ext}(\mathbf{r}') \frac{e^{-\frac{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}{r_D}}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \quad (5.13)$$

где введено обозначение $r_D = \left(\frac{T}{4\pi e^2 n^0}\right)^{1/2}$ для дебаевского радиуса. Мы видим, что вклад в потенциал в точке $\mathbf{r}$ дают только сторонние заряды, расположенные внутри сферы радиуса r_D . Неоднородная плотность вблизи заряда следует из (5.11):

$$n^1 = -\frac{e}{T} n^0 \varphi \Big|_{r \sim r_D}$$

и называется распределением Дебая-Хюккеля.

Сторонний заряд можно и не вводить, тогда n^1 интерпретируется как корреляционная функция, определяющая неоднородную функцию распределения зарядов, вблизи некоторого выделенного заряда в плазме. Средняя плотность зарядов в

плазме, конечно же, равна нулю. Существование неоднородного распределения на масштабах, меньших дебаевского радиуса, не противоречит условию электронейтральности, а является следствием последнего: вблизи заряда e существует неоднородно заряженное облако радиуса r_D с суммарным зарядом $-e$.

Дебаевский радиус является равновесным параметром плазмы. Однако его значение позволяет судить о некоторых характеристиках неравновесной плазмы. Если расстояние между электронами $r_1 \sim n^{-1/3} \ll r_D$, то экранировка слабая и имеет место взаимодействие большого числа зарядов внутри сферы радиуса r_D . Движение частиц носит коллективный характер (электроны движутся в самосогласованном электростатическом поле) и интегралом столкновений можно пренебречь. Уравнение Власова в этом случае имеет вид

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \nabla f \mathbf{v} + \frac{e}{m} \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} f \mathbf{E} = 0 \quad (5.14)$$

В другом предельном случае $r_D \ll r_1 \sim n^{-1/3}$ полевым членом вследствие экранировки можно пренебречь, и в этом случае плотной плазмы поведение электронного газа близко к идеальному. Критерий разреженной плазмы

$$n^{-1/3} \ll \left(\frac{T}{4\pi e^2 n}\right)^{1/2} \rightarrow T > 4\pi e^2 n^{1/3}. \quad (5.15)$$

Случай плотной плазмы

$$T < 4\pi e^2 n^{1/3} \quad (5.16)$$

реализуется в металле.

Обратим внимание, что в первом случае разреженной плазмы средняя кинетическая энергия, приходящаяся на один электрон, порядка T , а потенциальная - $\frac{e^2}{r_1} \ll T$. Во втором случае потенциальная энергия играет основную роль. В этом случае приближение (5.11) неприменимо.

Случай плотной плазмы (вырожденный ферми-газ) рассмотрен выше в разделе, посвященном кинетической теории металлов. Ниже мы рассмотрим случай разреженной плазмы, когда электронный газ невырожден и подчиняется статистике Больцмана.

8.5.3 5.3. Solution of the Linearized Vlasov Equation

Система уравнений Власова имеет вид

$$\begin{aligned}\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \nabla f + \frac{e}{m} \mathbf{E} \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} f &= 0, \\ \operatorname{div} \mathbf{E} &= 4\pi \left(\rho_i + e \int d^3 \mathbf{v} f + \rho_{ext} \right), \\ \operatorname{rot} \mathbf{E} &= 0.\end{aligned}$$

Ищем решение в виде $f = f_0 + f_1$, $|f_1| \ll f_0$; f_0 - распределение Максвелла. Поскольку система в целом электронейтральна, то

$$\rho_i + e \int d^3 \mathbf{v} f_0 = 0$$

Линеаризуем эту систему уравнений:

$$\operatorname{div} \mathbf{E} = 4\pi \left(e \int d^3 \mathbf{v} f_1 + \rho_{ext} \right) = 4\pi (\rho^1 + \rho_{ext})$$

Самосогласованное поле $\mathbf{E}$ является величиной первого порядка малости. Полевой член $\frac{e}{m} \mathbf{E} \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} f$ нелинеен по f_1 . Поэтому в линейном приближении полевой член запишется

$$\frac{e}{m} \mathbf{E} \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} f \approx \frac{e}{m} \mathbf{E} \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} f_0 = -\frac{e}{T} \mathbf{v} \mathbf{E} f_0.$$

Итак,

$$\begin{aligned}\frac{\partial f_1}{\partial t} + \mathbf{v} \nabla f_1 - \frac{e}{T} \mathbf{v} \mathbf{E} f_0 &= -\frac{1}{\tau} f_1, \\ \operatorname{div} \mathbf{E} &= 4\pi (\rho^1 + \rho_{ext}) \\ \rho^1 &= 4\pi e \int d^3 \mathbf{v} f_1 \\ \operatorname{rot} \mathbf{E} &= 0\end{aligned}$$

Хотя здесь исследуются свойства бесстолкновительной плазмы, мы добавили столкновительный член в τ -приближении. Этот прием позволяет качественно учесть роль парных столкновений и, кроме того, в дальнейшем избежать проблему обхода полюсов (см. ниже).

Разложим члены первого порядка по плоским волнам

$$f = \int d^3 \mathbf{k} f_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}, \quad \mathbf{E} = \int d^3 \mathbf{k} \mathbf{E}_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$$

Подставляя эти разложения в систему уравнений Власова, получим

$$\begin{aligned}\frac{\partial f_{\mathbf{k}}}{\partial t} + i\mathbf{k}\mathbf{v} f_{\mathbf{k}} - \frac{e}{T} \mathbf{v} \mathbf{E}_{\mathbf{k}} f_0 + \frac{1}{\tau} f_{\mathbf{k}} &= 0 \\ i\mathbf{k} \mathbf{E}_{\mathbf{k}} &= 4\pi (\rho_{\mathbf{k}}^1 + \rho_{\mathbf{k}}^{ext}) \\ \mathbf{k} \times \mathbf{E}_{\mathbf{k}} &= 0\end{aligned} \tag{5.17}$$

Из последнего уравнения следует продольность самосогласованного поля. Тогда из второго уравнения имеем

$$\mathbf{E}_{\mathbf{k}} = \frac{4\pi\mathbf{k}}{ik^2} (\rho_{\mathbf{k}}^1 + \rho_{\mathbf{k}}^{ext}).$$

После этого уравнение Власова перепишется

$$\frac{\partial f_{\mathbf{k}}}{\partial t} + i\mathbf{k}\mathbf{v}f_{\mathbf{k}} + \frac{1}{\tau}f_{\mathbf{k}} = \frac{4\pi ef_0}{ik^2T}\mathbf{k}\mathbf{v} (\rho_{\mathbf{k}}^1 + \rho_{\mathbf{k}}^{ext}). \quad (5.18)$$

Выполним преобразование Лапласа по времени, используя соотношения

$$\tilde{f}(p) = \int_0^\infty dt e^{-pt} f(t), \quad \frac{\partial f}{\partial t} \rightarrow p\tilde{f} - f(0) \quad (5.19)$$

В новых переменных

$$\left(p + \frac{1}{\tau} + i\mathbf{k}\mathbf{v}\right) \tilde{f}_{\mathbf{k}} = \frac{4\pi ef_0}{ik^2T}\mathbf{k}\mathbf{v} (\tilde{\rho}_{\mathbf{k}} + \tilde{\rho}_{\mathbf{k}}^{ext}) + \tilde{f}_{\mathbf{k}}(0)$$

Откуда

$$\tilde{f}_{\mathbf{k}} = \frac{4\pi ef_0}{ik^2T}\mathbf{k}\mathbf{v} \frac{(\tilde{\rho}_{\mathbf{k}} + \tilde{\rho}_{\mathbf{k}}^{ext})}{(p + \frac{1}{\tau} + i\mathbf{k}\mathbf{v})} + \frac{\tilde{f}_{\mathbf{k}}(0)}{(p + \frac{1}{\tau} + i\mathbf{k}\mathbf{v})} \quad (5.20)$$

Поскольку $e \int \tilde{f}_{\mathbf{k}} d^3\mathbf{v} = \tilde{\rho}_{\mathbf{k}}$, то, интегрируя уравнение (5.20) по скоростям, получим

$$\tilde{\rho} = \frac{4\pi e^2}{ik^2T} (\tilde{\rho} + \tilde{\rho}^{ext}) \int \frac{f_0 \mathbf{k}\mathbf{v} d^3\mathbf{v}}{(p + \frac{1}{\tau} + i\mathbf{k}\mathbf{v})} + \int \frac{e f_{\mathbf{k}}(0) d^3\mathbf{v}}{(p + \frac{1}{\tau} + i\mathbf{k}\mathbf{v})}$$

Введем обозначения

$$\begin{aligned} 1 - \varepsilon &= \frac{4\pi e^2}{ik^2T} \int \frac{f_0 \mathbf{k}\mathbf{v} d^3\mathbf{v}}{(p + \frac{1}{\tau} + i\mathbf{k}\mathbf{v})} = \\ &= i \frac{4\pi e^2}{mk^2} \int \frac{\mathbf{k} \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{v}} d^3\mathbf{v}}{(p + \frac{1}{\tau} + i\mathbf{k}\mathbf{v})} \\ J &= \int \frac{e f_{\mathbf{k}}(0) d^3\mathbf{v}}{(p + \frac{1}{\tau} + i\mathbf{k}\mathbf{v})} \end{aligned} \quad (5.21)$$

Тогда

$$\tilde{\rho} = (1 - \varepsilon) (\tilde{\rho} + \tilde{\rho}^{ext}) + J$$

или

$$\tilde{\rho} = \frac{1}{\varepsilon} (1 - \varepsilon) \tilde{\rho}^{ext} + J$$

Выясним физический смысл константы ε .

Пусть в начальный момент плазма не возмущена, то есть $f_{\mathbf{k}}(0) = 0$, и, следовательно, $J = 0$. Тогда

$$\tilde{\rho} = \frac{1}{\varepsilon} (1 - \varepsilon) \tilde{\rho}^{ext}$$

Подставим это в уравнение $i\mathbf{k}\tilde{\mathbf{E}} = 4\pi (\tilde{\rho} + \tilde{\rho}^{ext})$:

$$i\varepsilon \mathbf{k} \tilde{\mathbf{E}} = 4\pi \tilde{\rho}^{ext}. \quad (5.22)$$

Уравнение Максвелла в среде имеет вид

$$\operatorname{div} \mathbf{D} = 4\pi \rho^{ext}.$$

После преобразования Фурье-Лапласа оно приобретет вид

$$i\mathbf{k} \tilde{\mathbf{D}} = 4\pi \tilde{\rho}^{ext}. \quad (5.23)$$

Сравнивая (5.22) и (5.23), убеждаемся, что ε - диэлектрическая проницаемость плазмы.

8.5.4 5.4. Plasma Oscillations

(??? собственные - часть названия была, я не знаю, как это перевести)

Выше мы нашли амплитуду колебаний электронной компоненты плазмы:

$$\tilde{\rho} = \frac{1}{\varepsilon} [(1 - \varepsilon)\tilde{\rho}^{ext} + J]. \quad (5.24)$$

В обратном преобразовании Лапласа

$$\rho^1(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\sigma-i\infty}^{\sigma+i\infty} dp e^{pt} \tilde{\rho}(p), \sigma > 0 \quad (5.25)$$

интегрирование идет по мнимой оси. Пусть все особенности $\tilde{\rho}(p)$ лежат слева от мнимой оси, по которой идет интегрирование, и представляют собой простые полюса в точках $p_s = -i\omega_s - \gamma_s$. Тогда, замыкая контур интегрирования в (5.25) в левой полуплоскости, получим

$$\rho^1(t) = \sum_s e^{p_s t} R_s, \quad R_s = \frac{1}{2\pi i} \oint dp e^{(p-p_s)t} \tilde{\rho}(p) \quad (5.26)$$

Здесь мы учли, что интеграл по левой полуокружности обращается в нуль, так как подынтегральная функция экспоненциально убывает при $\operatorname{Re} p < 0$.

Колебания, связанные с полюсами $\tilde{\rho}^{ext}$, очевидно, определяют вынужденные колебания плазмы.

Второй тип колебаний связан с полюсами интеграла J , определяемыми видом начального возмущения:

$$J = \int \frac{e f_{\mathbf{k}}(0) d^3 \mathbf{v}}{(p + \frac{1}{\tau} + i\mathbf{k}\mathbf{v})} \quad (5.27)$$

Покажем, что полюса этого интеграла описывают "рассасывание" начальной неоднородности функции распределения. Выберем начальное возмущение в виде

$$f_{\mathbf{k}}(0) = a_{\mathbf{k}} \delta(\mathbf{v} - \mathbf{v}_0)$$

Тогда

$$J = \frac{e a_{\mathbf{k}}}{p + \frac{1}{\tau} + i\mathbf{k}\mathbf{v}_0}$$

Так как

$$\tilde{\rho}(p) = \frac{J}{\varepsilon}$$

то (см. (5.25)):

$$\rho_k(t) = \frac{1}{2\pi i} \oint dp e^{pt} \frac{ea_k}{\varepsilon \left(p + \frac{1}{\tau} + i\mathbf{k}\mathbf{v}_0\right)} = \frac{ea_k}{\varepsilon} e^{-\left(\frac{1}{\tau} + i\mathbf{k}\mathbf{v}_0\right)t}$$

В координатном представлении

$$\begin{aligned} \rho^1(\mathbf{r}, t) &= e^{-\frac{t}{\tau}} \int d^3\mathbf{k} \frac{ea_k}{\varepsilon} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{v}_0 t} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} = \\ &= e^{-\frac{t}{\tau}} \int d^3\mathbf{k} \frac{ea_k}{\varepsilon} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r} - \mathbf{v}_0 t)} = e^{-\frac{t}{\tau}} \rho(\mathbf{r} - \mathbf{v}t). \end{aligned}$$

Начальное возмущение перемещается и рассасывается. Если время релаксации $\tau = \infty$, то происходит только смещение плотности, что соответствует теореме Лиувилля.

Третий тип колебаний связан с нулями диэлектрической проницаемости, полюсами $\varepsilon^{-1}(p, \mathbf{k})$. Положение этих особенностей определяется уравнением

$$1 = i \frac{4\pi e^2}{mk^2} \int \frac{\mathbf{k} \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{v}} d^3\mathbf{v}}{\left(p + \frac{1}{\tau} + i\mathbf{k}\mathbf{v}\right)} = \frac{4\pi e^2}{iT k^2} \int \frac{f_0 \mathbf{k}\mathbf{v} d^3\mathbf{v}}{\left(p + \frac{1}{\tau} + i\mathbf{k}\mathbf{v}\right)}$$

Это уравнение определяет закон дисперсии свободных колебаний плазмы. В длинноволновом пределе ($\mathbf{k}\mathbf{v}\tau \ll 1$)

$$\begin{aligned} \frac{4\pi e^2}{iT k^2} \int d^3\mathbf{v} \frac{f_0}{\left(p + \frac{1}{\tau}\right)} \mathbf{k}\mathbf{v} \left(1 - \frac{i\mathbf{k}\mathbf{v}}{p + \frac{1}{\tau}}\right) &= \\ = - \frac{4\pi e^2}{T \left(p + \frac{1}{\tau}\right)^2} \int v^2 f_0 &= \frac{4\pi n_0 e^2}{m \left(p + \frac{1}{\tau}\right)^2} = -1, \end{aligned}$$

$$p = -\frac{1}{\tau} \pm i \left(\frac{4\pi n_0 e^2}{m}\right)^{1/2} - \text{собственная частота } \omega_p = \left(\frac{4\pi n_0 e^2}{m}\right)^{1/2}, \text{ затухание } \gamma_p = -\frac{1}{\tau}.$$

8.5.5 5.5. The Physical Meaning of the Plasma's Own Oscillations

Выясним физический смысл собственных колебаний плазмы. Сторонние заряды формируют вектор электрической индукции:

$$\operatorname{div} \mathbf{D} = 4\pi \rho^{ext}$$

На электроны в плазме действует поле

$$\mathbf{E} = \mathbf{D} - 4\pi \mathbf{P}.$$

Для колебаний с бесконечной длиной волны все электроны движутся с одной фазой. Поэтому полный дипольный момент равен $\mathbf{p} = \sum_i e \mathbf{r}_i = en_0 \mathbf{r}$; $\mathbf{r}$ - отклонение любого электрона от

положения равновесия

$$\begin{aligned} m\ddot{\mathbf{r}} &= e\mathbf{E}, \\ \ddot{\mathbf{r}} &= \frac{e\mathbf{D}}{m} - \frac{4\pi e^2 n_0}{m} \mathbf{r}. \end{aligned}$$

Пусть $\mathbf{D} = \mathbf{D}_0 e^{i\omega t}$. Тогда

$$\mathbf{r} = \frac{1}{\omega_p^2 - \omega^2} \frac{e}{m} \mathbf{D}$$

Отметим резонансный характер этих колебаний. В курсах теории плазмы доказывается, что

$$\frac{1}{\tau} = \omega_p \left(\frac{r_1}{r_D} \right)^3$$

В разреженной плазме $\frac{r_1}{r_D} \ll 1$. Поэтому плазменные колебания затухают слабо.

8.5.6 5.6. Landau Attenuation

Выше были найдены собственные колебания плазмы в пределе $k \rightarrow 0$. Найдем собственные колебания плазмы для конечных, хотя и малых значений волнового вектора. Диэлектрическую постоянную плазмы

$$\varepsilon(p) = 1 - \frac{4\pi e^2}{ik^2 T} \int \frac{f_0 \mathbf{k} \mathbf{v} d^3 \mathbf{v}}{\left(p + \frac{1}{\tau} + i \mathbf{k} \mathbf{v}\right)} \quad (5.28)$$

нельзя вычислить точно. Этот интеграл, однако, можно приближенно взять при $kv_T \ll \omega_{res}$.

$$\begin{aligned} \varepsilon(p) &= 1 - \frac{4\pi e^2}{ik^2 T} n_0 \left(\frac{m}{2\pi T} \right)^{1/2} \int \frac{dv_z k v_z e^{-\frac{mv_z^2}{2T}}}{\left(p + \frac{1}{\tau} + i k v_z\right)} \\ z &= v_z / v_T = v_z / \sqrt{T/m} \\ 1 - \frac{4\pi e^2}{ik^2 T} n_0 \left(\frac{m}{2\pi T} \right)^{1/2} k v_T^2 \int \frac{z dz e^{-\frac{z^2}{2}}}{\left(p + \frac{1}{\tau} + i k v_z\right)} &= \\ &= 1 + \frac{4\pi e^2}{k^2 T} n_0 \left(\frac{1}{2\pi} \right)^{1/2} \int \frac{z dz e^{-\frac{z^2}{2}}}{z - z_0} = \\ &= 1 + \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(\frac{\omega_p}{k v_T} \right)^2 \int \frac{z dz e^{-\frac{z^2}{2}}}{z - z_0} \\ z_0 &= i \frac{p + \frac{1}{\tau}}{k v_T} \end{aligned} \quad (5.29)$$

В преобразовании Лапласа $\text{Re } p > 0 \rightarrow \text{Im } z_0 > 0$. Нас интересует $p = -i\omega_p$. Тогда

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \frac{z dz e^{-\frac{z^2}{2}}}{z - z_0} &= \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} v.p. \int_{-\infty}^{\infty} \frac{z dz e^{-\frac{z^2}{2}}}{z - z_0} + \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \frac{z dz e^{-\frac{z^2}{2}}}{z - z_0} \end{aligned} \quad (5.30)$$

Второй интеграл берется по маленькой полуокружности около z_0 .

При малых значениях волнового вектора $|z_0| \gg 1$. Тогда

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} v.p. \int_{-\infty}^{\infty} \frac{z dz e^{-\frac{z^2}{2}}}{z - z_0} &= \\ &= -\frac{1}{\sqrt{2\pi}} v.p. \int_{-\infty}^{\infty} dz e^{-\frac{z^2}{2}} \frac{z}{z_0} \left(1 + \frac{z}{z_0} + \left(\frac{z}{z_0} \right)^2 \dots \right) = \\ &= -\left(\frac{1}{z_0^2} + \frac{3}{z_0^4} \right) \end{aligned}$$

Интеграл по полуокружности равен половине вычета

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \frac{z dz e^{-\frac{z^2}{2}}}{z - z_0} = \frac{i\pi}{\sqrt{2\pi}} z_0 e^{-\frac{z_0^2}{2}}$$

Итак,

$$\begin{aligned} \varepsilon(p) &= 1 + \left(\frac{\omega_p}{kv_T} \right)^2 \left(-\frac{1}{z_0^2} - \frac{3}{z_0^4} + \frac{i\pi}{\sqrt{2\pi}} z_0 e^{-\frac{z_0^2}{2}} \right) = 0, \\ z_0^2 &= \left(\frac{\omega_p}{kv_T} \right)^2 \left(1 + \frac{3}{z_0^2} - \frac{i\pi}{\sqrt{2\pi}} z_0^3 e^{-\frac{z_0^2}{2}} \right). \end{aligned} \quad (5.31)$$

В первом приближении отбросим в скобке все члены, кроме первого. Тогда

$$z_0 = \frac{\omega_p}{kv_T}. \quad (5.3)$$

Это решение, как и само выражение (5.31), имеет смысл при $|z_0| \gg 1$, то есть при $k \ll \omega_p/v_T$. Поправку к (5.32) можно получить, если в правую часть (5.31) подставить решение первого приближения:

$$z_0^2 = \left(\frac{\omega_p}{kv_T} \right)^2 \left(1 + 3 \left(\frac{kv_T}{\omega_p} \right)^2 - \frac{i\pi}{\sqrt{2\pi}} \left(\frac{\omega_p}{kv_T} \right)^3 e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{\omega_p}{kv_T} \right)^2} \right)$$

Согласно определению собственной частоты ω и затухания γ , $p = -i\omega - \gamma$. Поэтому

$$z_0^2 = \left(i \frac{-i\omega - \gamma + \frac{1}{\tau}}{kv_T} \right)^2 = \frac{\omega^2 - (\gamma - \frac{1}{\tau})^2}{(kv_T)^2} - 2i \frac{\omega (\gamma - \frac{1}{\tau})}{(kv_T)^2}$$

Подставляя это выражение в предыдущее, получим

$$\begin{aligned} \frac{\omega^2 - (\gamma - \frac{1}{\tau})^2}{(kv_T)^2} &= \left(\frac{\omega_p}{kv_T} \right)^2 \left[1 + 3 \left(\frac{kv_T}{\omega_p} \right)^2 \right] \\ -2 \frac{\omega (\gamma - \frac{1}{\tau})}{(kv_T)^2} &= -\frac{\pi}{\sqrt{2\pi}} \left(\frac{\omega_p}{kv_T} \right)^3 e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{\omega_p}{kv_T} \right)^2} \end{aligned}$$

Отсюда, в рамках используемого приближения ($kv_T \ll \omega_p$), находим

$$\omega = \omega_p \left[1 + 3 \left(\frac{kv_T}{\omega_p} \right)^2 \right]; \quad (5.33)$$

$$\gamma = \frac{1}{\tau} + \frac{\pi\omega_p}{2\sqrt{2\pi}} \left(\frac{\omega_p}{kv_T} \right)^3 e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{\omega_p}{kv_T} \right)^2}. \quad (5.34)$$

Здесь выражение (5.33) определяет закон дисперсии, то есть зависимость частоты от длины волны. В частности, групповая скорость продольных колебаний плазмы равна

$$v_{gr} = \frac{\partial \omega}{\partial k} = 3 \left(\frac{kv_T}{\omega_p} \right)^2 v_T$$

В нашем приближении ($\frac{kv_T}{\omega_p} \ll 1$) групповая скорость значительно меньше тепловой скорости электронов.

Выражение (5.34) определяет затухание плазменных колебаний. Первый член $1/\tau$, как мы уже говорили, обусловлен парными столкновениями электронов с ионами. Второй член, обусловленный коллективным взаимодействием электронов, впервые получил Ландау.

Формулы (5.33) и (5.34) выведены в предположении, что параметр $\frac{kv_T}{\omega_p}$ мал. Физический смысл этого предположения, становится прозрачнее, если выразить этот параметр через радиус экранирования $r_D = (T/4\pi n_0 e^2)^{1/2}$:

$$\frac{\omega}{kv_T} = \frac{1}{kr_D} = \frac{l}{r_D}$$

($l = k^{-1}$ - длина волны колебания).

Результат совершенно естественный: радиус экранирования характеризует коллективные свойства плазмы. Поэтому ясно, что именно отношение длины волны к радиусу экранирования

характеризует дисперсию и затухание собственных колебаний плазмы. Формулы (5.33) и (5.34) справедливы, когда длина волны велика по сравнению с радиусом экранирования.

В этом пределе, как показывают формулы (5.33) и (5.34), дисперсия и затухание малы, причем часть затухания, обусловленная коллективными свойствами плазмы, имеет экспоненциальную малость. Если $l \approx r_D$, формулы (5.33) и (5.34) не работают, но использовать их в качестве оценки можно. Видно, что при $l \approx r_D$ затухание и частота одного порядка величины и, следовательно, собственные колебания плазмы теряют резонансный характер (о резонансе можно говорить пока добротность $\omega/\gamma \gg 1$).

Остановимся подробнее на природе затухания в бесстолкновительной плазме (когда $\tau^{-1} = 0$).

Рассмотрим движение электрона в поле, возникающем при возбуждении собственных колебаний плазмы. Для простоты будем считать, что возбуждена плоская монохроматическая волна, бегущая в направлении оси z . В этом случае направления скорости электрона и электрического поля совпадают, и мы имеем одномерное уравнение движения:

$$m\dot{v} = eEe^{-i(\omega t - kz)}$$

Если плазменное колебание слабое, то поле E мало меняет движение электрона, и в нулевом приближении $v = v_0$, а $z = v_0 t$. В следующем приближении поле учитывается, но только в фазе поля. Вместо z подставляется $v_0 t$:

$$m\dot{v} = eEe^{-i(\omega - kv_0)t}$$

Интегрируя это уравнение, получим

$$v = v_0 + \frac{eE}{m} \int_0^t e^{-i(\omega - kv_0)t} dt$$

Если выражение $\omega - kv_0$ отлично от нуля, то подынтегральное выражение осциллирует, и скорость электрона в среднем не

меняется. Если же $\omega - kv_0 = 0$, то

$$v = v_0 + \frac{eE}{m} t$$

Эта резонансная ситуация связана с тем, что электрон, имеющий скорость, равную фазовой скорости волны, в течение долгого времени находится в поле одного знака, что и приводит к монотонному изменению скорости. Чтобы ускорить или затормозить электрон,

нужна энергия. Эта энергия берется из энергии колебаний плазмы и, следовательно, приводит к затуханию плазмы.

Из описанной картины следует, что затухание плазмы должно быть пропорционально числу электронов, имеющих резонансную скорость $v_p = \omega_p/k$. Поскольку это число задается распределением Максвелла, то

$$\gamma \sim e^{-\frac{mv_p^2}{2T}} = e^{-\frac{m\omega_p^2}{2k^2T}} = e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{\omega_p}{kv_T}\right)^2},$$

что в точности совпадает с предыдущими вычислениями.

В промежуточных вычислениях на резонансный характер затухания указывало обращение в бесконечность подынтегрального выражения, когда скорость электрона принимала резонансное значение (см. начало данного раздела).

Собственная частота и затухание связаны с параметром Лапласа соотношением $p = -i\omega - \gamma$, где

$$z_0 = i\frac{p + \frac{1}{\tau}}{kv_T} = \frac{\omega + i/\tau - i\gamma}{kv_T}$$

$$z_0^2 = \frac{\omega^2 - \left(\gamma - \frac{1}{\tau}\right)^2}{(kv_T)^2} - 2i\frac{\omega\left(\gamma - \frac{1}{\tau}\right)}{(kv_T)^2}$$

8.5.7 5.7. The Condition of Applicability of the Linearized Vlasov Equation

Рассмотрим вопрос об области применимости линеаризованного уравнения Власова. Оценим сначала роль парных столкновений. Релаксацией электронов за счет парных столкновений можно пренебречь, если

$$\frac{1}{\tau} \ll \omega_p \left(\frac{l}{r_D}\right)^3 e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{l}{r_D}\right)^2}$$

Но

$$\frac{1}{\tau} \sim \omega_p (r_1/r_D)^3$$

Поэтому парные столкновения несущественны, только если

$$3 \ln \frac{r_1}{r_D} \ll 3 \ln \frac{l}{r_D} - \frac{1}{2} \left(\frac{l}{r_D}\right)^2$$

или

$$\left(\frac{l}{r_D}\right)^2 \ll 6 \ln \frac{l}{r_1}.$$

Это накладывает весьма жесткое ограничение на l . Тем не менее уравнение Власова (с $1/\tau = 0$) можно с успехом применять для больших значений размера неоднородности, если не заниматься специально вопросами релаксации, которая, благодаря малости $1/\tau$, происходит очень медленно.

Наконец, рассмотрим условия, накладываемые на возмущения в плазме, необходимые для возможности использования линейного приближения в уравнении Власова. При подстановке $f = f^0 + f^1$ в уравнение Власова получается

$$\frac{\partial f^1}{\partial t} + (\mathbf{v} \nabla) f^1 - \frac{e}{T} (\mathbf{v} \mathbf{E}) f^0 + \frac{e \mathbf{E}}{m} \frac{\partial f^1}{\partial \mathbf{v}} = 0$$

Линейное приближение имеет смысл, если нелинейный член в этом уравнении меньше любого из линейных. Нелинейный член имеет порядок величины $\left| \frac{eE}{mv_T} f^1 \right|$, первый линейный — $|\omega_p f^1|$. Линейное приближение работает, когда

$$\frac{eE}{mv_T} \ll \omega_p.$$

Из уравнения $\operatorname{div} \mathbf{E} = 4\pi\rho^1$ следует, что электрическое поле имеет порядок величины $4\pi n_0 l (n_1/n_0)$, где n_1 — амплитуда колебаний плотности электронов. В результате неравенство принимает вид

$$\frac{l}{r_D} \frac{n_1}{n_0} \ll 1.$$

Поскольку о плазменных волнах имеет смысл говорить только при $l \gg r_D$, то последнее неравенство показывает, что линейное приближение применимо лишь при достаточно малых амплитудах колебаний плазмы.

Таким образом, область применимости линеаризованного уравнения Власова весьма ограничена. Однако оно выгодно отличается от более точных уравнений своей простотой. В то же время линеаризованное уравнение Власова достаточно наглядно описывает главное свойство плазмы — коллективный характер взаимодействия заряженных частиц, что позволяет использовать это уравнение во всех случаях, когда необходимо понять особенности поведения плазмы. Нужно лишь помнить, что это уравнение не претендует на описание явлений при возмущениях с большой амплитудой (когда становятся существенными нелинейные эффекты) и ничего не говорит (при $1/\tau = 0$) о поведении плазмы при очень больших масштабах времени, сравнимых со временем столкновительной релаксации плазмы.

8.5.8 5.8. Beam Instability in Plasma

Интенсивные исследования плазмы в первую очередь связаны с надеждами получить с ее помощью управляемую термоядерную реакцию. Термоядерная реакция может возникнуть в

плазме с очень высокой температурой при достаточно высокой плотности. Чтобы получить такую плазму, нужно ее нагреть и удержать в заданном объеме в течение определенного промежутка времени. Обе эти проблемы наталкиваются на огромные трудности, связанные прежде всего с большим числом неустойчивостей, которые возникают в плазме при попытках нагреть ее и сжать.

Продемонстрируем в рамках линеаризованного уравнения Власова одну из типичных неустойчивостей плазмы — так называемую "пучковую неустойчивость плазмы".

Пучковая неустойчивость образуется, когда состояние электронов разбивается на два пучка, летящих с разными скоростями.

Для простоты рассмотрим случай, когда в покоящуюся плазму впрыснут слабый (но очень больших размеров) пучок холодной плазмы, все частицы которого движутся с одинаковыми скоростями v_0 , а тепловым разбросом скоростей можно пренебречь. Эта ситуация описывается стационарным распределением электронов:

$$f_{st} = f^0 + n_1 \delta(\mathbf{v} - \mathbf{v}_0) \quad (5.35)$$

где f^0 — максвелловское распределение электронов покоящейся плазмы, n_1 — плотность электронов в пучке.

Однородное распределение (5.35) является стационарным решением уравнения Власова:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \nabla f + \frac{e}{m} \mathbf{E} \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} f = 0 \quad (5.36)$$

так как $\nabla f_{st} = 0$ и $\mathbf{E} = 0$, поскольку электрическое поле в нейтральной плазме создается только неоднородностью сторонних зарядов.

На первый взгляд кажется, что любая неоднородность плазмы, связанная, например, с конечными размерами пучка, должна постепенно рассасываться. В действительности, как мы покажем сейчас, распределение (5.35) неустойчиво.

Эволюцию распределения (5.35) можно описать в точности таким же способом, как мы уже делали это выше, если искать решение уравнения Власова в виде

$$f = f_{st} + f^1$$

и линеаризовать (5.36) относительно f^1 :

$$\begin{aligned} \frac{\partial f^1}{\partial t} + \mathbf{v} \nabla f^1 + \frac{e}{m} \mathbf{E} \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} f_{st} &= 0, \\ \operatorname{div} \mathbf{E} &= 0; \operatorname{rot} \mathbf{E} = 0. \end{aligned}$$

Заметим, что здесь вводить интеграл столкновений в форме τ приближения опасно, поскольку распределение (5.35) заведомо не должно обращать интеграл столкновений в нуль. Мы ограничимся бесстолкновительной задачей, но будем помнить, что наши результаты нельзя распространять на времена $t > \tau$.

После этих оговорок можно почти дословно повторить выкладки раздела, в котором решалось уравнение Власова, и получить диэлектрическую проницаемость плазмы с холодным пучком:

$$\varepsilon(p) = 1 - i \frac{4\pi e^2}{mk} \int \frac{\mathbf{k} \frac{\partial f_{st}}{\partial \mathbf{v}} d^3 \mathbf{v}}{p + i \mathbf{k} \mathbf{v}}$$

Это выражение немедленно получается из формулы (5.21), если заменить в ней распределение f^0 на распределение f_{st} и положить $\frac{1}{\tau} = 0$. Интегрируя по частям, получим

$$\begin{aligned} \int \frac{\mathbf{k} \frac{\partial f_{st}}{\partial \mathbf{v}} d^3 \mathbf{v}}{p + i \mathbf{k} \mathbf{v}} &= - \int d^3 \mathbf{v} f_{st} k_\alpha \frac{\partial}{\partial v_\alpha} \frac{1}{p + i \mathbf{k} \mathbf{v}} = \\ &= \int d^3 \mathbf{v} f_{st} \frac{ik^2}{(p + i \mathbf{k} \mathbf{v})^2} \end{aligned}$$

Поэтому

$$\varepsilon(p) = 1 + \frac{4\pi e^2}{m} \int d^3 \mathbf{v} \frac{f_{st}}{(p + i \mathbf{k} \mathbf{v})^2}$$

Часть ε , связанную с распределением Максвелла, мы уже вычисляли раньше, а интегрирование с δ -функцией производится тривиально:

$$\varepsilon(p) = 1 + \frac{\omega_p^2}{p^2} + \frac{\omega_1^2}{(p + i \mathbf{k} \mathbf{v})^2}$$

где

$$\omega_1^2 = \frac{4\pi n_1 e^2}{m} \quad (5.37)$$

Для простоты мы считаем, что длина волны достаточно велика, и пренебрегаем как дисперсией главной части знакомого нам интеграла $J(p)$, так и членом, ответственным за затухание Ландау.

Как показывает аккуратный анализ, эти упрощения можно сделать, если

$$kv_T \ll k_{\parallel}v_0 \ll \omega_p, \quad \omega_1 \ll \omega_p.$$

Поскольку играет роль лишь проекция k на v_0 , то здесь и в дальнейшем мы полагаем, что

$$k\mathbf{v}_0 = k_{\parallel}v_0$$

Для вычисления нулей диэлектрической проницаемости необходимо потребовать, чтобы

$$-p^2 = \omega_p^2 + \frac{\omega_1^2 p^2}{(p + ik_{\parallel}v_0)^2} \quad (5.38)$$

Из этого уравнения сразу же следует осциллирующее решение $p = -i\omega$, близкое к старому:

$$\omega^2 = \omega_p^2 + \frac{\omega_1^2 \omega_p^2}{(\omega_p - k_{\parallel}v_0)^2}$$

Второе решение имеет смысл искать вблизи полюса правой части уравнения (5.38):

$$p = -ik_{\parallel}v_0 - \gamma, \quad |\gamma| \ll k_{\parallel}v_0. \quad (5.39)$$

Подставляя это выражение в (5.38), получаем

$$(k_{\parallel}v_0)^2 = \omega_p^2 - \frac{(\omega_1 k_{\parallel}v_0)^2}{\gamma^2},$$

или

$$\gamma = \pm \frac{\omega_1 k_{\parallel}v_0}{[\omega_p^2 - (k_{\parallel}v_0)^2]^{1/2}}$$

Декремент, как мы и предполагали, получился малым. Однако, кроме обычного положительного значения γ , оказалось возможным отрицательное решение. Следовательно, если одна из ветвей затухает по закону:

$$\sim e^{-ikv_0 t} e^{-|\gamma|t}.$$

то другая ветвь неограниченно растет

$$\sim e^{-ikv_0 t} e^{|\gamma|t}.$$

Существование ветви собственных колебаний с отрицательным декрементом затухания доказывает неустойчивость плазмы, имеющей первоначальное распределение (5.35).

Выше мы сделали предположение, что $v_T \ll v_0$, то есть скорость пучка велика по сравнению с тепловой скоростью плазмы. Если бы скорости v_T и v_0 были одного порядка, то ветвь (5.39) имела бы большое затухание Ландау и стала бы устойчивой.

Любопытно отметить тот факт, что физическая причина пучковой неустойчивости - та же, что и у затухания Ландау - резонансное поведение электронов, движущихся с фазовой скоростью волны.

Резонансная раскачка электронов, для которых $\omega = \mathbf{k}\mathbf{v}_0$, может привести как к интегральному увеличению колебания плотности ρ_k и, следовательно, поля $\mathbf{E}_k$, так и к уменьшению ρ_k и соответственно поля $\mathbf{E}_k$. В связи с этим следует упомянуть о теореме Найквиста, согласно которой плазма

устойчива, если распределение электронов по величине скорости в направлении движения волны (скажем, по оси z)

$$\varphi(v_z) = \int dv_x dv_y f^0(\mathbf{v})$$

имеет только один максимум. В рассмотренном выше примере распределение имеет два максимума v_T и v_0 , что и привело к неустойчивости.

8.5.9 5.9. Calculation of the Dielectric Constant of a Plasma in the Diffusion

В общем виде тензор диэлектрической проницаемости может быть записан в виде

$$\varepsilon_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta} + 4\pi\kappa_{\alpha\beta} \quad (5.40)$$

где $\kappa_{\alpha\beta}$ - тензор поляризуемости.

С учетом условия причинности для вектора поляризации системы имеем

$$P_\alpha(\mathbf{r}, t) = \int_{-\infty}^t dt' \int d\mathbf{r}' \kappa_{\alpha\beta}(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t - t') E_\beta(\mathbf{r}', t') \quad (5.41)$$

Определим фурье-компоненту вектора поляризации следующим образом:

$$P_\alpha(\mathbf{k}, \omega) = \iint dt d\mathbf{r} e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} + \omega t)} P_\alpha(\mathbf{r}, t) \quad (5.42)$$

Тогда

$$\begin{aligned} & \iint dt d\mathbf{r} e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)} \int_{-\infty}^t dt' \int d\mathbf{r}' \kappa_{\alpha\beta}(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t - t') E_\beta(\mathbf{r}', t') = \\ & \int dt \int d\mathbf{r} e^{i[\mathbf{k}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') - \omega(t - t')]} \theta(t - t') \kappa_{\alpha\beta}(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t - t') \times \\ & \times \int_{-\infty}^{\infty} dt' \int d\mathbf{r}' \times e^{i[\mathbf{k}\mathbf{r}' - \omega t']} E_\beta(\mathbf{r}', t') = \\ & \kappa_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, \omega) E_\beta(\mathbf{k}, \omega) = P_\alpha(\mathbf{k}, \omega) \end{aligned} \quad (5.43)$$

В силу изотропии пространства компоненты тензора $\kappa_{\alpha\beta}$ имеют вид

$$\kappa_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, \omega) = \kappa_l \frac{k_\alpha k_\beta}{k^2} + \kappa_t \left(\delta_{\alpha\beta} - \frac{k_\alpha k_\beta}{k^2} \right) \quad (5.44)$$

где κ_l, κ_t - соответственно продольная и поперечная диэлектрические восприимчивости. Тогда для тензора диэлектрической проницаемости получим

$$\varepsilon_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, \omega) = \varepsilon_l \frac{k_\alpha k_\beta}{k^2} + \varepsilon_t \left(\delta_{\alpha\beta} - \frac{k_\alpha k_\beta}{k^2} \right) = \quad (5.45)$$

$$= \delta_{\alpha\beta} + 4\pi\kappa_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, \omega) = \quad (5.46)$$

$$= \delta_{\alpha\beta} + 4\pi \left[\kappa_l \frac{k_\alpha k_\beta}{k^2} + \kappa_t \left(\delta_{\alpha\beta} - \frac{k_\alpha k_\beta}{k^2} \right) \right] \quad (5.47)$$

Приравнивая члены при $\delta_{\alpha\beta}$ и $k_\alpha k_\beta$, получим для коэффициентов проницаемости:

$$\varepsilon_t = 1 + 4\pi\kappa_t, \varepsilon_l - \varepsilon_t = 4\pi[\kappa_l + \kappa_t] \rightarrow \varepsilon_l = 1 + 4\pi\kappa_l.$$

Любой вектор $\mathbf{E}$ может быть представлен в виде

$$\mathbf{E} = \frac{\mathbf{E}\mathbf{k}}{k^2}\mathbf{k} + \left(\mathbf{E} - \frac{\mathbf{E}\mathbf{k}}{k^2}\mathbf{k}\right) = \mathbf{E}_l + \mathbf{E}_t \quad (5.48)$$

Тогда вектор $\mathbf{E}_l$ параллелен, а вектор $\mathbf{E}_t$ перпендикулярен $\mathbf{k}$. Если подействовать на $\mathbf{E}_l$ оператором $\delta_{\alpha\beta} - \frac{k_\alpha k_\beta}{k^2}$, то получится пуль. Если же на $\mathbf{E}_t$ подействовать оператором $\frac{k_\alpha k_\beta}{k^2}$, то также получится нуль. Поэтому вектор смещения можно представить в виде:

$$\mathbf{D} = \varepsilon_l \frac{\mathbf{E}\mathbf{k}}{k^2}\mathbf{k} + \varepsilon_t \left(\mathbf{E} - \frac{\mathbf{E}\mathbf{k}}{k^2}\mathbf{k}\right) \quad (5.49)$$

а вектор поляризации, соответственно, записать как

$$\mathbf{P} = \kappa_l \frac{\mathbf{E}\mathbf{k}}{k^2}\mathbf{k} + \kappa_t \left(\mathbf{E} - \frac{\mathbf{E}\mathbf{k}}{k^2}\mathbf{k}\right).$$

Уравнения Максвелла в среде в отсутствие сторонних токов и зарядов имеют вид

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \mathbf{D} &= 0, \quad \operatorname{div} \mathbf{B} = 0, \\ \operatorname{rot} \mathbf{H} &= \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}, \quad \operatorname{rot} \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}. \end{aligned} \quad (5.50)$$

Для немагнитной среды в фурье-компонентах система (5.50) переписывается в виде:

$$\begin{aligned} \mathbf{kD} &= 0, \quad \mathbf{kH} = 0, \\ [\mathbf{kH}] &= -\frac{\omega}{c}\mathbf{D}, \quad [\mathbf{kE}] = \frac{\omega}{c}\mathbf{H}. \end{aligned} \quad (5.51)$$

Подставляя в третье уравнение вместо $\mathbf{D}$ его выражение из (5.49), получим

$$\mathbf{k} \times \mathbf{H} = -\frac{\omega}{c} \left[\varepsilon_l \frac{\mathbf{E}\mathbf{k}}{k^2}\mathbf{k} + \varepsilon_t \left(\mathbf{E} - \frac{\mathbf{E}\mathbf{k}}{k^2}\mathbf{k}\right) \right]. \quad (5.52)$$

Из четвертого уравнения системы (5.49) следует, что

$$\mathbf{k} \times \mathbf{H} = \frac{c}{\omega} \mathbf{k} \times [\mathbf{k} \times \mathbf{E}] = -\frac{k^2 c}{\omega} \mathbf{E}_t = -\frac{k^2 c}{\omega} \left(\mathbf{E} - \frac{\mathbf{E}\mathbf{k}}{k^2}\mathbf{k}\right). \quad (5.53)$$

Из (5.53) и (5.52) имеем

$$\left(\mathbf{E} - \frac{\mathbf{E}\mathbf{k}}{k^2}\mathbf{k}\right) = \left(\frac{\omega}{ck}\right)^2 \left[\varepsilon_l \frac{\mathbf{E}\mathbf{k}}{k^2}\mathbf{k} + \varepsilon_t \left(\mathbf{E} - \frac{\mathbf{E}\mathbf{k}}{k^2}\mathbf{k}\right) \right]. \quad (5.54)$$

Разделяя в последнем уравнении параллельные и перпендикулярные вектору $\mathbf{k}$ проекции, получим условие распространения электромагнитных волн в рассматриваемой среде:

$$\left(\frac{\omega}{ck}\right)^2 \varepsilon_t - 1 = 0, \quad (5.55)$$

$$\varepsilon_l = 0. \quad (5.56)$$

В вакууме $\varepsilon_t = \varepsilon_l = 1$, и, следовательно, продольные волны распространяться не могут. Электрический ток подчиняется **J** уравнению непрерывности:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{J} = 0. \quad (5.57)$$

где ρ - плотность заряда. В фурье-компонентах это уравнение перепишется в виде

$$\omega \rho - \mathbf{k} \mathbf{j} = 0. \quad (5.58)$$

Из кинетического соотношения (диффузионное приближение)

$$\mathbf{J} = -D \nabla \rho + \sigma \mathbf{E}, \quad (5.59)$$

перенесенного в фурье-компонентах, имеем

$$\mathbf{j} = -i D \mathbf{k} \rho + \sigma \mathbf{E} \quad (5.60)$$

Постулируемую феноменологическую зависимость (5.59) следует понимать так. Приложенное внешнее поле вызывает непосредственно как электрический ток, так и градиент концентрации электронной плотности. Этот возникающий градиент приводит, в свою очередь, к диффузионному току, дающему вклад в суммарный электрический ток.

Выразив плотность из уравнения (5.58) и подставив результат в (5.60), получим

$$\mathbf{j} = -i \frac{D \mathbf{k}}{\omega} \mathbf{k} \rho + \sigma \mathbf{E}. \quad (5.61)$$

По определению

$$\rho + \operatorname{div} \mathbf{P} = 0. \quad (5.62)$$

Тогда

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial t} = 0 \quad (5.63)$$

Сопоставляя (5.57) и (5.63), имеем

$$\begin{aligned} \mathbf{J} &= \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial t} \rightarrow \mathbf{j} = -i \omega \mathbf{P} = -i \omega \hat{\kappa} \mathbf{E} = \\ &= -i \omega \left[\kappa_l \frac{\mathbf{E} \mathbf{k}}{k^2} + \kappa_t \left(\mathbf{E} - \frac{\mathbf{E} \mathbf{k}}{k^2} \mathbf{k} \right) \right]. \end{aligned} \quad (5.64)$$

Умножая уравнение (5.61) на $\mathbf{k}$, найдем произведение

$$\mathbf{k} \mathbf{j} = \frac{\sigma \mathbf{E} \mathbf{k}}{1 - \frac{D k^2}{i \omega}} \quad (5.65)$$

Часть тока, параллельная $\mathbf{k}$, равна (см. (5.65))

$$\mathbf{j}_l = \frac{(\mathbf{j} \mathbf{k}) \mathbf{k}}{k^2} = \frac{\sigma (\mathbf{E} \mathbf{k}) \mathbf{k}}{k^2 \left(1 - \frac{D k^2}{i \omega} \right)} \quad (5.66)$$

Сопоставляя (5.66) и первый член в правой части (5.64), получим

$$-i\omega\kappa_l = \frac{\sigma}{\left(1 - \frac{Dk^2}{i\omega}\right)} \quad (5.67)$$

$$\kappa_l = \frac{\sigma}{(-i\omega + Dk^2)} \quad (5.68)$$

Первый член в правой части (5.61) дает вклад только в параллельную часть тока, поэтому часть тока, перпендикулярная $\mathbf{k}$, равна

$$\mathbf{j}_\perp = \sigma \left(\mathbf{E} - \frac{\mathbf{E}\mathbf{k}}{k^2} \mathbf{k} \right) \quad (5.69)$$

Сопоставляя (5.69) и второй член в правой части (5.64), получим

$$\sigma = -i\omega\kappa_t \rightarrow \kappa_t = \frac{\sigma}{-i\omega}. \quad (5.70)$$

Закон дисперсии продольных колебаний находится из соотношения

$$1 + 4\pi\kappa_l = 0 = 1 + \frac{i\sigma}{(\omega + iDk^2)} \quad (5.71)$$

То есть

$$\omega = -i\sigma - iDk^2 \quad (5.72)$$

что означает невозможность распространения продольных колебаний.
Для поперечных колебаний,

$$\omega = ck/\sqrt{\varepsilon_1} = \frac{ck}{\sqrt{1 + \frac{4\pi i\sigma}{\omega}}} \approx \quad (5.73)$$

$$\approx ck \left(1 - \frac{2\pi i\sigma}{ch} \right) = ck - 2\pi i\sigma \quad (5.74)$$

Электромагнитные волны распространяются, но при конечной проводимости затухают.

Part IV

Fundamentals of Quantum Kinetics

9 Quantum master equations

This section is mostly based on a book by Breuer, Petruccione.

In contrast to the case of a closed systems, the quantum dynamics of an open system cannot, in general, be represented in terms of a unitary time evolution. In many cases it turns out to be useful to formulate, instead, the dynamics of an open system by means of an appropriate equation of motion for its density matrix, a quantum master equation. In this chapter we shall give a survey of the various types of master equations which can be employed to analyse the quantum dynamics of open systems. The emphasis lies on the Markovian dynamics of open systems. A systematic treatment of non-Markovian quantum processes will be presented in Part IV.

To begin with, we give a general characterization of the dynamics of closed and open quantum systems. Quantum Markov processes are then introduced which represent the simplest case of the dynamics of open systems. They can be regarded, essentially, as a direct generalization of the classical probabilistic concept of a dynamical semigroup to quantum mechanics. In analogy to the differential Chapman-Kolmogorov equation of classical probability theory, a quantum dynamical semigroup gives rise to a first-order linear differential equation for the reduced density matrix, which is known as quantum Markovian master equation in Lindblad form.

A number of derivations of Markovian density matrix equations will be given which start from various microscopic models, such as the weak-coupling interaction of radiation with matter and the Caldeira-Leggett model. The resultant density matrix equations enable the investigation of general features like irreversibility, entropy production, and relaxation to equilibrium. In standard applications of the dynamics of open systems two limiting cases are of particular relevance. These are the quantum optical and the quantum Brownian motion master equation. We shall give a number of examples and discuss basic properties of the corresponding master equations. For later purposes the Caldeira-Leggett model will also be studied from a broader perspective using the exact Heisenberg equations of motion as well as influence functional and path integral techniques.

In the treatment of open many-body systems non-linear quantum master equations are also encountered. If one takes into account particle correlations on the mean-field level the reduced density matrix equation involves a non-linear time-evolution generator. Under certain conditions the solutions of such nonlinear density matrix equations may be obtained with the help of a non-linear Schrödinger-type equation. As two prominent examples for mean-field master equations we treat the laser equations and the phenomenon of super-radiance.

9.1 Density Matrix

(I'll write what exactly it is and how exactly to work with is in stat phys???? a very important concept)

9.2 3.1 General Concepts of Closed and Open Quantum Systems

(here are just well known basics)

3.1.1 The Liouville-von Neumann equation

According to quantum mechanics the state vector $|\psi(t)\rangle$ evolves in time according to the Schrödinger equation,

$$i\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = H(t)|\psi(t)\rangle \quad (3.1)$$

where $H(t)$ is the Hamiltonian of the system and Planck's constant $\hbar$ has been set equal to 1. The solution of the Schrödinger equation may be represented in terms of the unitary time-evolution operator $U(t, t_0)$ which transforms the state $|\psi(t_0)\rangle$ at some initial time t_0 to the state $|\psi(t)\rangle$ at time t ,

$$|\psi(t)\rangle = U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle. \quad (3.2)$$

If we substitute expression (3.2) into the Schrödinger equation (3.1) we get an operator equation for the time-evolution operator $U(t, t_0)$,

$$i\frac{\partial}{\partial t}U(t, t_0) = H(t)U(t, t_0) \quad (3.3)$$

which is subjected to the initial condition

$$U(t_0, t_0) = I. \quad (3.4)$$

It is easy to show with the help of (3.3) and (3.4) that $U^\dagger(t, t_0)U(t, t_0) = U(t, t_0)U^\dagger(t, t_0) \equiv I$ and, hence, that $U(t, t_0)$ is a unitary operator.

For a closed, isolated physical system the Hamiltonian H is time independent and eqn (3.3) is readily integrated to yield the well-known expression

$$U(t, t_0) = \exp[-iH(t - t_0)] \quad (3.5)$$

In physical applications one often encounters the situation that the system under consideration is driven by external forces, an external electromagnetic field for example. If in such a case the dynamics of the system can still be formulated in terms of a possibly time-dependent Hamiltonian generator $H(t)$ the system will again be said to be closed, while we reserve the term isolated to mean that the Hamiltonian of the system is time independent. For a time-dependent Hamiltonian the solution of eqn (3.3) subjected to the initial condition (3.4) may be represented as a time-ordered exponential,

$$U(t, t_0) = T_{\leftarrow} \exp \left[-i \int_{t_0}^t ds H(s) \right] \quad (3.6)$$

where $T_{\leftarrow}$ denotes the chronological time-ordering operator which orders products of time-dependent operators such that their time-arguments increase from right to left as indicated by the arrow.

If the system under consideration is in a mixed state the corresponding quantum statistical ensemble may be characterized with the help of the statistical operator ρ . It is straightforward to derive an equation of motion for the density matrix starting from the Schrödinger equation (3.1). Let us assume that at some initial time t_0 the state of the system is characterized by the density matrix (see Section 2.1.3)

$$\rho(t_0) = \sum_{\alpha} w_{\alpha} |\psi_{\alpha}(t_0)\rangle \langle \psi_{\alpha}(t_0)|, \quad (3.7)$$

where the w_α are positive weights and the $|\psi_\alpha(t_0)\rangle$ are normalized state vectors which evolve in time according to the Schrödinger equation (3.2). The state of the system at time t will therefore be given by

$$\rho(t) = \sum_{\alpha} w_{\alpha} U(t, t_0) |\psi_{\alpha}(t_0)\rangle \langle \psi_{\alpha}(t_0)| U^{\dagger}(t, t_0), \quad (3.8)$$

which may be written more concisely as

$$\rho(t) = U(t, t_0) \rho(t_0) U^{\dagger}(t, t_0). \quad (3.9)$$

Differentiating this equation with respect to time we immediately get an equation of motion for the density matrix,

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = -i[H(t), \rho(t)], \quad (3.10)$$

which is often referred to as the von Neumann or Liouville-von Neumann equation.

In order to stress the analogy of the von Neumann equation with the corresponding equation of motion for the probability density in classical statistical mechanics it is often written in a form analogous to the classical Liouville equation,

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = \mathcal{L}(t)\rho(t) \quad (3.11)$$

Here, $\mathcal{L}$ is the Liouville operator which is defined through the condition that $\mathcal{L}(t)\rho$ is equal to $-i$ times the commutator of $H(t)$ with ρ . More precisely, $\mathcal{L}$ is often called a Liouville super-operator since it acts on an operator to yield another operator. In close analogy to eqn (3.6) the Liouville equation (3.11) leads to the formal expression

$$\rho(t) = T_{\leftarrow} \exp \left[\int_{t_0}^t ds \mathcal{L}(s) \right] \rho(t_0). \quad (3.12)$$

For the case of a time independent Hamiltonian the Liouville super-operator is also time independent and we obviously have

$$\rho(t) = \exp [\mathcal{L}(t - t_0)] \rho(t_0). \quad (3.13)$$

3.1.2 Heisenberg and interaction picture

In the Schrödinger picture the time dependence of the density matrix $\rho(t)$ is governed by the Liouville-von Neumann equation (3.11). An equivalent description of the quantum dynamics is obtained by transferring the time dependence from the density matrix to the operators in the Hilbert space $\mathcal{H}$. This leads to the Heisenberg picture. We assume that at some fixed initial time t_0 the quantum states in both pictures coincide, that is $\rho(t_0) = \rho_H(t_0)$. Here and in the following Heisenberg picture operators are indicated by an index H . Schrödinger picture and Heisenberg picture operators are related through the canonical transformation

$$A_H(t) = U^{\dagger}(t, t_0) A(t) U(t, t_0), \quad (3.14)$$

where we allow the Schrödinger picture operator $A(t)$ to depend explicitly on time. Obviously, at time t_0 Schrödinger and Heisenberg picture operators coincide, $A_H(t_0) = A(t_0)$. In the Heisenberg picture the quantum expectation values are determined through the fixed density matrix $\rho_H(t_0)$. The physical equivalence of the two pictures is made evident by the fact that the expectation value of an observable $A(t)$ is the same in both pictures,

$$\langle A(t) \rangle = \text{tr}\{A(t)\rho(t)\} = \text{tr}\{A_H(t)\rho_H(t_0)\}. \quad (3.15)$$

It is straightforward to derive an equation of motion for a Heisenberg picture operator $A_H(t)$ from the transformation law (3.14). Differentiating both sides of (3.14) with respect to time we obtain the Heisenberg equation of motion

$$\frac{d}{dt}A_H(t) = i[H_H(t), A_H(t)] + \frac{\partial A_H(t)}{\partial t} \quad (3.16)$$

where $H_H(t)$ denotes the Hamiltonian in the Heisenberg picture,

$$H_H(t) = U^\dagger(t, t_0) H(t) U(t, t_0). \quad (3.17)$$

In eqn (3.16) d/dt denotes the total time derivative, while $\partial/\partial t$ is the partial derivative with respect to the explicit time dependence of the Schrödinger picture operator. Explicitly, we have

$$\frac{\partial A_H(t)}{\partial t} = U^\dagger(t, t_0) \frac{\partial A(t)}{\partial t} U(t, t_0) \quad (3.18)$$

If $dA_H(t)/dt = 0$, then A_H is a constant of motion. An important special case of the Heisenberg equation of motion is obtained by choosing A to be the Hamiltonian of the system, i.e. $A = H$. For an isolated system $\partial H/\partial t = 0$, and the time-evolution operator has the special form (3.5). Hence, the Hamiltonian commutes with the time-evolution operator $U(t, t_0)$ and it follows that the Heisenberg picture Hamiltonian $H_H(t)$ is a constant of motion, that is

$$\frac{d}{dt}H_H = 0. \quad (3.19)$$

Moreover, if the Schrödinger operator A has no explicit time dependence and if the system is isolated the Heisenberg equation of motion reduces to the form

$$\frac{d}{dt}A_H(t) = i[H, A_H(t)]. \quad (3.20)$$

Let us now look at the equation of motion for the expectation value of an arbitrary Schrödinger observable $A(t)$, which in general will depend explicitly on time. Differentiating eqn (3.15) with respect to time and invoking the Heisenberg equation of motion (3.16) one finds

$$\frac{d}{dt}\langle A(t) \rangle = \left\langle \frac{d}{dt}A_H(t) \right\rangle = \text{tr} \left\{ \left(i[H_H(t), A_H(t)] + \frac{\partial A_H(t)}{\partial t} \right) \rho_H(t_0) \right\}. \quad (3.21)$$

This equation is known as the Ehrenfest equation. It states that the time variation of the expectation value of an observable $A(t)$ is equal to the expectation value of the time derivative of the corresponding Heisenberg observable $A_H(t)$.

The Schrödinger and the Heisenberg pictures are the limiting cases of a more general picture, which is called the interaction picture. Let us write the Hamiltonian of the system as the sum of two parts

$$H(t) = H_0 + \hat{H}_I(t) \quad (3.22)$$

The precise form of the splitting of the Hamiltonian depends upon the particular physical situation under study. In general, H_0 represents the sum of the energies of two systems when the interaction between the systems is ignored and we shall assume that it is independent of time; $\hat{H}_I(t)$ is then the Hamiltonian describing the interaction between the systems. Again,

the time evolution operator of the total system will be denoted by $U(t, t_0)$. According to eqn (3.15) the expectation value of a Schrödinger observable $A(t)$ (which may depend explicitly on time) at time t is given by

$$\langle A(t) \rangle = \text{tr} \{ A(t) U(t, t_0) \rho(t_0) U^\dagger(t, t_0) \}, \quad (3.23)$$

where $\rho(t_0)$ is the state of the system at time t_0 .

We introduce the unitary time evolution operators

$$U_0(t, t_0) \equiv \exp[-iH_0(t - t_0)] \quad (3.24)$$

and

$$U_I(t, t_0) \equiv U_0^\dagger(t, t_0) U(t, t_0). \quad (3.25)$$

Then the expectation value (3.23) may be written as

$$\begin{aligned} \langle A(t) \rangle &= \text{tr} \{ U_0^\dagger(t, t_0) A(t) U_0(t, t_0) U_I(t) \rho(t_0) U_I^\dagger(t, t_0) \} \\ &\equiv \text{tr} \{ A_I(t) \rho_I(t) \} \end{aligned} \quad (3.26)$$

where we have introduced $A_I(t)$ as the interaction picture operator

$$A_I(t) \equiv U_0^\dagger(t, t_0) A(t) U_0(t, t_0) \quad (3.27)$$

and $\rho_I(t)$ as the interaction picture density matrix

$$\rho_I(t) \equiv U_I(t, t_0) \rho(t_0) U_I^\dagger(t, t_0) \quad (3.28)$$

It may be important to note that in contrast to the Heisenberg picture the time evolution of interaction picture operators is not generated by the full Hamiltonian H but only by the free part H_0 . If $\hat{H}_I(t) = 0$ we have $U_0(t, t_0) = U(t, t_0)$ and $U_I(t, t_0) = I$, such that the interaction picture is identical to the Heisenberg picture. Conversely, in the other limiting case of a vanishing free Hamiltonian, $H_0 = 0$, we have $\hat{H}_I(t) = H(t)$ such that $U_0(t, t_0) = I$ and $U_I(t, t_0) = U(t, t_0)$, and we regain the Schrödinger picture.

It is clear that the interaction picture time-evolution operator $U_I(t, t_0)$ is the solution of the differential equation

$$i \frac{\partial}{\partial t} U_I(t, t_0) = H_I(t) U_I(t, t_0) \quad (3.29)$$

subject to the initial condition $U_I(t_0, t_0) = I$. Here, we have denoted the interaction Hamiltonian in the interaction picture by

$$H_I(t) \equiv U_0^\dagger(t, t_0) \hat{H}_I(t) U_0(t, t_0) \quad (3.30)$$

The corresponding von Neumann equation in the interaction picture thus takes the form

$$\frac{d}{dt} \rho_I(t) = -i [H_I(t), \rho_I(t)] \quad (3.31)$$

Often, the interaction picture von Neumann equation is written in the equivalent integral form

$$\rho_I(t) = \rho_I(t_0) - i \int_{t_0}^t ds [H_I(s), \rho_I(s)] \quad (3.32)$$

This form of the von Neumann equation may be used as a starting point of a perturbative approach to the construction of approximate solutions.

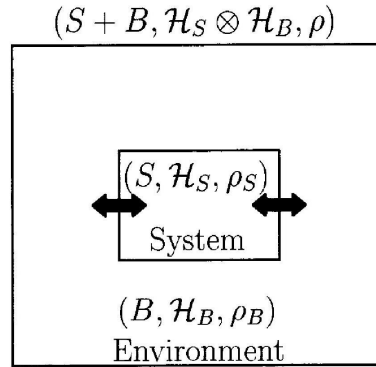


Fig. 3.1. Schematic picture of an open quantum system.

3.1.3 Dynamics of open systems

Having briefly sketched the fundamental equations describing the Hamiltonian dynamics of a closed quantum system let us now turn to the notion of an open system. In general terms, an open system is a quantum system S which is coupled to another quantum system B called the environment. It thus represents a subsystem of the combined total system $S + B$ (see Section 2.2), whereby in most cases it is assumed that the combined system is closed, following Hamiltonian dynamics. The state of the subsystem S , however, will change as a consequence of its internal dynamics and of the interaction with the surroundings. The interaction leads to certain system-environment correlations such that the resulting state changes of S can no longer, in general, be represented in terms of unitary, Hamiltonian dynamics. The dynamics of the subsystem S induced by the Hamiltonian evolution of the total system is often referred to as reduced system dynamics, and S is also called the reduced system.

Let us denote by $\mathcal{H}_S$ the Hilbert space of the system and by $\mathcal{H}_B$ the Hilbert space of the environment. The Hilbert space of the total system $S + B$ is then given by the tensor product space $\mathcal{H} = \mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_B$ (see Section 2.2.1). The total Hamiltonian $H(t)$ may be taken to be of the form

$$H(t) = H_S \otimes I_B + I_S \otimes H_B + \hat{H}_I(t) \quad (3.33)$$

where H_S is the self-Hamiltonian of the open system S , H_B is the free Hamiltonian of the environment B , and $\hat{H}_I(t)$ is the Hamiltonian describing the interaction between the system and the environment. Of course, one may also include time-dependent interactions into the model. A schematic picture of the typical situation under study is shown in Fig. 3.1.

If we speak of an open system S we shall use the general term environment for the system B coupled to it. The term reservoir refers to an environment with an infinite number of degrees of freedom such that the frequencies of the reservoir modes form a continuum. As will be seen, it is this property which generally leads to an irreversible behaviour of the open quantum system. Finally, the term bath or heat bath will be used for a reservoir which is in a thermal equilibrium state.

We are going to investigate several physical examples of open quantum systems in this book. Mainly, the motivation for the study of open systems is that in many physically important situations a complete mathematical model of the combined system's dynamics is much too complicated. The environment may represent, for example, a reservoir or a heat bath consisting of infinitely many degrees of freedom, in which case an exact treatment requires the solution of an infinite hierarchy of coupled equations of motion. Even if a solution is known one is confronted with the task of isolating and determining the interesting physical quantities through

an average over the remaining, irrelevant degrees of freedom. Moreover, one often encounters the situation that the modes of the environment are neither known exactly nor controllable. One therefore tries to develop a simpler description in a reduced state space formed by a restricted set of physically relevant variables which is achieved by employing various analytical methods and approximation techniques.

We regard an open system S to be singled out by the fact that all observations of interest refer to this subsystem. According to Section 2.2 .1 the observables referring to S are all of the form $A \otimes I_B$, where A is an operator acting on the Hilbert space $\mathcal{H}_S$ and I_B denotes the identity in the Hilbert space $\mathcal{H}_B$. If the state of the total system is described by some density matrix ρ , then the expectation values of all observables acting on the open system's Hilbert space are determined through the formula

$$\langle A \rangle = \text{tr}_S \{ A \rho_S \}, \quad (3.34)$$

where

$$\rho_S = \text{tr}_B \rho \quad (3.35)$$

is the reduced density matrix of the open quantum system S (see eqn (2.92)). Here and in the following tr_S denotes the partial trace over the open system's Hilbert space, while tr_B denotes the partial trace over the degrees of freedom of the environment B . It is clear that the reduced density operator ρ_S will be the quantity of central interest in the description of open quantum systems.

The reduced density matrix $\rho_S(t)$ at time t is obtained from the density matrix $\rho(t)$ of the total system by taking the partial trace over the degrees of freedom of the environment. Since the total density matrix evolves unitarily we have

$$\rho_S(t) = \text{tr}_B \{ U(t, t_0) \rho(t_0) U^\dagger(t, t_0) \}, \quad (3.36)$$

where $U(t, t_0)$ is the time-evolution operator of the total system. In an analogous way the equation of motion for the reduced density matrix is obtained by taking the partial trace over the environment on both sides of the Liouville-von Neumann equation for the total system,

$$\frac{d}{dt} \rho_S(t) = -i \text{tr}_B [H(t), \rho(t)]. \quad (3.37)$$

In the following sections we give a survey of the most important equations of motion for the reduced density matrix used to approximate the above exact dynamical equations.

примеры уравнений Линдблада

посмотрим на примеры, чтобы начать ориентироваться.

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = & -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}_S, \hat{\rho}] + \gamma_{\text{diss}} (1 + N_{\omega_0}) \left(\hat{\sigma} \hat{\rho} \hat{\sigma}^+ - \frac{1}{2} \hat{\sigma}^+ \hat{\sigma} \hat{\rho} - \frac{1}{2} \hat{\rho} \hat{\sigma}^+ \hat{\sigma} \right) + \\ & + (\gamma_{\text{diss}} N_{\omega_0} + \gamma_{\text{pump}}) \left(\hat{\sigma}^+ \hat{\rho} \hat{\sigma} - \frac{1}{2} \hat{\sigma} \hat{\sigma}^+ \hat{\rho} - \frac{1}{2} \hat{\rho} \hat{\sigma} \hat{\sigma}^+ \right) + \frac{\gamma_{\text{deph}}}{2} (\hat{\sigma}_z \hat{\rho} \hat{\sigma}_z - \hat{\rho}) \end{aligned}$$

где γ_{diss} и γ_{deph} - скорости диссипации и дефазировки соответственно, введённые ранее, а также добавлена γ_{pump} , которую называют скоростью некогерентной накачки ДУС каким-то внешним полем.

9.3 3.2 Quantum Markov processes

The most important property of a classical, homogeneous Markov process is the semigroup property which is usually formulated in terms of the differential Chapman-Kolmogorov equation (1.68) involving a time-independent generator. The extension of this property to quantum mechanics leads to the concepts of a quantum dynamical semigroup and a quantum Markov process (Kraus, 1971; Davies, 1976; Alicki and Lendi, 1987; Alicki and Fannes, 2001). These concepts are introduced in this section and the general form of a quantum Markovian master equation is derived. We also discuss some general features of quantum Markov processes, such as the adjoint master equation, the quantum regression theorem, irreversibility and entropy production.

9.3.1 3.2.1 Quantum dynamical semigroups

In general the dynamics of the reduced system defined by the exact equations (3.36) and (3.37) will be quite involved. However, under the condition of short environmental correlation times one may neglect memory effects and formulate the reduced system dynamics in terms of a quantum dynamical semigroup.

We first introduce the concept of a dynamical map. To this end, let us suppose that we are able to prepare at the initial time $t = 0$ the state of the total system $S + B$ as an uncorrelated product state $\rho(0) = \rho_S(0) \otimes \rho_B$, where $\rho_S(0)$ is the initial state of the reduced system S and ρ_B represents some reference state of the environment, a thermal equilibrium state, for example. The transformation describing the change of the reduced system from the initial time $t = 0$ to some time $t > 0$ may then be written in the form

$$\rho_S(0) \mapsto \rho_S(t) = V(t)\rho_S(0) \equiv \text{tr}_B \{U(t, 0) [\rho_S(0) \otimes \rho_B] U^\dagger(t, 0)\}. \quad (3.38)$$

If we regard the reference state ρ_B and the final time t to be fixed, this relation defines a map from the space $\mathcal{S}(\mathcal{H}_S)$ of density matrices of the reduced system into itself,

$$V(t) : \mathcal{S}(\mathcal{H}_S) \longrightarrow \mathcal{S}(\mathcal{H}_S). \quad (3.39)$$

This map, describing the state change of the open system over time t , is called a dynamical map (see Fig. 3.2).

$$\begin{array}{ccc} \rho(0) = \rho_S(0) \otimes \rho_B & \xrightarrow{\text{unitary evolution}} & \rho(t) = U(t, 0) [\rho_S(0) \otimes \rho_B] U^\dagger(t, 0) \\ \text{tr}_B \downarrow & & \text{tr}_B \downarrow \\ \rho_S(0) & \xrightarrow{\text{dynamical map}} & \rho_S(t) = V(t)\rho_S(0) \end{array}$$

FIG. 3.2. A commutative diagram showing the action of a dynamical map $V(t)$.

A dynamical map can be characterized completely in terms of operators pertaining to the open system's Hilbert space $\mathcal{H}_S$. To this end, we use the spectral decomposition of the density matrix ρ_B of the environment,

$$\rho_B = \sum_{\alpha} \lambda_{\alpha} |\varphi_{\alpha}\rangle \langle \varphi_{\alpha}|. \quad (3.40)$$

Here, the $|\varphi_{\alpha}\rangle$ form an orthonormal basis in $\mathcal{H}_B$ and the λ_{α} are non-negative real numbers satisfying $\sum_{\alpha} \lambda_{\alpha} = 1$. Definition (3.38) then immediately yields the following representation,

$$V(t)\rho_S = \sum_{\alpha, \beta} W_{\alpha\beta}(t) \rho_S W_{\alpha\beta}^\dagger(t), \quad (3.41)$$

where the $W_{\alpha\beta}$, being operators in $\mathcal{H}_S$, are defined by

$$W_{\alpha\beta}(t) = \sqrt{\lambda_\beta} \langle \varphi_\alpha | U(t, 0) | \varphi_\beta \rangle. \quad (3.42)$$

According to eqn (3.41) the dynamical map $V(t)$ is of the form (2.157) of an operation Φ_m describing a generalized quantum measurement.

(????? why???? TODO: read sect. 2)

Moreover, the operators $W_{\alpha\beta}(t)$ satisfy the condition

$$\sum_{\alpha, \beta} W_{\alpha\beta}^\dagger(t) W_{\alpha\beta}(t) = I_S \quad (3.43)$$

from which we deduce that

$$\text{tr}_S \{V(t) \rho_S\} = \text{tr}_S \rho_S = 1 \quad (3.44)$$

Thus, we conclude that a dynamical map $V(t)$ represents a convex-linear, completely positive and trace-preserving quantum operation.

We have introduced above a dynamical map $V(t)$ for a fixed time $t \geq 0$. If we now allow t to vary we get a one-parameter family $\{V(t) | t \geq 0\}$ of dynamical maps, where $V(0)$ is the identity map. Such a family describes the whole future time evolution of the open system, which, in general, could be very involved. However, if the characteristic time scales over which the reservoir correlation functions decay are much smaller than the characteristic time scale of the systematic system evolution, it is justified to neglect memory effects in the reduced system dynamics. As in the classical theory one thus expects Markovian-type behaviour. For the homogeneous case the latter may be formalized with the help of the semigroup property (compare with eqn (1.70))

$$V(t_1) V(t_2) = V(t_1 + t_2), \quad t_1, t_2 \geq 0 \quad (3.45)$$

The precise physical conditions underlying the Markovian approximation will be given in the microscopic derivations of Markovian quantum master equations (see Sections 3.3 and 3.4). A systematic investigation and an expansion around the Markovian limit is postponed to Part IV. Summarizing, a quantum dynamical semigroup is a continuous, one-parameter family of dynamical maps satisfying the semigroup property (3.45).

9.3.2 3.2.2 The Markovian quantum master equation

Idea and derivation

Given a quantum dynamical semigroup there exists, under certain mathematical conditions (see below), a linear map $\mathcal{L}$, the generator of the semigroup, which allows us to represent the semigroup in exponential form,

$$V(t) = \exp(\mathcal{L}t) \quad (3.46)$$

This representation immediately yields a first-order differential equation for the reduced density matrix of the open system,

$$\frac{d}{dt} \rho_S(t) = \mathcal{L} \rho_S(t) \quad (3.47)$$

which is called the Markovian quantum master equation. The generator $\mathcal{L}$ of the semigroup represents a super-operator. It may be regarded as a generalization of the Liouville super-operator which has been introduced in eqn (3.11) and which is given by the commutator with some Hamiltonian.

Let us construct the most general form for the generator $\mathcal{L}$ of a quantum dynamical semigroup. To this end, we consider first the simple case of a finitedimensional Hilbert space $\mathcal{H}_S$, $\dim \mathcal{H}_S = N$. The corresponding Liouville space is a complex space of dimension N^2 and we choose a complete basis (see eqn (2.97)) of orthonormal operators $F_i, i = 1, 2, \dots, N^2$, in this space such that we have

$$(F_i, F_j) \equiv \text{tr}_S \{F_i^\dagger F_j\} = \delta_{ij}. \quad (3.48)$$

For convenience one of the basis operators is chosen to be proportional to the identity, namely $F_{N^2} = (1/N)^{1/2} I_S$, such that the other basis operators are traceless, that is $\text{tr}_S F_i = 0$ for $i = 1, 2, \dots, N^2 - 1$. Applying the completeness relation to each of the operators $W_{\alpha\beta}(t)$ defined in eqn (3.42), we have

$$W_{\alpha\beta}(t) = \sum_{i=1}^{N^2} F_i (F_i, W_{\alpha\beta}(t)) \quad (3.49)$$

(???? how these F look like???)

With the help of the representation (3.41) we can write the action of the dynamical map $V(t)$ as

$$V(t)\rho_S = \sum_{i,j=1}^{N^2} c_{ij}(t) F_i \rho_S F_j^\dagger \quad (3.50)$$

where

$$c_{ij}(t) \equiv \sum_{\alpha\beta} (F_i, W_{\alpha\beta}(t)) (F_j, W_{\alpha\beta}(t))^*. \quad (3.51)$$

The coefficient matrix $c = (c_{ij})$ is easily seen to be Hermitian and positive. In fact, for any N^2 -dimensional complex vector v we have

$$\sum_{ij} c_{ij} v_i^* v_j = \sum_{\alpha\beta} \left| \left(\sum_i v_i F_i, W_{\alpha\beta}(t) \right) \right|^2 \geq 0, \quad (3.52)$$

which proves that $c \geq 0$.

The definition (3.46) of the generator $\mathcal{L}$ now gives, by virtue of eqn (3.50),

$$\begin{aligned} \mathcal{L}\rho_S &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\varepsilon} \{V(\varepsilon)\rho_S - \rho_S\} \\ &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left\{ \frac{1}{N} \frac{c_{N^2 N^2}(\varepsilon) - N}{\varepsilon} \rho_S + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=1}^{N^2-1} \left(\frac{c_{i N^2}(\varepsilon)}{\varepsilon} F_i \rho_S + \frac{c_{N^2 i}(\varepsilon)}{\varepsilon} \rho_S F_i^\dagger \right) + \sum_{i,j=1}^{N^2-1} \frac{c_{ij}(\varepsilon)}{\varepsilon} F_i \rho_S F_j^\dagger \right\} \end{aligned} \quad (3.53)$$

Next, we define coefficients a_{ij} , introduce the quantities F and G as well as the Hermitian operator H :

$$\begin{aligned} a_{N^2 N^2} &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{c_{N^2 N^2}(\varepsilon) - N}{\varepsilon}, & F &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=1}^{N^2-1} a_{i N^2} F_i \\ a_{i N^2} &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{c_{i N^2}(\varepsilon)}{\varepsilon}, \quad i = 1, \dots, N^2 - 1, & G &= \frac{1}{2N} a_{N^2 N^2} I_S + \frac{1}{2} (F^\dagger + F), \\ a_{ij} &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{c_{ij}(\varepsilon)}{\varepsilon}, \quad i, j = 1, \dots, N^2 - 1, & H &= \frac{1}{2i} (F^\dagger - F). \end{aligned}$$

We note that the matrix formed by the coefficients a_{ij} , $i, j = 1, 2, \dots, N^2 - 1$, is Hermitian and positive. With the help of these definitions we can write the generator as

$$\mathcal{L}\rho_S = -i[H, \rho_S] + \{G, \rho_S\} + \sum_{i,j=1}^{N^2-1} a_{ij} F_i \rho_S F_j^\dagger. \quad (3.60)$$

Since the semigroup is trace preserving we have for all density matrices ρ_S

$$0 = \text{tr}_S \{\mathcal{L}\rho_S\} = \text{tr}_S \left\{ \left(2G + \sum_{i,j=1}^{N^2-1} a_{ij} F_j^\dagger F_i \right) \rho_S \right\}, \quad (3.61)$$

from which we deduce that

$$G = -\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{N^2-1} a_{ij} F_j^\dagger F_i. \quad (3.62)$$

Hence, we get from (3.60) the first standard form of the generator,

$$\mathcal{L}\rho_S = -i[H, \rho_S] + \sum_{i,j=1}^{N^2-1} a_{ij} \left(F_i \rho_S F_j^\dagger - \frac{1}{2} \{F_j^\dagger F_i, \rho_S\} \right). \quad (3.63)$$

Since the coefficient matrix $a = (a_{ij})$ is positive it may be diagonalized with the help of an appropriate unitary transformation u ,

$$uau^\dagger = \begin{pmatrix} \gamma_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \gamma_2 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & \gamma_{N^2-1} \end{pmatrix} \quad (3.64)$$

where the eigenvalues γ_i are non-negative. Introducing a new set of operators A_k through

$$F_i = \sum_{k=1}^{N^2-1} u_{ki} A_k, \quad (3.65)$$

the following diagonal form of the generator is obtained

$$\mathcal{L}\rho_S = -i[H, \rho_S] + \sum_{k=1}^{N^2-1} \gamma_k \left(A_k \rho_S A_k^\dagger - \frac{1}{2} A_k^\dagger A_k \rho_S - \frac{1}{2} \rho_S A_k^\dagger A_k \right). \quad (3.66)$$

This is the most general form for the generator of a quantum dynamical semigroup. The first term of the generator represents the unitary part of the dynamics generated by the Hamiltonian H . The operators A_k , introduced above as appropriate linear combinations of the basis

operators F_i in Liouville space, are usually referred to as Lindblad operators and the corresponding density matrix equation (3.47) is called the Lindblad equation. We note that the non-negative quantities γ_k have the dimension of an inverse time provided the A_k are taken to be dimensionless. As will be seen later the γ_k are given in terms of certain correlation functions of the environment and play the role of relaxation rates for the different decay modes of the open system.

The detailed mathematical proof that (3.63) defines the most general generator of a quantum dynamical semigroup for the case of a finite-dimensional Hilbert space has been given by Gorini, Kossakowski, and Sudarshan (1976). At the same time Lindblad (1976) proved in a theorem that bears his name that (3.66) provides the most general form for a bounded generator in a separable Hilbert space if the index k is allowed to run over a countable set. In the physics literature quantum master equations of the form (3.63) or (3.66) appeared much earlier, for example in the context of spin relaxation dynamics and laser theory (see, e.g. Bausch, 1966; Haake, 1973; Haken, 1984). We emphasize that the Lindblad theorem presupposes that the generator $\mathcal{L}$ is bounded. In physical applications this is usually not the case: The self-Hamiltonian H_S of the reduced system as well as the Lindblad operators are, in general, unbounded. However, all known examples for generators of quantum dynamical semigroups are either of Lindblad form, or can be cast into it by slight modifications.

Mathematical details of the derivation

In the above presentation we have left out all mathematical details. Let us make, however, a few remarks on the mathematical theory (for a review see, e.g. Gorini, Frigerio, Verri, Kossakowski and Sudarshan, 1978; Spohn, 1980; Alicki and Lendi, 1987). First, we mention that the theory of quantum dynamical semigroups is usually formulated in terms of the Heisenberg, instead of the Schrödinger picture. To this end, one characterizes dynamical maps in the Heisenberg picture. The Heisenberg picture dynamical map will be denoted by $V^\dagger(t)$ and acts on operators A in the Hilbert space $\mathcal{H}_S$ of the open system such that we have

$$\mathrm{tr}_S \{A(V(t)\rho_S)\} = \mathrm{tr}_S \{(V^\dagger(t)A)\rho_S\} \quad (3.67)$$

for all ρ_S . Since we know that $V(t)$ maps density matrices to density matrices, the Heisenberg picture map $V^\dagger(t)$ should also transform positive operators into positive operators and must preserve the identity operator, that is $V^\dagger(t)I_S = I_S$. If the mathematical theory is based on an axiomatic approach to dynamical maps one has to demand not only positivity but the stronger condition of complete positivity (see Section 2.4.3). However, from a physical point of view the additional requirement of complete positivity does not introduce a new condition if dynamical maps are introduced, as we have done above, through the reduced dynamics induced by the unitary dynamics in a larger system $S + B$.

We have also required the one-parameter family of dynamical maps $V(t)$ to be continuous. It can be shown that it suffices to demand ultraweak continuity, which means that we must have

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \mathrm{tr}_S \{(V^\dagger(\varepsilon)A - A)\rho_S\} = 0 \quad (3.68)$$

for all ρ_S and all bounded operators A . It can be shown further that quantum dynamical semigroups always have the property of being contracting, that is they fulfill the condition

$$\|V(t)^\dagger A\|_1 \leq \|A\|_1, \quad (3.69)$$

where $\|A\|_1 = \mathrm{tr}_S |A|$ is known as the trace norm. It is this property which allows the application of the theory of contracting semigroups and enables the introduction of the infinitesimal generator $\mathcal{L}$.

It is sometimes convenient to introduce the dissipator

$$\mathcal{D}(\rho_S) \equiv \sum_k \gamma_k \left(A_k \rho_S A_k^\dagger - \frac{1}{2} A_k^\dagger A_k \rho_S - \frac{1}{2} \rho_S A_k^\dagger A_k \right) \quad (3.70)$$

and to write the quantum master equation (3.47) in the form

$$\frac{d}{dt} \rho_S(t) = -i [H, \rho_S(t)] + \mathcal{D}(\rho_S(t)) \quad (3.71)$$

We remark that, in general, the operator H cannot be identified with the free Hamiltonian H_S of the reduced system S : The Hamiltonian H may contain additional terms which are due to the coupling of the system to its environment (see Section 3.3.1 for an example). We also note that the generator $\mathcal{L}$ does not uniquely fix the form of the Hamiltonian H and the Lindblad operators A_i . In fact, the generator is invariant under the following transformations:

1. unitary transformations of the set of Lindblad operators,

$$\sqrt{\gamma_i} A_i \longrightarrow \sqrt{\gamma'_i} A'_i = \sum_j u_{ij} \sqrt{\gamma_j} A_j \quad (3.72)$$

where u_{ij} is a unitary matrix,

2. inhomogeneous transformations

$$\begin{aligned} A_i &\longrightarrow A'_i = A_i + a_i \\ H &\longrightarrow H' = H + \frac{1}{2i} \sum_j \gamma_j (a_j^* A_j - a_j A_j^\dagger) + b, \end{aligned} \quad (3.73)$$

where the a_i are complex numbers and b is real.

Because of the second invariance property it is always possible to choose traceless Lindblad operators.

As we already noticed the open system may be subjected to an external time-dependent field. The description of such an open system may require the help of time-dependent generators. An obvious time-dependent generalization of (3.47) may be written in the form

$$\frac{d}{dt} \rho_S(t) = \mathcal{L}(t) \rho_S(t) \quad (3.74)$$

where $\mathcal{L}(t)$ is the generator of a quantum dynamical semigroup for each fixed $t \geq 0$. Let us introduce the corresponding propagator by means of

$$V(t, t_0) = T_{\leftarrow} \exp \left(\int_{t_0}^t ds \mathcal{L}(s) \right) \quad (3.75)$$

which satisfies

$$\frac{\partial}{\partial t} V(t, t_0) = \mathcal{L}(t) V(t, t_0) \quad (3.76)$$

Instead of the semigroup property (3.45) we now have

$$V(t, t_1) V(t_1, t_0) = V(t, t_0). \quad (3.77)$$

We study Lindblad generators with time-dependent external fields in Section 8.4.

9.3.3 Physical Origin of Lindblad Operators

(???? answer here, to which physical properties Lindblad operators correspond???? a very important question.)

9.3.4 How to Chose Lindblad Operators for a Particular Dissipation

Method from “Thermalization at low temperatures via weakly damped multisite baths” by Zanoci, Yoo, Swingle

(???????????? write, how they did it?)

What if some Lindblad operator gives strange result or errors in codes that compute dynamics by it?

(elaborate how the problem exactly look like???)

The solution is to take another operator.

(???? why some systems with some Lindblads that have physical sense are broken? I don't know. But this is how it works. It can just happen and we just say that the model is just unphysical)

Other about construction of Lindblad operators

Idea of cutoff in the Lindblad operator

It is a failed idea. I checked, I thought that it works, but turns out that it is not that useful.

(I'll explain in details, how why is it so???)

(??? but it is an interesting idea, so maybe there is a physical sense in it also???)

9.3.5 Lindblad Operators: Other Properties

Examples of Lindblad Operators

(just 1-2 page about what could they be?)

Detailed balance in Lindblad Operators

(write how is it?)

9.3.6 3.2.3 The adjoint quantum master equation

In full analogy to closed quantum systems, also for open quantum systems it is possible to define for each system operator A in the Schrödinger picture a corresponding operator $A_H(t)$ in the Heisenberg picture. This is achieved with the help of eqn (3.67) which we rewrite as

$$\mathrm{tr}_S \{AV(t, 0)\rho_S\} = \mathrm{tr}_S \{(V^\dagger(t, 0)A) \rho_S\} = \mathrm{tr}_S \{A_H(t)\rho_S\} \quad (3.78)$$

where we allow the Lindblad generator to be time dependent. In analogy to eqn (3.75) we have introduced the adjoint propagator

$$V^\dagger(t, t_0) = T_{\rightarrow} \exp \left(\int_{t_0}^t ds \mathcal{L}^\dagger(s) \right) \quad (3.79)$$

The symbol $T_{\rightarrow}$ denotes the antichronological time-ordering operator, while the adjoint generator $\mathcal{L}^\dagger$ is defined by

$$\mathrm{tr}_S \{A\mathcal{L}(t)\rho_S\} = \mathrm{tr}_S \{(\mathcal{L}^\dagger(t)A)\rho_S\} \quad (3.80)$$

The adjoint propagator $V^\dagger(t, t_0)$ satisfies the differential equation

$$\frac{\partial}{\partial t} V^\dagger(t, t_0) = V^\dagger(t, t_0) \mathcal{L}^\dagger(t), \quad (3.81)$$

and describes the time evolution of operators in the Heisenberg picture,

$$A_H(t) = V^\dagger(t, 0)A \quad (3.82)$$

This yields the following equation of motion for the Heisenberg operator $A_H(t)$,

$$\frac{d}{dt} A_H(t) = V^\dagger(t, 0) \{ \mathcal{L}^\dagger(t)A \} \quad (3.83)$$

which is known as the adjoint master equation.

Notice that on the right-hand side of eqn (3.83) the adjoint Lindblad operator first acts on the operator A and then the result is propagated with the help of the adjoint propagator. In order to determine the form of the equation of motion at time t knowledge of the Heisenberg operator $A_H(t)$ is not sufficient; one also needs the adjoint propagator, in general.

An important special case is obtained if the Lindblad generator does not depend explicitly on time, as is the case in eqn (3.66). In this case the adjoint Lindblad generator $\mathcal{L}^\dagger$ commutes with $V^\dagger(t, 0)$ and the adjoint quantum master equation takes the simpler form

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} A_H(t) &= \mathcal{L}^\dagger A_H(t) \\ &= i[H, A_H(t)] + \sum_k \gamma_k \left(A_k^\dagger A_H(t) A_k - \frac{1}{2} A_H(t) A_k^\dagger A_k - \frac{1}{2} A_k^\dagger A_k A_H(t) \right) \end{aligned} \quad (3.84)$$

Now, the right-hand side of the adjoint master equation only depends on the Heisenberg operator $A_H(t)$ at time t . An example of the use of the adjoint master equation will be discussed in Section 3.4.6.

9.3.7 3.2.4 Multi-time correlation functions

The quantum master equation (3.47) and the adjoint master equation (3.83) describe the time evolution of the density matrix and of the Heisenberg picture operators. With their help we can determine expectation values and matrix elements of all system observables. However, it is important to be aware of the fact that for open quantum systems these are not the only observable quantities. A complete statistical description also requires knowledge of mean values of operators taken at different times, that is of multi-time correlations functions. In physical applications these are of great interest since they are often directly related to measurable quantities. A typical example is provided by a radiation mode $a(t)$ of the electromagnetic field. In this case one might be interested in the fluctuation spectrum which is defined in terms of the Fourier transform of the two-time correlation function $\langle a^\dagger(t)a(0) \rangle$.

To begin with, we first consider a two-time correlation function of the form

$$g(t, s) \equiv \langle B(t)C(s) \rangle = \mathrm{tr}_S \{B(t)C(s)\rho_S(0)\} \quad (3.85)$$

where $t > s \geq 0$. Suppressing for simplicity the index H we write $B(t)$ and $C(t)$ for arbitrary Heisenberg operators, where we take the fixed initial time $t_0 = 0$. On using the propagator of the quantum master equation we can write eqn (3.85) as follows,

$$g(t, s) = \text{tr}_S \{BV(t, s)CV(s, 0)\rho_S(0)\}, \quad (3.86)$$

where B and C are Schrödinger picture operators. We use here and in the following the convention that the super-operators $V(t, s)$ always act on anything standing to the right of them. Equation (3.86) thus means that, in order to calculate the two-time correlation function, one propagates the density matrix $\rho_S(0)$ from time 0 to time s , applies from the left the operator C , propagates the new 'density matrix' $C\rho_S(s)$ from time s to time t , and, finally, applies B from the left and takes the trace over $\mathcal{H}_S$.

This result is easily generalized to the most general form of a measurable multi-time correlation function which is given by (Gardiner and Zoller, 2000; Gardiner and Collett, 1985)

$$\begin{aligned} g(t_1, t_2, \dots, t_n; s_1, s_2, \dots, s_m) \\ \equiv \langle B_1(s_1) B_2(s_2) \dots B_m(s_m) C_n(t_n) \dots C_2(t_2) C_1(t_1) \rangle \\ = \text{tr}_S \{C_n(t_n) \dots C_2(t_2) C_1(t_1) \rho_S(0) B_1(s_1) B_2(s_2) \dots B_m(s_m)\} \end{aligned} \quad (3.87)$$

Here, the $B_j(s_j)$, $j = 1, \dots, m$, and the $C_i(t_i)$, $i = 1, \dots, n$, are arbitrary Heisenberg operators and the s_j and t_i are ordered in time such that

$$t_n > t_{n-1} > \dots > t_1 \geq 0, \quad s_m > s_{m-1} > \dots > s_1 \geq 0 \quad (3.88)$$

In order to bring the multi-time correlation function into a form analogous to (3.86) we perform a time ordering of the set $\{t_1, t_2, \dots, t_n, s_1, s_2, \dots, s_m\}$. Note that the number q of elements of this set may be smaller than $n + m$ since we allow the possibility that $t_i = s_j$ for certain indices i, j . We denote the time-ordered elements by r_l , $l = 1, 2, \dots, q$. Thus we have

$$r_q > r_{q-1} > \dots > r_1 \geq 0 \quad (3.89)$$

For each l we define a super-operator $\mathcal{F}_l$ through

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_l \rho &= C_i \rho && \text{if } r_l = t_i \neq s_j \quad \text{for some } i \quad \text{and all } j, \\ \mathcal{F}_l \rho &= \rho B_j && \text{if } r_l = s_j \neq t_i \quad \text{for some } j \quad \text{and all } i, \\ \mathcal{F}_l \rho &= C_i \rho B_j && \text{if } r_l = t_i = s_j \quad \text{for some } i \quad \text{and } j. \end{aligned}$$

Then we have

$$\begin{aligned} g(t_1, t_2, \dots, t_n; s_1, s_2, \dots, s_m) \\ = \text{tr}_S \{ \mathcal{F}_q V(r_q, r_{q-1}) \mathcal{F}_{q-1} V(r_{q-1}, r_{q-2}) \dots \mathcal{F}_1 V(r_1, 0) \rho_S(0) \} \end{aligned} \quad (3.91)$$

This equation provides a general expression for all time-ordered multi-time correlation functions in terms of the propagator of the underlying quantum Markovian master equation.

In practical applications it is often useful to formulate the dynamics of correlation functions in terms of a system of differential equations. Suppose we have a set of system operators $\{B_i\}$ such that the Markovian master equation (3.47) gives rise to a closed linear system of first-order differential equations for their averages,

$$\frac{d}{dt} \langle B_i(t) \rangle = \sum_j G_{ij} \langle B_j(t) \rangle \quad (3.92)$$

with some coefficient matrix G_{ij} . The two-point correlation function then satisfies the same system of differential equations,

$$\frac{d}{d\tau} \langle B_i(t+\tau) B_l(t) \rangle = \sum_j G_{ij} \langle B_j(t+\tau) B_l(t) \rangle \quad (3.93)$$

This statement is known as the quantum regression theorem (Lax, 1963; Gardiner and Zoller, 2000). To prove it we first write

$$\frac{d}{dt} \langle B_i(t) \rangle = \text{tr}_S \{ (\mathcal{L}^\dagger B_i) \rho_S(t) \} = \text{tr}_S \left\{ \left(\sum_j G_{ij} B_j \right) \rho_S(t) \right\} \quad (3.94)$$

Since this is supposed to hold, in particular, for any initial density $\rho_S(0)$ we conclude that

$$\mathcal{L}^\dagger B_i = \sum_j G_{ij} B_j \quad (3.95)$$

Hence we obtain

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\tau} \langle B_i(t+\tau) B_l(t) \rangle &= \text{tr}_S \{ (\mathcal{L}^\dagger B_i) V(t+\tau, t) B_l \rho_S(t) \} \\ &= \sum_j G_{ij} \langle B_j(t+\tau) B_l(t) \rangle \end{aligned} \quad (3.96)$$

which was to be shown. The significance of the quantum regression theorem derives from the fact that it allows us to determine explicit expressions for the correlation functions once a solution for the mean values is known. An example will be discussed in Section 3.4.5.

9.3.8 3.2.5 Irreversibility and entropy production

The quantum Markovian master equation (3.47) describes the irreversible evolution of an open quantum system. In order to discuss in some detail the irreversible character of quantum dynamical semigroups we shall derive in this section a general expression for the entropy production rate σ in an open quantum system which admits a stationary state and show that it is always non-negative.

To begin with, we consider an arbitrary dynamical map $V(t)$ and investigate the change of the relative entropy $S(\rho \| \rho_0)$ of two states ρ, ρ_0 of S which is induced by $V(t)$ (Lindblad, 1975). Representing $V(t)$ as in eqn (3.38) and employing eqns (2.116) and (2.119) and the inequality (2.118) we find ⁷

$$\begin{aligned} S(V(t)\rho \| V(t)\rho_0) &= S(\text{tr} \{ U(t, 0) \rho \otimes \rho_B U^\dagger(t, 0) \} \| \text{tr} \{ U(t, 0) \rho_0 \otimes \rho_B U^\dagger(t, 0) \}) \\ &\leq S(U(t, 0) \rho \otimes \rho_B U^\dagger(t, 0) \| U(t, 0) \rho_0 \otimes \rho_B U^\dagger(t, 0)) \\ &= S(\rho \otimes \rho_B \| \rho_0 \otimes \rho_B) \\ &= S(\rho \| \rho_0). \end{aligned} \quad (3.97)$$

Let us suppose that ρ_0 is a stationary state of S , that is $V(t)\rho_0 = \rho_0$. We can then conclude that a dynamical map $V(t)$ decreases the relative entropy with respect to a stationary state,

$$S(V(t)\rho \| \rho_0) \leq S(\rho \| \rho_0) \quad (3.98)$$

If now $V(t) = \exp \mathcal{L}t$ is a dynamical semigroup it follows from inequality (3.98) that the negative time derivative of the relative entropy is positive, that is we have the inequality

$$\sigma(\rho(t)) \equiv -\frac{d}{dt} S(\rho(t) \parallel \rho_0) \geq 0 \quad (3.99)$$

where $\rho(t) = V(t)\rho(0)$. Invoking arguments from non-equilibrium thermodynamics we may interpret the functional $\sigma(\rho)$ as the entropy production rate (see below). The definition of the relative entropy functional, eqn (2.113), leads to the explicit expression

$$\sigma(\rho) = -k_B \operatorname{tr}\{\mathcal{L}(\rho) \ln \rho\} + k_B \operatorname{tr}\{\mathcal{L}(\rho) \ln \rho_0\} \geq 0. \quad (3.100)$$

Note that we have included here the Boltzmann constant k_B into the definition of the entropy.

Equation (3.100) shows that the entropy production is non-negative and vanishes in a stationary state. With the help of Lieb's theorem (see eqn (2.120)) we can prove even more, namely that the map $\rho \mapsto \sigma(\rho)$ is a convex functional on the state space of the open system (Spohn, 1978). To see this we first observe

that the second term in expression (3.100) is a linear functional. Thus, it suffices to show that the map

$$\rho \mapsto -k_B \operatorname{tr}\{\mathcal{L}(\rho) \ln \rho\} \quad (3.101)$$

is a convex functional. Employing the general form (3.66) of the generator $\mathcal{L}$ this map takes the form

$$\rho \mapsto -k_B \sum_k \gamma_k \operatorname{tr}\left\{\left(A_k \rho A_k^\dagger - A_k^\dagger A_k \rho\right) \ln \rho\right\}. \quad (3.102)$$

The convexity of the entropy production functional $\sigma(\rho)$ now follows immediately from the convexity of the map (2.126).

Let us motivate the definition (3.100) for the entropy production rate by using arguments from non-equilibrium thermodynamics. To this end, we suppose that the canonical equilibrium distribution (Gibbs state)

$$\rho_{\text{th}} = \frac{1}{Z} \exp(-\beta H) \quad (3.103)$$

is a stationary solution of the master equation. This means that $\mathcal{L}(\rho_{\text{th}}) = \mathcal{D}(\rho_{\text{th}}) = 0$, where $\mathcal{D}$ denotes the dissipator of the quantum master equation (see eqns (3.70) and (3.71)). The normalization factor $Z = \operatorname{tr} \exp(-\beta H)$ is the partition function and

$$\beta \equiv \frac{1}{k_B T} \quad (3.104)$$

is the inverse temperature. The precise physical conditions underlying this assumption will be discussed later.

In non-equilibrium thermodynamics the entropy obeys a balance equation which can be written in the form

$$\sigma = \frac{dS}{dt} + J \quad (3.105)$$

Here, S is the von Neumann entropy (see Section 2.3.1) of the open system. The quantity J denotes the entropy flux, that is the amount of entropy which is exchanged per unit of time between the open system and its environment, where we use the convention that for $J > 0$ entropy flows from the open system into the environment. Consequently, the quantity σ is the entropy production rate, that is the amount of entropy produced per unit of time as a result of irreversible processes.

⁰⁷ To simplify the notation we omit the index S on quantities of the reduced system.

The time derivative of the von Neumann entropy is easily evaluated to be

$$\frac{dS}{dt} = -k_B \operatorname{tr}\{\mathcal{L}(\rho) \ln \rho\} \quad (3.106)$$

On the other hand, the entropy flux J is due to those changes of the internal energy $E = \operatorname{tr}\{H\rho\}$ which result from dissipative effects. Thus we may define the entropy flux by means of

$$J = - \left. \frac{1}{T} \frac{d}{dt} \right|_{\text{diss}} E \equiv - \frac{1}{T} \operatorname{tr}\{H\mathcal{D}(\rho)\} = - \frac{1}{T} \operatorname{tr}\{H\mathcal{L}(\rho)\} \quad (3.107)$$

Using the explicit expression (3.103) for the thermal distribution we find

$$-\frac{1}{T}H = k_B \ln \rho_{\text{th}} + k_B \ln Z, \quad (3.108)$$

so that the entropy flow can be written as

$$J = k_B \operatorname{tr}\{\mathcal{L}(\rho) \ln \rho_{\text{th}}\} \quad (3.109)$$

where we have made use of the fact that the generator is trace-preserving, i.e. $\operatorname{tr}\{\mathcal{L}(\rho)\} = 0$. Adding eqns (3.106) and (3.109) we see that the thermodynamic entropy production rate σ defined by the balance equation (3.105) coincides with expression (3.100) for the negative rate of change of the relative entropy with respect to the thermal equilibrium state. In this context the inequality $\sigma(\rho) \geq 0$ expresses the second law of thermodynamics. Note also that $\sigma(\rho_{\text{th}}) = 0$, that is the entropy production vanishes in the thermal equilibrium state. Thus we conclude that the entropy production rate $\sigma(\rho)$ is a convex functional on the space of density matrices which vanishes in the thermal equilibrium state.

9.4 3.3 Microscopic derivations

From a fundamental viewpoint it is desirable to derive the generator of a quantum dynamical semigroup from the underlying Hamiltonian dynamics of the total system. The aim of this section is to show under which assumptions such derivations can be given on the grounds of various approximation schemes.

9.4.1 3.3.1 Weak-coupling Limit

We begin by considering a quantum mechanical system S weakly coupled to a reservoir B . The Hamiltonian of the total system is assumed to be of the form

$$H = H_S + H_B + H_I \quad (3.110)$$

where H_S and H_B denote respectively the free Hamiltonian of the system and of the reservoir and H_I describes the interaction between the system and the reservoir. The derivation of a quantum Markovian master equation is most easily performed in the interaction picture. Our starting point is thus the interaction picture von Neumann equation (see Section 3.1.2)

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = -i [H_I(t), \rho(t)] \quad (3.111)$$

for the total density matrix $\rho(t)$ and its integral form

$$\rho(t) = \rho(0) - i \int_0^t ds [H_I(s), \rho(s)]. \quad (3.112)$$

Note that we omit here for ease of notation the index I which served to indicate the interaction picture in Section 3.1.2. Inserting the integral form into (3.111) and taking the trace over the reservoir we find

$$\frac{d}{dt}\rho_S(t) = - \int_0^t ds \operatorname{tr}_B [H_I(t), [H_I(s), \rho(s)]] . \quad (3.113)$$

Here, we have assumed that

$$\operatorname{tr}_B [H_I(t), \rho(0)] = 0. \quad (3.114)$$

Equation (3.113) still contains the density matrix of the total system $\rho(t)$ on its right-hand side. In order to eliminate $\rho(t)$ from the equation of motion we perform a first approximation, known as the Born approximation. This approximation assumes that the coupling between the system and the reservoir is weak, such that the influence of the system on the reservoir is small (weak-coupling approximation). Thus, the density matrix of the reservoir ρ_B is only negligibly affected by the interaction and the state of the total system at time t may be approximately characterized by a tensor product

$$\rho(t) \approx \rho_S(t) \otimes \rho_B \quad (3.115)$$

We emphasize that this does not imply that there are no excitations in the reservoir caused by the reduced system. The Markovian approximation to be derived below provides a description on a coarse-grained time scale and the assumption is that environmental excitations decay over times which are not resolved. Inserting the tensor product into the exact equation of motion (3.113) we obtain a closed integro-differential equation for the reduced density matrix $\rho_S(t)$

$$\frac{d}{dt}\rho_S(t) = - \int_0^t ds \operatorname{tr}_B [H_I(t), [H_I(s), \rho_S(s) \otimes \rho_B]] . \quad (3.116)$$

In order to simplify the above equation further we perform the Markov approximation, in which the integrand $\rho_S(s)$ is first replaced by $\rho_S(t)$. In this way we obtain an equation of motion for the reduced system's density matrix in which the time development of the state of the system at time t only depends on the present state $\rho_S(t)$,

$$\frac{d}{dt}\rho_S(t) = - \int_0^t ds \operatorname{tr}_B [H_I(t), [H_I(s), \rho_S(t) \otimes \rho_B]] \quad (3.117)$$

This equation is called the Redfield equation (Redfield, 1957; Blum, 1981).

The Redfield equation is local in time, but it is not yet a Markovian master equation since the time evolution of the reduced density matrix still depends upon an explicit choice for the initial preparation at time $t = 0$. This implies that the dynamics of the reduced system is not yet described by a dynamical semigroup. In order to achieve this we substitute s by $t - s$ in the integral in eqn (3.117) and let the upper limit of the integral go to infinity. This is permissible provided the integrand disappears sufficiently fast for $s \gg \tau_B$. The Markov approximation is therefore justified if the time scale τ_R over which the state of the system varies appreciably is large compared to the time scale τ_B over which the reservoir correlation functions decay. Thus, we finally obtain the Markovian quantum master equation

$$\frac{d}{dt}\rho_S(t) = - \int_0^\infty ds \operatorname{tr}_B [H_I(t), [H_I(t - s), \rho_S(t) \otimes \rho_B]] \quad (3.118)$$

It is important to realize that in a description of the reduced system dynamics on the basis of a Markovian quantum master equation the dynamical behaviour over times of the order of

magnitude of the correlation time τ_B is not resolved. As mentioned before, the evolution is described in this sense on a coarse-grained time axis.

The approximations performed above are usually termed the Born-Markov approximation. In general they do not guarantee, however, that the resulting equation (3.118) defines the generator of a dynamical semigroup (Davies, 1974; Dümcke and Spohn, 1979). One therefore performs a further secular approximation which involves an averaging over the rapidly oscillating terms in the master equation and is known as the rotating wave approximation. To explain the procedure let us write the Schrödinger picture interaction Hamiltonian H_I in the form

$$H_I = \sum_{\alpha} A_{\alpha} \otimes B_{\alpha}, \quad (3.119)$$

where $A_{\alpha}^{\dagger} = A_{\alpha}$ and $B_{\alpha}^{\dagger} = B_{\alpha}$. This is the most general form of the interaction. The secular approximation is easily carried out if one decomposes the interaction Hamiltonian H_I into eigenoperators of the system Hamiltonian H_S . Supposing the spectrum of H_S to be discrete this may be achieved as follows. Let us denote the eigenvalues of H_S by ε and the projection onto the eigenspace belonging to the eigenvalue ε by $\Pi(\varepsilon)$. Then we can define the operators

$$A_{\alpha}(\omega) \equiv \sum_{\varepsilon' - \varepsilon = \omega} \Pi(\varepsilon) A_{\alpha} \Pi(\varepsilon'). \quad (3.120)$$

The sum in this expression is extended over all energy eigenvalues ε' and ε of H_S with a fixed energy difference of ω . An immediate consequence of this definition is that the following relations are satisfied,

$$[H_S, A_{\alpha}(\omega)] = -\omega A_{\alpha}(\omega), \quad (3.121)$$

$$[H_S, A_{\alpha}^{\dagger}(\omega)] = +\omega A_{\alpha}^{\dagger}(\omega). \quad (3.122)$$

The operators $A_{\alpha}(\omega)$ and $A_{\alpha}^{\dagger}(\omega)$ are therefore said to be eigenoperators of H_S belonging to the frequencies $\pm\omega$, respectively. It follows from relations (3.121) and (3.122) that the corresponding interaction picture operators take the form

$$e^{iH_S t} A_{\alpha}(\omega) e^{-iH_S t} = e^{-i\omega t} A_{\alpha}(\omega) \quad (3.123)$$

$$e^{iH_S t} A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) e^{-iH_S t} = e^{+i\omega t} A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) \quad (3.124)$$

Finally, we note that

$$[H_S, A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) A_{\beta}(\omega)] = 0, \quad (3.125)$$

and

$$A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) = A_{\alpha}(-\omega). \quad (3.126)$$

Summing (3.120) over all energy differences and employing the completeness relation we get

$$\sum_{\omega} A_{\alpha}(\omega) = \sum_{\omega} A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) = A_{\alpha}. \quad (3.127)$$

This enables us to cast the interaction Hamiltonian into the following form

$$H_I = \sum_{\alpha, \omega} A_{\alpha}(\omega) \otimes B_{\alpha} = \sum_{\alpha, \omega} A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) \otimes B_{\alpha}^{\dagger}. \quad (3.128)$$

This is the desired decomposition of the interaction into eigenoperators of the system Hamiltonian. Note that the frequency spectrum $\{\omega\}$ is, in general, degenerate: For a fixed ω the index

α labels the different operators $A_\alpha(\omega)$ belonging to the same frequency. A specific example will be encountered in Section 3.4, where α labels the Cartesian components of the dipole operator.

The reason for introducing the eigenoperator decomposition (3.128) is that the interaction picture interaction Hamiltonian can now be written in the particularly simple form

$$H_I(t) = \sum_{\alpha, \omega} e^{-i\omega t} A_\alpha(\omega) \otimes B_\alpha(t) = \sum_{\alpha, \omega} e^{+i\omega t} A_\alpha^\dagger(\omega) \otimes B_\alpha^\dagger(t), \quad (3.129)$$

where

$$B_\alpha(t) = e^{iH_B t} B_\alpha e^{-iH_B t} \quad (3.130)$$

are interaction picture operators of the environment. We also note that condition (3.114) becomes

$$\langle B_\alpha(t) \rangle \equiv \text{tr} \{ B_\alpha(t) \rho_B \} = 0, \quad (3.131)$$

which states that the reservoir averages of the $B_\alpha(t)$ vanish.

Inserting now the form (3.129) into the master equation (3.118) we obtain after some algebra

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \rho_S(t) &= \int_0^\infty ds \text{tr}_B \{ H_I(t-s) \rho_S(t) \rho_B H_I(t) - H_I(t) H_I(t-s) \rho_S(t) \rho_B \} + \text{h.c.} \\ &= \sum_{\omega, \omega'} \sum_{\alpha, \beta} e^{i(\omega' - \omega)t} \Gamma_{\alpha\beta}(\omega) (A_\beta(\omega) \rho_S(t) A_\alpha^\dagger(\omega') - A_\alpha^\dagger(\omega') A_\beta(\omega) \rho_S(t)) + \text{h.c.} \end{aligned} \quad (3.132)$$

Here h.c. means the Hermitian conjugated expression and we have introduced the one-sided Fourier transforms

$$\Gamma_{\alpha\beta}(\omega) \equiv \int_0^\infty ds e^{i\omega s} \langle B_\alpha^\dagger(t) B_\beta(t-s) \rangle \quad (3.133)$$

of the reservoir correlation functions

$$\langle B_\alpha^\dagger(t) B_\beta(t-s) \rangle \equiv \text{tr}_B \{ B_\alpha^\dagger(t) B_\beta(t-s) \rho_B \}. \quad (3.134)$$

Let us suppose that ρ_B is a stationary state of the reservoir, that is $[H_B, \rho_B] = 0$. The reservoir correlation functions are then homogeneous in time which yields

$$\langle B_\alpha^\dagger(t) B_\beta(t-s) \rangle = \langle B_\alpha^\dagger(s) B_\beta(0) \rangle, \quad (3.135)$$

showing that the quantities $\Gamma_{\alpha\beta}(\omega)$ do not depend on time. We remark that there are interesting cases in which the reservoir correlation functions do depend on the time argument t . This happens, for example, if the reservoir represents a squeezed vacuum state (see Section 3.4.3).

As mentioned before, the basic condition underlying the Markov approximation is that the reservoir correlation functions (3.135) decay sufficiently fast over a time τ_B which is small compared to the relaxation time τ_R . Typical examples for the behaviour of these correlation functions will be discussed in Sections 3.6.2.1 and 12.1.1.3. It is important to note that a decay of the correlations can only be strictly valid for an environment which is infinitely large and involves a continuum of frequencies. In the typical situation the reservoir is provided by a collection of harmonic oscillator modes b_n with frequencies ω_n and the B_α are given by linear combinations of the modes b_n . If the frequency spectrum $\{\omega_n\}$ of the reservoir modes is discrete, it is easy to see that, in general, correlation functions of the type (3.135) are quasi-periodic functions of s . A rapid decay of the reservoir correlations therefore requires a continuum of

frequencies: For an infinitely small frequency spacing Poincaré recurrence times become infinite and irreversible dynamics can emerge.

We denote by τ_S the typical time scale of the intrinsic evolution of the system S . This time scale τ_S is defined by a typical value for $|\omega' - \omega|^{-1}$, $\omega' \neq \omega$, that is by a typical value for the inverse of the frequency differences involved. If τ_S is large compared to the relaxation time τ_R of the open system the non-secular terms in (3.132), i.e. the terms for which $\omega' \neq \omega$, may be neglected, since they oscillate very rapidly during the time τ_R over which ρ_S varies appreciably. This condition is typically satisfied for quantum optical systems where it is known as the rotating wave approximation. Thus we have

$$\frac{d}{dt}\rho_S(t) = \sum_{\omega} \sum_{\alpha,\beta} \Gamma_{\alpha\beta}(\omega) (A_{\beta}(\omega)\rho_S(t)A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) - A_{\alpha}^{\dagger}(\omega)A_{\beta}(\omega)\rho_S(t)) + \text{h.c.} \quad (3.136)$$

It is convenient to decompose the Fourier transforms of the reservoir correlation functions as follows

$$\Gamma_{\alpha\beta}(\omega) = \frac{1}{2}\gamma_{\alpha\beta}(\omega) + iS_{\alpha\beta}(\omega), \quad (3.137)$$

where for fixed ω the coefficients

$$S_{\alpha\beta}(\omega) = \frac{1}{2i} (\Gamma_{\alpha\beta}(\omega) - \Gamma_{\beta\alpha}^*(\omega)) \quad (3.138)$$

form a Hermitian matrix and the matrix defined by

$$\gamma_{\alpha\beta}(\omega) = \Gamma_{\alpha\beta}(\omega) + \Gamma_{\beta\alpha}^*(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} ds e^{i\omega s} \langle B_{\alpha}^{\dagger}(s)B_{\beta}(0) \rangle \quad (3.139)$$

is positive (see below). With these definitions we finally arrive at the interaction picture master equation

$$\frac{d}{dt}\rho_S(t) = -i[H_{LS}, \rho_S(t)] + \mathcal{D}(\rho_S(t)) \quad (3.140)$$

The Hermitian operator

$$H_{LS} = \sum_{\omega} \sum_{\alpha,\beta} S_{\alpha\beta}(\omega) A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) A_{\beta}(\omega) \quad (3.141)$$

provides a Hamiltonian contribution to the dynamics. This term is often called the Lamb shift Hamiltonian since it leads to a Lamb-type renormalization of the unperturbed energy levels induced by the system reservoir coupling. Note that the Lamb shift Hamiltonian commutes with the unperturbed system Hamiltonian,

$$[H_S, H_{LS}] = 0, \quad (3.142)$$

by virtue of eqn (3.125). Finally, the dissipator of the master equation takes the form

$$\mathcal{D}(\rho_S) = \sum_{\omega} \sum_{\alpha,\beta} \gamma_{\alpha\beta}(\omega) \left(A_{\beta}(\omega)\rho_S A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) - \frac{1}{2} \{ A_{\alpha}^{\dagger}(\omega)A_{\beta}(\omega), \rho_S \} \right). \quad (3.143)$$

We note that the master equation (3.140) is of the first standard form (3.63). It can be brought into Lindblad form (3.66) by diagonalization of the matrices $\gamma_{\alpha\beta}(\omega)$ defined in eqn (3.139). In order to prove that these matrices are positive one uses Bochner's theorem according to which the Fourier transform of a function $f(s)$ is positive provided $f(s)$ has the property

of being of positive type. The latter property means that for arbitrary $t_1, t_2, \dots, t_n$ and all n the $(n \times n)$ matrix $a_{kl} = f(t_k - t_l)$ must be positive. Since all homogeneous correlation functions $f(s) = \langle B^\dagger(s)B(0) \rangle$ are of positive type the positivity of the matrices $\gamma_{\alpha\beta}(\omega)$ follows immediately. Finally, we remark that the Schrödinger picture master equation is obtained from (3.140) simply by adding the free system Hamiltonian H_S to H_{LS} , as is easily verified with the help of the properties (3.121), (3.122) and (3.125) of the eigenoperators.

Let us summarize the different approximations used in the above derivation. The first approximation is a consequence of the weak-coupling assumption which allows us to expand the exact equation of motion for the density matrix to second order. Together with the condition $\rho(t) \approx \rho_S(t) \otimes \rho_B$ this leads to the Born approximation to the master equation. The second approximation is the Markov approximation in which the quantum master equation is made local in time by replacing the density matrix $\rho_S(s)$ at the retarded time s with that at the present time $\rho_S(t)$. Furthermore, the integration limit is pushed to infinity to get the Born-Markov approximation of the master equation. The relevant physical condition for the Born-Markov approximation is that the bath correlation time τ_B is small compared to the relaxation time of the system, that is $\tau_B \ll \tau_R$. Finally, in the rotating wave approximation rapidly oscillating terms proportional to $\exp[i(\omega' - \omega)t]$ for $\omega' \neq \omega$ are neglected, ensuring that the quantum master equation is in Lindblad form. The corresponding condition is that the inverse frequency differences involved in the problem are small compared to the relaxation time of the system, that is $\tau_S \sim |\omega' - \omega|^{-1} \ll \tau_R$.

9.4.2 3.3.2 Relaxation to equilibrium

In the previous section we have assumed that the environment is in a stationary state ρ_B which is invariant with respect to the dynamics of the reservoir. Now we want to consider a situation in which the environment is a heat bath at the inverse temperature β . In the absence of external time-dependent fields one expects the Gibbs state

$$\rho_{\text{th}} = \frac{\exp(-\beta H_S)}{\text{tr}_S \exp(-\beta H_S)} \quad (3.144)$$

to be a stationary solution of the quantum master equation (3.140). It can be shown then that for any initial state the system returns to equilibrium,

$$\rho_S(t) \longrightarrow \rho_{\text{th}}, \text{ for } t \longrightarrow +\infty, \quad (3.145)$$

provided the quantum dynamical semigroup has the property of being ergodic. This means that the relations

$$[X, A_\alpha^\dagger(\omega)] = [X, A_\alpha(\omega)] = 0 \quad \text{for all } \alpha, \omega \quad (3.146)$$

imply that X is proportional to the identity.

In order to show that (3.144) is indeed a stationary solution of the master equation (3.140) we make use of the KMS condition according to which the bath correlation functions are related through

$$\langle B_\alpha^\dagger(t)B_\beta(0) \rangle = \langle B_\beta(0)B_\alpha^\dagger(t + i\beta) \rangle. \quad (3.147)$$

The KMS condition can easily be verified if the reservoir is a heat bath with canonical equilibrium distribution

$$\rho_B = \frac{\exp(-\beta H_B)}{\text{tr}_B \exp(-\beta H_B)}. \quad (3.148)$$

It can also be shown to hold for thermal equilibrium systems in the thermodynamic limit. Equation (3.147) leads to the following relations between the Fourier transforms (3.139) of the bath correlation functions,

$$\gamma_{\alpha\beta}(-\omega) = \exp(-\beta\omega)\gamma_{\beta\alpha}(\omega). \quad (3.149)$$

We further have by virtue of eqns (3.121) and (3.122),

$$\rho_{\text{th}} A_{\alpha}(\omega) = e^{\beta\omega} A_{\alpha}(\omega) \rho_{\text{th}}, \quad (3.150)$$

$$\rho_{\text{th}} A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) = e^{-\beta\omega} A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) \rho_{\text{th}}. \quad (3.151)$$

The proof of the stationarity of ρ_{th} is now easily carried out with the help of the relations (3.142), (3.149), (3.150) and (3.151).

We mention a further important property of the quantum master equation (3.140). Namely, if the spectrum of the system Hamiltonian $H_S = \sum_n \varepsilon_n |n\rangle\langle n|$ is non-degenerate it gives rise to a closed equation of motion for the populations

$$P(n, t) = \langle n | \rho_S(t) | n \rangle \quad (3.152)$$

of the eigenstates $|n\rangle$. Thus, the equation for the diagonals of the density matrix in the eigenbasis of H_S decouples from the off-diagonal elements. As is easily checked using the quantum master equation the populations are governed by the equation

$$\frac{d}{dt} P(n, t) = \sum_m [W(n|m)P(m, t) - W(m|n)P(n, t)] \quad (3.153)$$

This equation is of the form of the classical discrete master equation (1.89) with time-independent transition rates given by

$$W(n|m) = \sum_{\alpha, \beta} \gamma_{\alpha\beta} (\varepsilon_m - \varepsilon_n) \langle m | A_{\alpha} | n \rangle \langle n | A_{\beta} | m \rangle. \quad (3.154)$$

Equation (3.153) is also known as the Pauli master equation. The rates (3.154) are real and non-negative as a consequence of the positivity of the matrices $\gamma_{\alpha\beta}(\omega)$. They are just those obtained with the help of Fermi's golden rule.

The relations (3.149) give

$$W(m|n) \exp(-\beta\varepsilon_n) = W(n|m) \exp(-\beta\varepsilon_m) \quad (3.155)$$

which is known as the condition of detailed balance and which leads to the conclusion that the equilibrium populations $P_s(n)$ follow the Boltzmann distribution

$$P_s(n) = \text{const} \times \exp(-\beta\varepsilon_n) \quad (3.156)$$

over the energy eigenvalues ε_n .

9.4.3 3.3.3 Singular-coupling limit

In the weak-coupling limit the perturbation caused by the interaction between the system and the environment is assumed to be small. As a result the degrees of freedom of the environment are the fast variable and can be effectively eliminated. With an appropriate scaling of the time parameter it is possible to derive under certain conditions a linear quantum master equation also for the case of strong coupling. In this so-called singular-coupling limit one considers a total Hamiltonian of the form

$$H = H_S + \varepsilon^{-2} H_B + \varepsilon^{-1} H_I, \quad (3.157)$$

where the interaction Hamiltonian is again written as

$$H_I = \sum_{\alpha} A_{\alpha} \otimes B_{\alpha} \quad (3.158)$$

with $A_{\alpha}^{\dagger} = A_{\alpha}$ and $B_{\alpha}^{\dagger} = B_{\alpha}$. The aim is to derive an equation of motion for the reduced density matrix in the limit $\varepsilon \rightarrow 0$. To motivate the form of the

Hamiltonian (3.157) we first observe that the decay time of reservoir correlation functions of the form (3.134) is decreased by a factor of ε^2 through the scaling $H_B \rightarrow \varepsilon^{-2} H_B$. The scaling $H_I \rightarrow \varepsilon^{-1} H_I$ of the interaction Hamiltonian ensures that the Fourier transforms of the reservoir correlation functions remain finite in the limit $\varepsilon \rightarrow 0$.

The derivation of the quantum master equation from this microscopic model is similar to the weak-coupling case and will not be presented here in detail. The only essential difference is that it is not necessary to perform the rotating wave approximation. The result of the derivation is the following Schrödinger picture master equation,

$$\frac{d}{dt} \rho_S(t) = -i [H_S + H_{LS}, \rho_S(t)] + \sum_{\alpha\beta} \gamma_{\alpha\beta} \left(A_{\beta} \rho_S(t) A_{\alpha} - \frac{1}{2} \{A_{\alpha} A_{\beta}, \rho_S(t)\} \right), \quad (3.159)$$

where the Lamb shift Hamiltonian reads

$$H_{LS} = \sum_{\alpha\beta} S_{\alpha\beta} A_{\alpha} A_{\beta}, \quad (3.160)$$

with $S_{\alpha\beta}$ defined analogously to (3.138), and

$$\gamma_{\alpha\beta} = \int_{-\infty}^{+\infty} ds \langle B_{\alpha}(s) B_{\beta}(0) \rangle. \quad (3.161)$$

The matrix $\gamma_{\alpha\beta}$ is again Hermitian and positive. Hence, the generator of the quantum master equation (3.159) is of the first standard form (3.63) and may be written in Lindblad form by diagonalization of the matrix $\gamma_{\alpha\beta}$. Master equations of the general form (3.159) will be encountered, for example, in our study of the quantum Zeno effect in Section 3.5.2 and in the recoilless limit of quantum Brownian motion (see Section 3.6.4.5).

9.4.4 3.3.4 Low-density limit

We consider a gas of particles with low density n . The particles of the gas interact through collisions involving the excitation of internal degrees of freedom of the gas particles. The collisions of the gas particles are considered as statistically independent processes. The aim is to write down a master equation which effectively describes the dynamics of the internal degrees of freedom. To this end, the internal variables are taken to be the reduced system S , while the translational degrees of freedom of the gas particles provide the environment B .

The internal degrees of freedom of the particles may be described by a free Hamiltonian of the form

$$H_S = \sum_k \epsilon_k |k\rangle \langle k|. \quad (3.162)$$

The translational degrees of freedom of a gas particle are described by the Hamiltonian

$$H_B = \int d^3p E(\vec{p}) |\vec{p}\rangle \langle \vec{p}|, \quad (3.163)$$

where $|\vec{p}\rangle$ is a momentum eigenstate and $E(\vec{p}) = \vec{p}^2/2m$ is the free particle energy. The one-particle states of the environment are given by the density matrix

$$\rho_B = \frac{1}{V} \int d^3p G(\vec{p}) |\vec{p}\rangle \langle \vec{p}| \quad (3.164)$$

where $G(\vec{p})$ represents the momentum distribution of the gas particles. The density matrix ρ_B is normalized in some volume V according to

$$\text{tr } \rho_B = \int d^3p \langle \vec{p}| \rho_B | \vec{p} \rangle = \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} G(\vec{p}) = 1. \quad (3.165)$$

The interaction of the internal degrees of freedom with the translational degrees of freedom is given by scattering reactions in which the incoming momentum changes from $\vec{p}$ to $\vec{q}$, while the internal level changes from $|l\rangle$ to $|k\rangle$. The scattering amplitude for this process can be written in the form

$$\langle k, \vec{q} | S | l, \vec{p} \rangle = \delta(\vec{q} - \vec{p}) \delta_{kl} - 2\pi i \delta(\epsilon_k + E(\vec{q}) - \epsilon_l - E(\vec{p})) T(k, \vec{q} | l, \vec{p}), \quad (3.166)$$

with the S -matrix and the T -matrix known from scattering theory. In the lowdensity limit the reduced dynamics of the quantum systems formed by the internal degrees of freedom can be shown to yield the Schrödinger picture quantum master equation

$$\frac{d}{dt} \rho_S(t) = -i [H_S + H_{LS}, \rho_S(t)] + \mathcal{D}(\rho_S(t)) \quad (3.167)$$

The Hamiltonian H_{LS} yields a renormalization of the system Hamiltonian,

$$H_{LS} = \frac{n}{2} \sum_{\epsilon_k = \epsilon_l} \int d^3p G(\vec{p}) \{T(k, \vec{p} | l, \vec{p}) + T^*(l, \vec{p} | k, \vec{p})\} |k\rangle \langle l|, \quad (3.168)$$

and the dissipator is given by

$$\begin{aligned} \mathcal{D}(\rho_S) = & 2\pi n \sum_{\omega} \int d^3p \int d^3q G(\vec{p}) \delta(E(\vec{q}) - E(\vec{p}) + \omega) \\ & \times \left\{ T_{\omega}(\vec{q}, \vec{p}) \rho_S T_{\omega}^{\dagger}(\vec{q}, \vec{p}) - \frac{1}{2} \rho_S T_{\omega}^{\dagger}(\vec{q}, \vec{p}) T_{\omega}(\vec{q}, \vec{p}) - \frac{1}{2} T_{\omega}^{\dagger}(\vec{q}, \vec{p}) T_{\omega}(\vec{q}, \vec{p}) \rho_S \right\} \end{aligned} \quad (3.169)$$

where $T_{\omega}(\vec{q}, \vec{p})$ is defined by

$$T_{\omega}(\vec{q}, \vec{p}) = \sum_{\epsilon_k - \epsilon_l = \omega} T(k, \vec{q} | l, \vec{p}) |k\rangle \langle l|. \quad (3.170)$$

Thus the Lindblad operator $T_{\omega}(\vec{q}, \vec{p})$ is given by a coherent superposition of the scattering amplitudes for all processes which contribute to a given excitation energy ω of the internal degrees of freedom,

$$\omega = \epsilon_k - \epsilon_l = E(\vec{p}) - E(\vec{q}). \quad (3.171)$$

This is the low-density limit of the quantum master equation which can be shown to hold in the thermodynamic limit. A rigorous mathematical treatment may be found in Dümcke (1985). Equation (3.167) is obviously in Lindblad form, where we have, however, a continuous

family of Lindblad operators. To derive the master equation an averaging procedure over times which are large compared to the mean collision time τ_C is performed, which is similar to the rotating wave approximation. Let d be the linear dimension of the interaction volume, v the mean particle velocity, and l the mean free path length. Then the low-density limit master equation is valid as long as

$$\tau_C \sim v^{-1}d \ll v^{-1}l \sim v^{-1}n^{-1/3} \quad (3.172)$$

which means that the mean collision time τ_C must be small compared to the time between collisions. Hence, we get the low-density condition $n \ll d^{-3}$.

9.4.5 General Important Features of Microscopic Quantum Kinetics

Systems are created not only by a Lindblad operator, but more by dissipator

(!! discuss this!! I have no idea why, but we create them this way. write that example from my research.)

9.5 10. The Density Matrix. Relaxation of Quantum Systems by Kolokolov

9.5.1 10.1. The Formalism of the Density Matrix

Произвольное состояние изолированной системы в квантовой механике описывается вектором состояния $|\psi\rangle$, который можно представить в виде суперпозиции собственных векторов $|\phi_n\rangle$ полного набора коммутирующих операторов:

$$|\psi\rangle = \sum_n a_n |\phi_n\rangle \quad (429)$$

Собственные векторы выберем ортонормированными

$$\langle \phi_m | \phi_n \rangle = \delta_{nm} \quad (430)$$

а их набор - полным

$$\sum_n |\phi_n\rangle \langle \phi_n| = 1. \quad (431)$$

Среднее значение некоторого оператора $\hat{Q}$ в состоянии $|\psi\rangle$ можно представить в виде

$$\begin{aligned} \langle \psi | \hat{Q} | \psi \rangle &= \left(\sum_m a_m^* \langle \phi_m | \right) \hat{Q} \left(\sum_n a_n |\phi_n\rangle \right) = \\ &= \sum_{nm} a_m^* a_n \langle \phi_m | \hat{Q} | \phi_n \rangle \equiv \sum_{nm} \rho_{nm} \hat{Q}_{mn} = \text{Sp}(\hat{\rho} \hat{Q}), \end{aligned} \quad (432)$$

где мы ввели матрицу плотности изолированной системы (чистого состояния):

$$\rho_{nm} = a_m^* a_n \quad (433)$$

причем

$$Sp\hat{\rho} = 1. \quad (434)$$

Реальные системы всегда взаимодействуют с окружением, и средние значения наблюдаемых в системе зависят также от переменных среды. Это взаимодействие приводит к тому, что для вычисления средних нужно рассматривать ансамбль систем

$$\langle \hat{Q} \rangle = \sum_{\alpha} W_{\alpha} \langle \psi_{\alpha} | \hat{Q} | \psi_{\alpha} \rangle, \quad \sum_{\alpha} W_{\alpha} = 1, \quad (435)$$

где W_{α} - вес данной системы (α) в ансамбле. Мы можем снова разложить состояние $|\psi_{\alpha}\rangle$ по собственным состояниям системы:

$$|\psi_{\alpha}\rangle = \sum_n a_n^{(\alpha)} |\phi_n\rangle \quad (436)$$

так что среднее значение оператора $\hat{Q}$ принимает вид

$$\langle \psi | \hat{Q} | \psi \rangle = \sum_{nm} \left(\sum_{\alpha} W_{\alpha} a_m^{(\alpha)*} a_n^{(\alpha)} \langle \phi_m | \hat{Q} | \phi_n \rangle \right) = Sp(\hat{\rho} \hat{Q}), \quad (437)$$

где оператор $\hat{\rho}$ определен своими матричными элементами

$$\hat{\rho}_{nm} \equiv \sum_{\alpha} W_{\alpha} a_m^{(\alpha)*} a_n^{(\alpha)} \quad (438)$$

и называется собственно матрицей плотности. Поскольку $a_n^{(\alpha)} = \langle \phi_n | \psi_{\alpha} \rangle$, $a_m^{(\alpha)*} = \langle \psi_{\alpha} | \phi_m \rangle$, то $\hat{\rho}_{nm} = \langle n | \hat{\rho} | m \rangle = \langle \phi_n | \sum_{\alpha} W_{\alpha} |\psi_{\alpha}\rangle \langle \psi_{\alpha} | \phi_m \rangle$, $\rightarrow \hat{\rho} = \sum_{\alpha} W_{\alpha} |\psi_{\alpha}\rangle \langle \psi_{\alpha}|$.

Используя уравнение Шредингера

$$i\hbar \frac{d|\psi_{\alpha}\rangle}{dt} = \hat{H} |\psi_{\alpha}\rangle \quad (440)$$

получаем уравнение для оператора $\hat{\rho}$:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d\hat{\rho}}{dt} &= \sum_{\alpha} W_{\alpha} i\hbar \frac{d}{dt} (|\psi_{\alpha}\rangle \langle \psi_{\alpha}|) = \\ &= \sum_{\alpha} W_{\alpha} \hat{H} |\psi_{\alpha}\rangle \langle \psi_{\alpha}| + \sum_{\alpha} W_{\alpha} |\psi_{\alpha}\rangle \langle \psi_{\alpha}| (-\hat{H}) = [\hat{H}(t), \hat{\rho}(t)] \end{aligned} \quad (441)$$

9.5.2 10.2. Equation for the Density Matrix in the Interaction Representation

Как правило, из полного гамильтониана выделяют член $\hat{V}$, ответственный за взаимодействие системы с окружением:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}(t) \quad (442)$$

В отсутствие возмущения, $\hat{V} = 0$, решение уравнения Шредингера имеет вид

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} |\psi(0)\rangle \quad (443)$$

В присутствии возмущения удобно выделить вклад от $\hat{H}_0$ в изменение со временем вектора состояния $|\psi(t)\rangle$:

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} |\psi(t)\rangle_I \quad (444)$$

где зависимость от времени вектора состояния $|\psi(t)\rangle_I$ в "представлении взаимодействия" описывается уравнением

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} |\psi\rangle_I &= -\hat{H}_0 |\psi\rangle_I + e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} (\hat{H}_0 + \hat{V}) e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} |\psi(t)\rangle_I = \\ &= e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} \hat{V}(t) e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} |\psi(t)\rangle_I = \hat{V}_I(t) |\psi(t)\rangle_I \end{aligned} \quad (445)$$

Здесь оператор возмущения в представлении взаимодействия имеет вид

$$\hat{V}_I(t) \equiv e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} \hat{V}(t) e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} \quad (446)$$

Для оператора матрицы плотности в представлении взаимодействия получим уравнение

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{\rho}_I = [\hat{V}_I(t), \hat{\rho}_I(t)] \quad (447)$$

Формальное решение этого уравнения имеет вид

$$\hat{\rho}_I(t) = \hat{\rho}(0) - \frac{i}{\hbar} \int_0^t [\hat{V}_I(t'), \hat{\rho}_I(t')] dt' \quad (448)$$

Подставляя это выражение в правую часть предыдущего уравнения, получим

$$\frac{d}{dt} \hat{\rho}_I(t) = -\frac{i}{\hbar} [\hat{V}_I(t), \hat{\rho}_I(0)] - \frac{1}{\hbar^2} \int_0^t dt' [\hat{V}_I(t), [\hat{V}_I(t'), \hat{\rho}_I(t')]] \quad (449)$$

9.5.3 10.3. Relaxation Equation

Посмотрим, как развитый формализм работает при описании релаксации двухуровневой системы, взаимодействующей с тепловым излучением. Полный гамильтониан есть

$$\hat{H} = \hat{H}_r + \hat{H}_s + \hat{V} \quad (450)$$

где индекс r относится к гамильтониану излучения, s - к системе, а их взаимодействие описывается оператором $\hat{V}$.

Как хорошо известно, гамильтониан излучения можно представить в виде

$$\hat{H}_r = \sum_{\mathbf{k}} \hbar \omega_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} \quad (451)$$

Для упрощения дальнейших выкладок удержим из всей суммы один член, просуммировав его в дальнейшем по всем значениям $\mathbf{k}$, и опустим этот индекс:

$$\hat{H}_r = \hbar \omega a^\dagger a, \quad (452)$$

где бозе-операторы $a^\dagger$, a удовлетворяют коммутационным соотношениям

$$[a, a^\dagger] = 1 \quad (453)$$

Если описывать основное, ψ_0 , и возбужденное, ψ_1 , состояния двухуровневой системы векторами

$$\psi_0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \psi_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (454)$$

то гамильтониан $\hat{H}_s$ можно записать в виде

$$\hat{H}_s = \frac{\hbar\omega_0}{2} \hat{\sigma}_z \quad (455)$$

Здесь $\hbar\omega_0$ - расстояние между уровнями системы, а

$$\hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (456)$$

- матрица Паули. Гамильтониан взаимодействия излучения с двухуровневой системой запишем в виде

$$\hat{V} = ga^\dagger \hat{\sigma}_- + g^* a \hat{\sigma}_+, \quad (457)$$

где g - константа взаимодействия (пропорциональная дипольному моменту системы), а понижающая, σ_- , и повышающая, σ_+ , матрицы описывают переходы системы с верхнего уровня на нижний

и наоборот, соответственно:

$$\hat{\sigma}_- \psi_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_+ \psi_0 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix},$$

кроме того, $\hat{\sigma}_- \psi_0 = 0$, $\hat{\sigma}_+ \psi_1 = 0$. Первый член в операторе взаимодействия описывает переход системы с верхнего уровня на нижний с одновременным испусканием кванта излучения, второй член - обратный процесс. Отметим эрмитовость оператора V и коммутативность гамильтонианов системы и излучения $[\hat{H}_s, \hat{H}_r] = 0$. Последнее свойство указывает, что для записи оператора взаимодействия $\hat{V}$ в представлении взаимодействия достаточно записать в нем в представлении взаимодействия операторы $a, a^\dagger, \hat{\sigma}_\pm$. Имеем, например,

$$\hat{a}_I^\dagger(t) = e^{i\hat{H}_r t/\hbar} a^\dagger e^{-i\hat{H}_r t/\hbar} = e^{i\omega t a^\dagger a} a^\dagger e^{-i\omega t a^\dagger a}. \quad (459)$$

Для вычисления функций $f(\alpha)$ вида

$$f(\alpha) = e^{\alpha a^\dagger a} a^\dagger e^{-\alpha a^\dagger a} \quad (460)$$

удобно написать для них дифференциальное уравнение

$$\frac{df(\alpha)}{d\alpha} = e^{\alpha a^\dagger a} (a^\dagger a a^\dagger - a^\dagger a^\dagger a) e^{-\alpha a^\dagger a} = f(\alpha), \quad (461)$$

где было использовано коммутационное соотношение $aa^\dagger - a^\dagger a = 1$. Решением этого уравнения является

$$f(\alpha) = e^{\alpha a^\dagger}, \quad (462)$$

поскольку при $\alpha = 0$, $f(\alpha) = a^\dagger$. Используя этот прием, получаем другие операторы в представлении взаимодействия:

$$\hat{a}_I(t) = e^{-i\omega t} a, \quad (\hat{\sigma}_+)_I(t) = e^{i\omega_0 t} \hat{\sigma}_+, \quad (\hat{\sigma}_-)_I(t) = e^{-i\omega_0 t} \hat{\sigma}_-. \quad (463)$$

Таким образом, в представлении взаимодействия мы имеем

$$\hat{V}_I(t) = g e^{i(\omega - \omega_0)t} a^\dagger \hat{\sigma}_- + g^* e^{-i(\omega - \omega_0)t} a \hat{\sigma}_+. \quad (464)$$

Тогда из (449) получаем уравнение

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \hat{\rho}_I(t) = & -\frac{i}{\hbar} \left(g e^{i(\omega - \omega_0)t} [a^\dagger \hat{\sigma}_-, \hat{\rho}_I(0)] + g^* e^{-i(\omega - \omega_0)t} [a \hat{\sigma}_+, \hat{\rho}_I(0)] \right) - \\ & - \frac{1}{\hbar^2} \int_0^t dt' \left[\left(g e^{i(\omega - \omega_0)t} a^\dagger \hat{\sigma}_- + g^* e^{-i(\omega - \omega_0)t} a \hat{\sigma}_+ \right) \right. \\ & \left. \left(g e^{i(\omega - \omega_0)t'} [a^\dagger \hat{\sigma}_-, \hat{\rho}_I(t')] + g^* e^{-i(\omega - \omega_0)t'} [a \hat{\sigma}_+, \hat{\rho}_I(t')] \right) \right]. \end{aligned} \quad (465)$$

Теперь, чтобы описать поведение двухуровневой системы, нам в этом уравнении необходимо провести суммирование по переменным термостата, т. е. излучения.

Основное предположение, которое делают, рассматривая взаимодействие некоторой системы с термостатом, состоит в пренебрежении влиянием системы на термостат в правой части (465), считая последний находящимся все время в тепловом равновесии. При этом матрица плотности $\hat{\rho}_I$ представляется в виде произведения матрицы плотности системы $\hat{\rho}_s$ и матрицы плотности термостата $\hat{\rho}_r$:

$$\hat{\rho}_I = \hat{\rho}_s \hat{\rho}_r \quad (466)$$

Матрица плотности термостата есть

$$(\hat{\rho}_r)_{mn} = \sum_{\alpha} W_{\alpha} a_m^{(\alpha)*} a_n^{(\alpha)} \quad (467)$$

где $W_{\alpha} \sim \exp(-\beta E_{\alpha})$, а $\beta = 1/T$ - обратная температура. Для термостата очень высока плотность энергетических состояний и в любом достаточно малом интервале энергий, таком, чтобы считать W_{α} постоянной величиной, содержится много энергетических уровней, а коэффициенты

$$a_m^{(\alpha)*} = |a_m^{(\alpha)*}| e^{-i\phi_m}, \quad a_n^{(\alpha)} = |a_n^{(\alpha)}| e^{i\phi_n} \quad (468)$$

имеют случайные фазы. Поэтому при усреднении по ансамблю в выражении для матрицы плотности термостата остаются лишь диагональные члены, так что

$$(\hat{\rho}_r)_{nn} = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_n} = \frac{1}{Z} \left(e^{-\beta \hbar \omega a^\dagger a} \right)_{nn} \quad (469)$$

где $Z = \sum_n \exp(-\beta E_n)$. Таким образом, нам нужно в уравнении для матрицы плотности взять след по переменным термостата. Поскольку

$$e^{-\beta \hat{H}_r} |n\rangle = e^{-\beta \hbar \omega a^\dagger a} |n\rangle \sim |n\rangle, \quad (470)$$

то при вычислении следа следует сохранить только члены с одинаковым числом операторов рождения $a^\dagger$ и уничтожения a . Тогда при взятии следа по переменным термостата в уравнении для матрицы плотности линейные члены по операторам $a^\dagger, a$ исчезают и мы получаем

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \hat{\rho}_s(t) = & -\frac{|g|^2}{\hbar^2 Z} \sum_n \left(e^{i(\omega - \omega_0)t} \langle n | \left[a^\dagger \hat{\sigma}_-, \left[a \hat{\sigma}_+, \hat{\rho}_s(t) e^{-\beta \hbar \omega a^\dagger a} \right] \right] | n \rangle I_- + \right. \\ & \left. + e^{-i(\omega - \omega_0)t} \langle n | \left[a \hat{\sigma}_+, \left[a^\dagger \hat{\sigma}_-, \hat{\rho}_s(t) e^{-\beta \hbar \omega a^\dagger a} \right] \right] | n \rangle I_+ \right), \end{aligned} \quad (471)$$

где введены обозначения $I_{\pm}$ для интегралов:

$$I_{\pm} \equiv \int_0^t e^{\pm i(\omega - \omega_0)t'} dt' \quad (472)$$

и выносим из-под интеграла матрицу плотности системы $\hat{\rho}_s$, поскольку она изменяется гораздо медленнее, чем экспоненциальные множители $e^{\pm i(\omega - \omega_0)t'}$. Поскольку мы собираемся описывать процессы релаксации квантовой системы, в этих интегралах нас интересует действительная часть, которая при условии $t \gg 1/\omega, 1/\omega_0$ равна

$$\text{Re} \int_0^t e^{\pm i(\omega - \omega_0)t'} dt' \approx \pi \delta(\omega - \omega_0) \quad (473)$$

Отметим, что мнимая часть дает небольшой ($\sim |g|^2$) сдвиг уровней системы.

Теперь самое время вспомнить, что нам еще нужно просуммировать по всем модам теплового излучения. Как обычно, удобно от суммирования по дискретному набору перейти к интегрированию

$$\sum_{\mathbf{k}} \rightarrow \int G(\omega) d\omega \quad (474)$$

где $G(\omega)$ - плотность состояний. Ввиду наличия дельта-функции из всех сумм остаются только члены с $\omega = \omega_0$, и мы получаем:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \hat{\rho}_s(t) = & -\frac{|g|^2 \pi G(\omega_0)}{\hbar^2 Z} \times \\ & \times \sum_n \left[\left(\langle n | a^\dagger a e^{-\beta \hbar \omega a^\dagger a} | n \rangle \hat{\sigma}_- \hat{\sigma}_+ \hat{\rho}_s - \langle n | a^\dagger e^{-\beta \hbar \omega a^\dagger a} a | n \rangle \hat{\sigma}_- \hat{\rho}_s \hat{\sigma}_+ - \right. \right. \\ & - \langle n | a e^{-\beta \hbar \omega a^\dagger a} a^\dagger | n \rangle \hat{\sigma}_+ \hat{\rho}_s \hat{\sigma}_- + \langle n | e^{-\beta \hbar \omega a^\dagger a} a a^\dagger | n \rangle \hat{\rho}_s \hat{\sigma}_+ \hat{\sigma}_- \Big)_1 + \\ & \left. (a \leftrightarrow a^\dagger, +\hat{\sigma}_+ \leftrightarrow \hat{\sigma}_-)_2 \right]. \end{aligned} \quad (475)$$

Для вычисления следов вида $\langle n | f(a^\dagger, a) | n \rangle$ нам понадобятся следующие соотношения:

$$Z = \sum_n \langle n | e^{-\beta \hbar \omega a^\dagger a} | n \rangle = \sum_n e^{-\alpha n} = \frac{1}{1 - e^{-\alpha}} = \frac{1}{1 - e^{-\beta \hbar \omega}} \quad (476)$$

где использовано обозначение $\alpha \equiv \beta \hbar \omega$:

$$\begin{aligned} \frac{1}{Z} \sum_n \langle n | a^\dagger a e^{-\beta \hbar \omega a^\dagger a} | n \rangle &= \frac{1}{Z} \sum_n n e^{-\alpha n} = \\ &= -\frac{d}{d\alpha} \ln Z = \frac{1}{e^\alpha - 1} = \frac{1}{e^{\beta \hbar \omega} - 1} \equiv \bar{n} \end{aligned} \quad (477)$$

Используя соотношения

$$e^{\alpha a^\dagger a} a e^{-\alpha a^\dagger a} = e^{-\alpha} a \rightarrow e^{-\alpha a^\dagger a} a = e^\alpha a e^{-\alpha a^\dagger a} \quad (478)$$

$$e^{\alpha a^\dagger a} a^\dagger e^{-\alpha a^\dagger a} = e^\alpha a^\dagger \rightarrow e^{-\alpha a^\dagger a} a^\dagger = e^{-\alpha} a^\dagger e^{-\alpha a^\dagger a} \quad (479)$$

получаем

$$\frac{1}{Z} \sum_n \langle n | a^\dagger e^{-\beta \hbar \omega a^\dagger a} a | n \rangle = \frac{e^\alpha}{e^\alpha - 1} = \bar{n} + 1, \quad (480)$$

$$\frac{1}{Z} \sum_n \langle n | a e^{-\beta \hbar \omega a^\dagger a} a^\dagger | n \rangle = e^{-\alpha} (\bar{n} + 1) = \bar{n}, \quad (481)$$

а также

$$\frac{1}{Z} \sum_n \langle n | e^{-\beta \hbar \omega a^\dagger a} a a^\dagger | n \rangle = \bar{n} + 1. \quad (482)$$

Тогда первый член в круглых скобках в уравнении для матрицы плотности имеет вид

$$\begin{aligned} ()_1 &= \bar{n} \hat{\sigma}_- \hat{\sigma}_+ \hat{\rho}_s - (\bar{n} + 1) \hat{\sigma}_- \hat{\rho}_s \hat{\sigma}_+ - \bar{n} \hat{\sigma}_+ \hat{\rho}_s \hat{\sigma}_- + (\bar{n} + 1) \hat{\rho}_s \hat{\sigma}_+ \hat{\sigma}_- = \\ &= \bar{n} [\hat{\sigma}_-, \hat{\sigma}_+ \hat{\rho}_s] - (\bar{n} + 1) [\hat{\sigma}_-, \hat{\rho}_s \hat{\sigma}_+]. \end{aligned} \quad (483)$$

Второй член в круглых скобках равен

$$()_2 = -\bar{n} [\hat{\sigma}_+, \hat{\rho}_s \hat{\sigma}_-] + (\bar{n} + 1) [\hat{\sigma}_+, \hat{\sigma}_- \hat{\rho}_s]. \quad (484)$$

Вводя обозначение

$$A = \frac{|g|^2 \pi G(\omega_0)}{\hbar^2} \quad (485)$$

перепишем уравнение для матрицы плотности:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \hat{\rho}_s &= -A \bar{n} ([\hat{\sigma}_-, \hat{\sigma}_+ \hat{\rho}_s] - [\hat{\sigma}_+, \hat{\rho}_s \hat{\sigma}_-]) + \\ &+ A(\bar{n} + 1) ([\hat{\sigma}_+, \hat{\sigma}_- \hat{\rho}_s] - [\hat{\sigma}_-, \hat{\rho}_s \hat{\sigma}_+]) \end{aligned} \quad (486)$$

Учитывая соотношения

$$\begin{aligned} \hat{\sigma}_- |0\rangle &= 0, \quad \hat{\sigma}_- |1\rangle = |0\rangle, \quad \langle 0 | \hat{\sigma}_+ = 0, \quad \langle 1 | \hat{\sigma}_+ = \langle 0 |, \\ \langle 0 | \hat{\sigma}_- &= \langle 1 |, \quad \langle 1 | \hat{\sigma}_- = 0, \quad \hat{\sigma}_+ |0\rangle = |1\rangle, \quad \hat{\sigma}_+ |1\rangle = 0, \end{aligned} \quad (487)$$

запишем уравнение для матричного элемента:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \rho_{00} &= -A [\bar{n} \rho_{00} - (\bar{n} + 1) \rho_{11} - (\bar{n} + 1) \rho_{11} + \bar{n} \rho_{00}] = \\ &= -2A [\bar{n} \rho_{00} - (\bar{n} + 1) (1 - \rho_{00})] = -2A(2\bar{n} + 1) \left(\rho_{00} - \frac{\bar{n} + 1}{2\bar{n} + 1} \right) \end{aligned} \quad (488)$$

где мы использовали равенство $\text{Sp} \rho = \rho_{00} + \rho_{11} = 1$. Из этого уравнения видно, что диагональные элементы матрицы плотности

релаксируют от неравновесного значения с характерным временем релаксации

$$T_1 = \frac{1}{2A(2\bar{n} + 1)} \quad (489)$$

к своему равновесному значению

$$\bar{\rho}_{00} = \frac{\bar{n} + 1}{2\bar{n} + 1} \quad (490)$$

По своему физическому смыслу $\bar{\rho}_{00}, \bar{\rho}_{11}$ - вероятности найти двухуровневую систему в основном и возбужденном состояниях соответственно. Их отношение равно

$$\frac{\bar{\rho}_{11}}{\bar{\rho}_{00}} = \frac{\bar{n}}{\bar{n} + 1} = e^{-\beta\hbar\omega} \quad (491)$$

как и должно быть в тепловом равновесии.

Для недиагонального матричного элемента получается уравнение

$$\frac{d}{dt}\rho_{01} = -A(\bar{n}\rho_{01} + (\bar{n} + 1)\rho_{01}) = -A(2\bar{n} + 1)\rho_{01} \quad (492)$$

Отсюда следует, что недиагональные элементы матрицы плотности стремятся к нулю, как и положено для системы в тепловом равновесии, с характерным временем релаксации

$$T_2 = \frac{1}{A(2\bar{n} + 1)} = \frac{T_1}{2} \quad (493)$$

Это общее соотношение между временами релаксации диагональных компонент матрицы плотности ("продольной") и недиагональных ("поперечной") выполняется для многих систем.

9.5.4 10.4. The Linear Response of the System. Kubo's Formula

Во многих случаях возмущение системы внешним, зависящим от времени полем можно рассматривать как малую величину, слабо выводящую систему из равновесия. Отклик системы на внешнее

возмущение в первом порядке по возмущающему полю определяется равновесными свойствами системы. Уравнение для матрицы плотности в представлении взаимодействия и с учетом слабой связи с термостатом сводится к

$$\frac{\partial \hat{\rho}_I}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{V}_I, \hat{\rho}_I] - \gamma (\hat{\rho}_I - \hat{\rho}_0), \quad (494)$$

где $\hat{\rho}_0$ - матрица плотности в равновесии. Формальным решением этого уравнения является

$$\hat{\rho}_I(t) = \hat{\rho}_0 - \frac{i}{\hbar} e^{-\gamma t} \int_{-\infty}^t e^{\gamma t'} [\hat{V}_I(t'), \hat{\rho}_I(t')] dt' \quad (495)$$

В первом приближении по возмущению V получаем формулу Кубо:

$$\hat{\rho}_I(t) \approx \hat{\rho}_0 - \frac{i}{\hbar} e^{-\gamma t} \int_{-\infty}^t e^{\gamma t'} [\hat{V}_I(t'), \hat{\rho}_0(t')] dt' \quad (496)$$

Используем эту формулу для вычисления проводимости в переменном внешнем поле $E_0 e^{-i\omega t}$. В данном случае невозмущенный гамильтониан есть

$$\hat{H}_0 = \sum_l \frac{\hat{p}_l^2}{2m}, \quad (497)$$

где сумма берется по всем электронам в единице объема, m - масса. Возмущение имеет вид

$$\hat{V}(t') = -eE_\beta e^{-i\omega t'} \sum_j r_{\beta j}, \quad (498)$$

где r_j - координата j -й частицы. Теперь перейдем к Шредингеровскому представлению:

$$\hat{\rho}(t) \approx \hat{\rho}_0 + \frac{ie}{\hbar} E_\beta e^{-i\omega t} \sum_j \int_0^\infty e^{-\gamma\tau} e^{i\omega\tau} e^{i\hat{H}_0\tau/\hbar} [\hat{r}_{\beta j}, \hat{\rho}_0] e^{-i\hat{H}_0\tau/\hbar} d\tau. \quad (499)$$

Среднее значение плотности тока определяется выражением

$$\langle j_\alpha \rangle = \sum_l \frac{e}{m} \langle p_{\alpha l} \rangle = \frac{e}{m} \sum_l Sp(\hat{\rho} \hat{p}_{\alpha l}). \quad (500)$$

Поскольку $Sp(\hat{\rho}_0 \hat{p}_{\alpha l}) = 0$, то вклад в плотность тока дает только второй член в выражении для матрицы плотности. Вычислим след

$$Sp(e^{i\hat{H}_0\tau/\hbar} \hat{p}_{\alpha l} [\hat{r}_{\beta j}, \hat{\rho}_0] e^{-i\hat{H}_0\tau/\hbar}), \quad (501)$$

используя его инвариантность относительно циклической перестановки:

$$\begin{aligned} Sp(e^{i\hat{H}_0\tau/\hbar} \hat{p}_{\alpha l} [\hat{r}_{\beta j}, \hat{\rho}_0] e^{-i\hat{H}_0\tau/\hbar}) &= Sp(\hat{p}_{\alpha l} [\hat{r}_{\beta j}, \hat{\rho}_0]) = \\ &= Sp(\hat{\rho}_0 [\hat{p}_{\alpha l}, \hat{r}_{\beta j}]) = -i\hbar \delta_{lj} \delta_{\alpha\beta} \end{aligned} \quad (502)$$

Таким образом, тензор проводимости равен

$$\sigma_{\alpha\beta} = \frac{ine^2}{m(\omega + i\gamma)} \delta_{\alpha\beta}. \quad (503)$$

9.5.5 10.5. Quantum Corrections to Conductivity

Проводимость при очень низких температурах определяется рассеянием на примесях, которое можно рассматривать как упругое. Если характерное значение импульса электрона обозначить через p_0 , а длину свободного пробега $-l$, то при условии $p_0 l \gg \hbar$ движение электрона можно считать квазиклассическим. Наиболее интересные квантовые эффекты имеют место в тонких пленках, поэтому мы будем рассматривать двумерную систему. Для вычисления квантовых поправок надо использовать более высокие порядки теории возмущений в уравнении для матрицы плотности, что потребует очень сложных вычислений, и мы ограничимся качественным описанием.

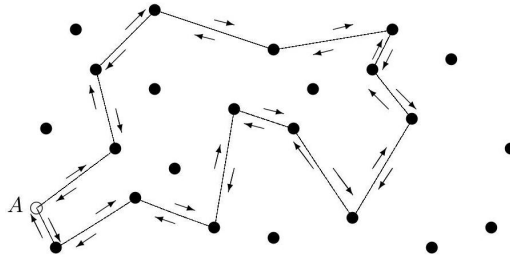


Рис. 11. Электрон, выходящий из точки A , рассеивается на примесях, показанных жирными кружками, и возвращается назад. Стрелками на петле указаны два противоположных направления обхода, приводящих к ненулевому интерференционному вкладу

Проводимость проводника пропорциональна вероятности перехода электрона с одного конца на другой. Полная амплитуда вероятности перехода электрона из точки A в точку B есть сумма амплитуд по всем возможным траекториям. Эти траектории представляют собой в квазиклассическом приближении прямые трубки толщиной порядка длины волны $\lambda \sim \hbar/p_0$, соединяющие примесные атомы, на которых по пути из A в B рассеялся электрон. Полная вероятность перехода $W_{A \rightarrow B}$ из точки A в точку B есть

$$W_{A \rightarrow B} = \left| \sum_i A_i \right|^2 = \sum_i |A_i|^2 + \sum_{i \neq j} A_i A_j^*. \quad (504)$$

Почти для всех различающихся траекторий интерференционный член зануляется из-за случайного изменения фазы. Однако если электрон возвращается в исходную точку ($B \rightarrow A$), то при движения по замкнутой петле в двух противоположных направлениях (рис. 11) амплитуды когерентно складываются. Это приводит к увеличению вероятности рассеяния назад по сравнению с классической вероятностью, т. е. к уменьшению проводимости.

Относительная добавка к проводимости определяется вероятностью возврата траектории в исходную точку. За время t (много

большого времени свободного пробега $\tau \sim l/v$, где $v = p_0/m$ — скорость электрона) за счет рассеяния на случайно расположенных примесях электрону будет доступен объем $V \sim R^2 b$, где $b \leq l$ — толщина проводника, а $R^2 = Nl^2$ — среднеквадратичное смещение электрона при случайном рассеянии на $N = vt/l$ примесях, т. е. $V \sim vtlb$. Чтобы за промежуток времени dt электрон вернулся в исходную точку, надо, чтобы конечная точка пути электрона попала в элемент объема $vdt\lambda^2$. Вероятность этого события равна отношению объемов $vdt\lambda^2/(lvtb)$. Тогда относительное изменение проводимости есть

$$\frac{\Delta\sigma}{\sigma} \sim - \int_{\tau}^{\tau_{\phi}} \frac{v\lambda^2 dt}{vltb} \sim - \frac{\lambda^2}{bl} \ln \frac{\tau_{\phi}}{\tau} \quad (505)$$

Интегрирование по времени было ограничено снизу временем свободного пробега, минимальным временем, необходимым для возврата, а сверху — характерным временем τ_{ϕ} неупругих столкновений электрона, разрушающих интерференцию. Например, неупругое рассеяние электронов друг на друге приводит к зависимости от температуры $\tau_{\phi, e-e} \sim T^{-2}$, тогда как рассеяние на фононах при низких температурах приводит к зависимости $\tau_{\phi, e-ph} \sim T^{-5}$, и, значит, проводимость уменьшается как $\ln(1/T)$.

Сечение неупругого рассеяния электронов друг на друге Σ_{e-e} определяется доступным фазовым объемом для электрона до и после рассеяния. Считая электронный газ вырожденным, получим, что обе эти величины пропорциональны T , и поэтому получается зависимость от температуры $\tau_{\phi, e-e} \sim (\Sigma_{e-e})^{-1} \sim T^{-2}$.

Сечение неупругого рассеяния электронов на фононах Σ_{e-ph} при низких температурах ($T \ll \theta$ — температуры Дебая) пропорционально плотности числа фононов, которая определяется как

$$\frac{9N}{\omega_{\max}^3} \int_0^{\omega_{\max}} \frac{\omega^2 d\omega}{e^{\hbar\omega/T} - 1} \sim N \left(\frac{T}{\theta} \right)^3 \quad \text{для} \quad T \ll \hbar\omega_{\max} \equiv \theta$$

где N — плотность числа атомов в решетке. Однако импульс фонона гораздо меньше импульса электрона, поэтому необходимо большое число столкновений, чтобы существенно изменить импульс

электрона. Энергия фонона ограничена сверху величиной T , тогда максимальный импульс фонона $\hbar k \sim T/c_s \ll p$, где c_s — скорость звука, $p \approx p_0$ — импульс электрона, приближенно равный импульсу Ферми. Из закона сохранения энергии и импульса

получим связь изменения энергии $\Delta\varepsilon$ и импульса $\Delta p = \hbar k$ электрона в результате рассеяния на фононе:

$$\Delta\varepsilon \approx \frac{\vec{p} \cdot \hbar \vec{k}}{m} = \frac{p \Delta p \cos \phi}{m}.$$

Характерная величина изменения энергии электрона порядка энергии фонона, т. е. $\Delta\varepsilon \sim T$, откуда получаем оценку характерного угла изменения импульса электрона:

$$\cos \phi \sim \frac{T m c_s}{p T} \sim \frac{c_s}{v} \ll 1,$$

т. е. электрон получает случайные изменения импульса в перпендикулярном направлении и число столкновений n , необходимых для существенного изменения импульса, оценивается из

$$\sum_{i=1}^n (\hbar \vec{k}_i)^2 \sim n (\hbar k)^2 \sim p^2 \quad \rightarrow \quad n \sim \left(\frac{c_s p}{T} \right)^2 \sim T^{-2}$$

Таким образом, получается

$$\tau_{\phi, e-ph} \sim \frac{n}{\Sigma_{e-ph}} \sim T^{-5}.$$

Прикладывая магнитное поле H , перпендикулярное поверхности пленки проводника, можно уменьшить интерференционные эффекты возврата, так как при обходе петли в двух противоположных направлениях появляется разность фаз:

$$\Delta\phi_H = \frac{2e}{\hbar c} \oint \vec{A} \cdot d\vec{l} = \frac{2e}{\hbar c} \int \text{rot } \vec{A} \cdot d\vec{S} = \frac{2e\Phi}{\hbar c}. \quad (506)$$

Характерное значение потока магнитного поля есть $\Phi \sim v l t H$. Интерференция разрушается магнитным полем, если $\Delta\phi_H \sim 2\pi$, чему

соответствует характерное время $t_H \sim c\hbar/(evlH)$. Тогда, ограничивая интегрирование по времени на верхнем пределе величиной t_H (при $t_H < \tau_\phi$), получим:

$$\frac{\Delta\sigma}{\sigma} \sim -\frac{\lambda^2}{bl} \ln \frac{c\hbar}{evlH\tau} \quad (507)$$

Разность проводимостей при наложении магнитного поля будет равна

$$\Delta\sigma(H) - \Delta\sigma(0) \sim -\frac{\lambda^2\sigma}{bl} \ln \frac{evlH\tau_\phi}{c\hbar} \quad (508)$$

Таким образом, магнитное поле $H_0 \sim \hbar c/(evl\tau_\phi)$ подавляет интерференционный вклад траекторий, возвращающихся назад, и увеличивает проводимость.

9.6 Creation of Models from Microscopic Ideas

9.6.1 Creation of open spin models

(this is what is done a lot)

9.6.2 Creation of open superconductive models

(this is what I need to learn)

9.6.3 Creation of other open models

9.7 3.4 The quantum optical master equation

(see note on optics and quantum optics about it, that notes are main for these topics)

The interaction of matter with electromagnetic radiation in the quantum optical limit provides a typical field for the application of quantum dynamical semigroups and quantum Markovian master equations (Cohen-Tannoudji, DupontRoc and Grynberg, 1998; Gardiner and Zoller, 2000; Walls and Milburn, 1994). The reason for this fact is that in a typical quantum optical situation the physical conditions underlying the Markovian approximation are very well satisfied. A number of examples will be discussed in this section.

9.7.1 3.4.1 Matter in quantized radiation fields

We consider a bound quantum system, e.g. an atom or a molecule, which interacts with a quantized radiation field. The radiation field represents a reservoir with an infinite number of degrees of freedom and the bound system is the reduced system we are interested in. The uncoupled atom or molecule is described by some Hamiltonian H_S , while the free quantized radiation field will be represented by the Hamiltonian (subtracting an infinite c-number for the vacuum energy)

$$H_B = \sum_{\vec{k}} \sum_{\lambda=1,2} \hbar \omega_k b_{\lambda}^{\dagger}(\vec{k}) b_{\lambda}(\vec{k}) \quad (3.173)$$

In this section we reintroduce all physical constants such as Planck's constant $\hbar$ and the speed of light c . For simplicity we decompose the radiation field into Fourier modes in a box of volume V , imposing periodic boundary conditions.

These modes are labelled by the wave vector $\vec{k}$ and two corresponding, transverse unit polarization vectors $\vec{e}_{\lambda}(\vec{k})$, such that

$$\vec{k} \cdot \vec{e}_{\lambda}(\vec{k}) = 0, \quad (3.174)$$

$$\vec{e}_{\lambda}(\vec{k}) \cdot \vec{e}_{\lambda'}(\vec{k}) = \delta_{\lambda\lambda'}, \quad (3.175)$$

$$\sum_{\lambda=1,2} e_{\lambda}^i(\vec{k}) e_{\lambda}^j(\vec{k}) = \delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{|\vec{k}|^2}, \quad i, j = 1, 2, 3. \quad (3.176)$$

The dispersion relation is $\omega_k = ck = c|\vec{k}|$. The field operators $b_{\lambda}(\vec{k})$ and $b_{\lambda}^{\dagger}(\vec{k})$ describe the destruction and creation of photons with wave vector $\vec{k}$ and polarization $\vec{e}_{\lambda}(\vec{k})$. They obey the commutation relations

$$[b_{\lambda}(\vec{k}), b_{\lambda'}(\vec{k}')] = [b_{\lambda}^{\dagger}(\vec{k}), b_{\lambda'}^{\dagger}(\vec{k}')] = 0, \quad (3.177)$$

$$[b_{\lambda}(\vec{k}), b_{\lambda'}^{\dagger}(\vec{k}')] = \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \delta_{\lambda\lambda'}. \quad (3.178)$$

Finally, we assume the interaction Hamiltonian to be given in the dipole approximation by

$$H_I = -\vec{D} \cdot \vec{E}, \quad (3.179)$$

where $\vec{D}$ is the dipole operator of the system under consideration and $\vec{E}$ is the electric field operator in the Schrödinger picture,

$$\vec{E} = i \sum_{\vec{k}} \sum_{\lambda=1,2} \sqrt{\frac{2\pi\hbar\omega_k}{V}} \vec{e}_\lambda(\vec{k}) (b_\lambda(\vec{k}) - b_\lambda^\dagger(\vec{k})). \quad (3.180)$$

With these definitions the total Hamiltonian governing the coupled system of the matter degrees of freedom and the radiation degrees of freedom is given by

$$H = H_S + H_B + H_I. \quad (3.181)$$

3.4.1.1 Performing the Born-Markov approximation We proceed as in Section 3.3.1 and decompose the dipole operator $\vec{D}$ into eigenoperators of H_S . The latter take the form (see eqn (3.120))

$$\vec{A}(\omega) \equiv \sum_{\varepsilon' - \varepsilon = \hbar\omega} \Pi(\varepsilon) \vec{D} \Pi(\varepsilon'). \quad (3.182)$$

Note that the index α used in Section 3.3.1 labels here the Cartesian components $D_i, i = 1, 2, 3$, of the dipole operator. In accordance with eqns (3.121), (3.122) and (3.126) we now have

$$[H_S, \vec{A}(\omega)] = -\hbar\omega \vec{A}(\omega), \quad [H_S, \vec{A}^\dagger(\omega)] = +\hbar\omega \vec{A}^\dagger(\omega), \quad (3.183)$$

and

$$\vec{A}^\dagger(\omega) = \vec{A}(-\omega). \quad (3.184)$$

The decomposition of the interaction picture dipole operator $\vec{D}(t)$ into eigenoperators therefore reads

$$\vec{D}(t) = \sum_{\omega} e^{-i\omega t} \vec{A}(\omega) = \sum_{\omega} e^{+i\omega t} \vec{A}^\dagger(\omega), \quad (3.185)$$

and the interaction Hamiltonian can now be written in the interaction picture in a form analogous to eqn (3.129),

$$H_I(t) = - \sum_{\omega} e^{-i\omega t} \vec{A}(\omega) \cdot \vec{E}(t), \quad (3.186)$$

where $\vec{E}(t)$ denotes the electric field operator in the interaction picture. Assuming as in eqn (3.131) that

$$\langle \vec{E}(t) \rangle \equiv \text{tr} \{ \vec{E}(t) \rho_B \} = 0, \quad (3.187)$$

we can immediately write down the equation of motion analogous to eqn (3.132),

$$\frac{d}{dt} \rho_S = \sum_{\omega, \omega'} \sum_{i,j} e^{i(\omega' - \omega)t} \Gamma_{ij}(\omega) (A_j(\omega) \rho_S A_i^\dagger(\omega') - A_i^\dagger(\omega') A_j(\omega) \rho_S) + \text{h.c.} \quad (3.188)$$

The correlation functions of the electric field operator are defined through

$$\langle E_i(t) E_j(t-s) \rangle \equiv \text{tr}_B \{ E_i(t) E_j(t-s) \rho_B \}, \quad (3.189)$$

and their one-sided Fourier transforms are given by

$$\Gamma_{ij}(\omega) \equiv \frac{1}{\hbar^2} \int_0^\infty ds e^{i\omega s} \langle E_i(t) E_j(t-s) \rangle. \quad (3.190)$$

The matrix $\Gamma_{ij}(\omega)$ will be referred to as the spectral correlation tensor. It depends, in general, on t . In fact, without further assumption on the state ρ_B of the reservoir we find

$$\begin{aligned} \Gamma_{ij}(\omega) = & \frac{1}{\hbar^2} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \sum_{\lambda, \lambda'} \sqrt{\frac{2\pi\hbar\omega_k}{V}} \sqrt{\frac{2\pi\hbar\omega_{k'}}{V}} e_{\lambda}^i(\vec{k}) e_{\lambda'}^j(\vec{k}') \\ & \times \int_0^\infty ds \left[\langle b_{\lambda}(\vec{k}) b_{\lambda'}^\dagger(\vec{k}') \rangle \exp[+i(\omega_{k'} - \omega_k)t - i(\omega_{k'} - \omega)s] \right. \\ & + \langle b_{\lambda}^\dagger(\vec{k}) b_{\lambda'}(\vec{k}') \rangle \exp[-i(\omega_{k'} - \omega_k)t + i(\omega_{k'} + \omega)s] \\ & + \langle b_{\lambda}(\vec{k}) b_{\lambda'}(\vec{k}') \rangle \exp[-i(\omega_{k'} + \omega_k)t + i(\omega_{k'} + \omega)s] \\ & \left. + \langle b_{\lambda}^\dagger(\vec{k}) b_{\lambda'}^\dagger(\vec{k}') \rangle \exp[+i(\omega_{k'} + \omega_k)t - i(\omega_{k'} - \omega)s] \right]. \end{aligned} \quad (3.191)$$

3.4.1.2 Thermal reservoir As our first example let us now take the reservoir of radiation modes to be in an equilibrium state at temperature T ,

$$\rho_B = \frac{1}{Z_B} \exp[-\beta H_B] = \prod_{\vec{k}, \lambda} (1 - \exp[-\beta\hbar\omega_k]) \exp[-\beta\hbar\omega_k b_{\lambda}^\dagger(\vec{k}) b_{\lambda}(\vec{k})]. \quad (3.192)$$

As above, expectation values with respect to this equilibrium state are denoted by angular brackets. Note that $\langle \vec{E}(t) \rangle = 0$ since the field operator is linear in the creation and annihilation operators. Since the thermal equilibrium state is stationary with respect to the reservoir dynamics, the reservoir correlation functions are homogeneous in time and we have

$$\langle E_i(t) E_j(t-s) \rangle = \langle E_i(s) E_j(0) \rangle. \quad (3.193)$$

It follows that the spectral correlation tensor $\Gamma_{ij}(\omega)$ does not depend on t . Consequently, if we perform the rotating wave approximation in eqn (3.188) only the diagonal terms $\omega = \omega'$ of the double sum over the system frequencies survive and we are left with

$$\frac{d}{dt} \rho_S = \sum_{\omega} \sum_{i,j} \Gamma_{ij}(\omega) \{ A_j(\omega) \rho_S A_i^\dagger(\omega) - A_i^\dagger(\omega) A_j(\omega) \rho_S \} + \text{h.c.} \quad (3.194)$$

It remains to determine the spectral correlation tensor. To this end we use the relations

$$\langle b_{\lambda}(\vec{k}) b_{\lambda'}(\vec{k}') \rangle = \langle b_{\lambda}^\dagger(\vec{k}) b_{\lambda'}^\dagger(\vec{k}') \rangle = 0, \quad (3.195)$$

$$\langle b_{\lambda}(\vec{k}) b_{\lambda'}^\dagger(\vec{k}') \rangle = \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \delta_{\lambda\lambda'} (1 + N(\omega_k)), \quad (3.196)$$

$$\langle b_{\lambda}^\dagger(\vec{k}) b_{\lambda'}(\vec{k}') \rangle = \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \delta_{\lambda\lambda'} N(\omega_k), \quad (3.197)$$

where

$$N(\omega_k) = \frac{1}{\exp[\beta\hbar\omega_k] - 1} \quad (3.198)$$

denotes the Planck distribution, that is the average number of photons in a mode with frequency ω_k . We further perform the continuum limit,

$$\frac{1}{V} \sum_{\vec{k}} \longrightarrow \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} = \frac{1}{(2\pi)^3 c^3} \int_0^\infty d\omega_k \omega_k^2 \int d\Omega \quad (3.199)$$

The integration over the solid angle $d\Omega$ of the wave vector $\vec{k}$ is carried out with the help of

$$\int d\Omega \left(\delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{k^2} \right) = \frac{8\pi}{3} \delta_{ij} \quad (3.200)$$

Equation (3.191) then yields

$$\begin{aligned} \Gamma_{ij}(\omega) = \frac{2}{3\pi\hbar c^3} \delta_{ij} \int_0^\infty d\omega_k \omega_k^3 [(1 + N(\omega_k)) \int_0^\infty ds \exp[-i(\omega_k - \omega)s] \\ + N(\omega_k) \int_0^\infty ds \exp[+i(\omega_k + \omega)s]] \end{aligned} \quad (3.201)$$

On making use of the formula

$$\int_0^\infty ds e^{-i\varepsilon s} = \pi\delta(\varepsilon) - iP \frac{1}{\varepsilon} \quad (3.202)$$

where P denotes the Cauchy principal value, we finally arrive at

$$\Gamma_{ij}(\omega) = \delta_{ij} \left(\frac{1}{2} \gamma(\omega) + iS(\omega) \right) \quad (3.203)$$

where we have introduced the quantities

$$\gamma(\omega) = \frac{4\omega^3}{3\hbar c^3} (1 + N(\omega)) \quad (3.204)$$

and

$$S(\omega) = \frac{2}{3\pi\hbar c^3} P \int_0^{+\infty} d\omega_k \omega_k^3 \left[\frac{1 + N(\omega_k)}{\omega - \omega_k} + \frac{N(\omega_k)}{\omega + \omega_k} \right] \quad (3.205)$$

Note that the Planck distribution satisfies $N(-\omega) = -(1 + N(\omega))$ such that $\gamma(\omega) = 4\omega^3(1 + N(\omega))/3\hbar c^3$ for $\omega > 0$ and $\gamma(\omega) = 4|\omega|^3 N(|\omega|)/3\hbar c^3$ for $\omega < 0$.

Summing up our results we obtain a Markovian quantum master equation for the matter degrees of freedom, often called the quantum optical master equation, which can be written in Lindblad form,

$$\frac{d}{dt} \rho_S(t) = -\frac{i}{\hbar} [H_{LS}, \rho_S(t)] + \mathcal{D}(\rho_S(t)) \quad (3.206)$$

The Hamiltonian

$$H_{LS} = \sum_{\omega} \hbar S(\omega) \vec{A}^\dagger(\omega) \cdot \vec{A}(\omega) \quad (3.207)$$

leads to a renormalization of the system Hamiltonian H_S which is induced by the vacuum fluctuations of the radiation field (Lamb shift) and by thermally induced processes (Stark shift). A more detailed treatment of the Lamb shift is given in Section 12.2.3.2. The dissipator of the quantum master equation takes the form

$$\begin{aligned} \mathcal{D}(\rho_S) = \sum_{\omega>0} \frac{4\omega^3}{3\hbar c^3} (1 + N(\omega)) \left(\vec{A}(\omega) \rho_S \vec{A}^\dagger(\omega) - \frac{1}{2} \{ \vec{A}^\dagger(\omega) \vec{A}(\omega), \rho_S \} \right) \\ + \sum_{\omega>0} \frac{4\omega^3}{3\hbar c^3} N(\omega) \left(\vec{A}^\dagger(\omega) \rho_S \vec{A}(\omega) - \frac{1}{2} \{ \vec{A}(\omega) \vec{A}^\dagger(\omega), \rho_S \} \right) \end{aligned} \quad (3.208)$$

To obtain this form we have transformed the sum over the negative frequencies into a sum over the positive frequencies and have made use of relation (3.184). We observe that the dissipator of the master equation describes spontaneous and thermally induced processes. By virtue of eqn (3.121) the Lindblad operators $A_i(\omega)$ lower the atomic energy by the amount $\hbar\omega$: If ψ is an eigenstate of H_S with energy ε , then $A_i(\omega)\psi$ is again an eigenstate of H_S belonging to the eigenvalue $\varepsilon - \hbar\omega$. Correspondingly, the operators $A_i^\dagger(\omega)$ raise the atomic energy by $\hbar\omega$. Thus, the Lindblad operators $A_i(\omega)$ describe spontaneous and thermally induced emission processes which occur with the rate $4\omega^3(1 + N(\omega))/3\hbar c^3$, while the $A_i^\dagger(\omega)$ describe thermally induced absorption processes taking place with the rate $4\omega^3 N(\omega)/3\hbar c^3$.

Let us finally comment on the validity of the quantum optical master equation. The relaxation time τ_R is given by the inverse of a typical relaxation rate γ_0 . The latter is defined by a typical value for the transition rates $4\omega^3|\vec{d}|^2/3\hbar c^3$ of electric dipole transitions, where $\vec{d}$ is the corresponding matrix element of the dipole operator. On the other hand, the vacuum correlation time τ_B of the reservoir of radiation degrees of freedom is given by the inverse of a typical transition frequency ω_0 . This will be seen explicitly in our discussion of a systematic perturbation expansion around the Markovian limit in Section 9.2.1. It can also be concluded from the well-known derivation of the golden rule in quantum mechanics. The condition $\tau_B \ll \tau_R$ for the Born-Markov approximation thus yields $\gamma_0 \ll \omega_0$, which is obviously a weak-coupling condition. This condition is usually very well satisfied in the quantum optical regime. For example, typical radiative inverse atomic lifetimes are of the order 10^7 s^{-1} to 10^9 s^{-1} or even much smaller, whereas optical frequencies are of the order 10^{15} s^{-1} . Furthermore, it must be noted that we need the condition $\tau_S \ll \tau_R$ if the master equation involves a number of different transition frequencies (see Section 3.3.1). This condition enables one to perform the rotating wave approximation and ensures that transitions belonging to different frequencies may be described as separate decay channels involving different Lindblad operators.

9.7.2 3.4.2 Decay of a two-level system

The simplest quantum system is a two-level system whose Hilbert space is spanned by just two states, an excited state $|e\rangle$ and a ground state $|g\rangle$. The Hilbert space of such a system is equivalent to that of a spin- $\frac{1}{2}$ system. In fact, the Pauli operators

$$\sigma_1 = |e\rangle\langle g| + |g\rangle\langle e|, \quad \sigma_2 = -i|e\rangle\langle g| + i|g\rangle\langle e|, \quad \sigma_3 = |e\rangle\langle e| - |g\rangle\langle g| \quad (3.209)$$

satisfy the commutation relations

$$[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\varepsilon_{ijk}\sigma_k, \quad (3.210)$$

as well as the anticommutation relations

$$\{\sigma_i, \sigma_j\} = 2\delta_{ij} \quad (3.211)$$

It will be convenient to define also the operators

$$\sigma_+ = |e\rangle\langle g| = \frac{1}{2}(\sigma_1 + i\sigma_2), \quad \sigma_- = |g\rangle\langle e| = \frac{1}{2}(\sigma_1 - i\sigma_2). \quad (3.212)$$

The corresponding matrix representations of these operators in the basis $|e\rangle, |g\rangle$ take the form

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (3.213)$$

and

$$\sigma_+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.214)$$

We take the free Hamiltonian H_S of the system to be diagonal in the basis $|e\rangle, |g\rangle$. With an appropriate choice for the ground state energy we then have

$$H_S = \frac{1}{2}\omega_0\sigma_3, \quad (3.215)$$

where $\omega_0 > 0$ is the transition frequency and we set again $\hbar = 1$. In the following we work in the interaction picture.

Physically, such a two-level system arises whenever the dynamics of the system under study is effectively confined to a two-dimensional subspace, that is under the condition that transitions to other levels may be neglected. To be specific we regard here the model to describe the dynamics of a two-level atom with a transition frequency ω_0 in the optical range. We note that the Pauli operators $\sigma_{\pm}$ represent eigenoperators of the atomic Hamiltonian,

$$[H_S, \sigma_-] = -\omega_0\sigma_-, \quad [H_S, \sigma_+] = +\omega_0\sigma_+, \quad (3.216)$$

and, hence, $\sigma_{\pm}$ changes the atomic energy by the amount $\pm\omega_0$, corresponding to the absorption and emission processes, respectively. We thus have two Lindblad operators

$$\vec{A}(\omega_0) \equiv \vec{A} = \vec{d}\sigma_-, \quad \vec{A}(-\omega_0) \equiv \vec{A}^\dagger = \vec{d}^*\sigma_+ \quad (3.217)$$

where $\vec{d} = \langle g|\vec{D}|e\rangle$ is the transition matrix element of the dipole operator (it is assumed here that the diagonals of the dipole operator vanish). Within the two-level approximation the atomic dipole operator in the interaction picture can thus be written as

$$\vec{D}(t) = \vec{d}\sigma_-e^{-i\omega_0 t} + \vec{d}^*\sigma_+e^{+i\omega_0 t}. \quad (3.218)$$

Neglecting the Lamb and Stark shift contribution we can now write the quantum optical master equation (3.206) in the form (writing ρ instead of ρ_S for simplicity)

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\rho(t) = & \gamma_0(N+1) \left(\sigma_- \rho(t) \sigma_+ - \frac{1}{2} \sigma_+ \sigma_- \rho(t) - \frac{1}{2} \rho(t) \sigma_+ \sigma_- \right) \\ & + \gamma_0 N \left(\sigma_+ \rho(t) \sigma_- - \frac{1}{2} \sigma_- \sigma_+ \rho(t) - \frac{1}{2} \rho(t) \sigma_- \sigma_+ \right), \end{aligned} \quad (3.219)$$

with the spontaneous emission rate

$$\gamma_0 = \frac{4\omega_0^3 |\vec{d}|^2}{3\hbar c^3}. \quad (3.220)$$

The dissipator of the master equation describes spontaneous emission processes (rate γ_0) as well as thermally induced emission and absorption processes (rates $\gamma_0 N$). The total transition rate will be denoted by

$$\gamma = \gamma_0(2N+1), \quad (3.221)$$

where $N = N(\omega_0)$ denotes the Planck distribution at the transition frequency. To solve eqn (3.219) it is convenient to represent the density matrix as

$$\rho(t) = \frac{1}{2}(I + \langle \vec{\sigma}(t) \rangle \cdot \vec{\sigma}) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(1 + \langle \sigma_3(t) \rangle) & \langle \sigma_-(t) \rangle \\ \langle \sigma_+(t) \rangle & \frac{1}{2}(1 - \langle \sigma_3(t) \rangle) \end{pmatrix}, \quad (3.222)$$

where the vector

$$\vec{v}(t) \equiv \langle \vec{\sigma}(t) \rangle = \text{tr}\{\vec{\sigma}\rho(t)\} \quad (3.223)$$

is known as the Bloch vector. It represents a real 3-vector satisfying $|\vec{v}(t)| \leq 1$. This condition is equivalent to the requirement that $\rho(t)$ must be positive. For $|\vec{v}(t)| < 1$ the corresponding density matrix describes a true statistical mixture, while a Bloch vector satisfying $|\vec{v}(t)| = 1$ represents a pure state. Thus we see that the set of density matrices of the two-level system is isomorphic to the unit sphere, known as the Bloch sphere, the surface of which is equal to the set of pure states.

The matrix elements $\rho_{11}(t) = p_e(t)$ and $\rho_{22}(t) = p_g(t)$ are the populations of the excited and ground state levels, respectively. The off-diagonals $\rho_{12}(t) = \rho_{21}^*(t)$ are the coherences given by the expectation values of the atomic raising and lowering operators $\sigma_{\pm}$. With the help of the algebra of the Pauli matrices one easily derives the differential equations

$$\frac{d}{dt} \langle \sigma_1(t) \rangle = -\frac{\gamma}{2} \langle \sigma_1(t) \rangle, \quad (3.224)$$

$$\frac{d}{dt} \langle \sigma_2(t) \rangle = -\frac{\gamma}{2} \langle \sigma_2(t) \rangle, \quad (3.225)$$

$$\frac{d}{dt} \langle \sigma_3(t) \rangle = -\gamma \langle \sigma_3(t) \rangle - \gamma_0. \quad (3.226)$$

We observe that the 3-component of the Bloch vector decays exponentially with rate γ , while the coherences $\langle \sigma_{\pm}(t) \rangle$ decay with rate $\gamma/2$. The stationary solution is given by

$$\langle \sigma_1 \rangle_s = \langle \sigma_2 \rangle_s = 0, \quad \langle \sigma_3 \rangle_s = -\frac{\gamma_0}{\gamma} = -\frac{1}{2N+1}, \quad (3.227)$$

and the stationary population of the upper level is found to be

$$p_e^s = \frac{1}{2} (1 + \langle \sigma_3 \rangle_s) = \frac{N}{2N+1}. \quad (3.228)$$

Of course, the stationary solution of the master equation is equal to the thermal equilibrium state $\rho_s = \rho_{\text{th}}$ given in eqn (3.144).

If we choose, for example, the initial state $\rho(0) = |g\rangle\langle g|$ we find the corresponding time-dependent solution

$$\langle \sigma_3(t) \rangle = -e^{-\gamma t} (1 + \langle \sigma_3 \rangle_s) + \langle \sigma_3 \rangle_s, \quad (3.229)$$

$$p_e(t) = p_e^s (1 - e^{-\gamma t}), \quad (3.230)$$

showing explicitly the exponential approach to the thermal equilibrium values.

9.7.3 3.4.3 Decay into a squeezed field vacuum

In the preceding subsection we have considered a reservoir which is stationary with respect to the bath dynamics. In order to give an example for a nonstationary environmental state we consider here a two-level system interacting with a reservoir in a state of the form $\rho_B = |\phi\rangle\langle\phi|$, where $|\phi\rangle$ represents a squeezed vacuum

$$|\phi\rangle = \prod_{\vec{k}, \lambda} S_{\vec{k}, \lambda}(\xi_k) |0\rangle. \quad (3.231)$$

Here, we have introduced the unitary squeeze operator (Walls and Milburn, 1994)

$$S_{\vec{k},\lambda}(\xi) = \exp \left[\frac{1}{2} \xi_k^* b_\lambda(\vec{k})^2 - \frac{1}{2} \xi_k b_\lambda^\dagger(\vec{k})^2 \right], \quad (3.232)$$

with $\xi_k = r_k e^{i\theta_k}$. With the help of the transformation properties

$$S_{\vec{k},\lambda}^\dagger(\xi_k) b_\lambda(\vec{k}) S_{\vec{k},\lambda}(\xi_k) = b_\lambda(\vec{k}) \cosh r_k - b_\lambda^\dagger(\vec{k}) e^{i\theta_k} \sinh r_k \quad (3.233)$$

$$S_{\vec{k},\lambda}^\dagger(\xi_k) b_\lambda^\dagger(\vec{k}) S_{\vec{k},\lambda}(\xi_k) = b_\lambda^\dagger(\vec{k}) \cosh r_k - b_\lambda(\vec{k}) e^{-i\theta_k} \sinh r_k \quad (3.234)$$

one obtains the expectation values (compare with eqns (3.195)-(3.197))

$$\langle b_\lambda(\vec{k}) b_{\lambda'}^\dagger(\vec{k}') \rangle = \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \delta_{\lambda\lambda'} (1 + N_k) \quad (3.235)$$

$$\langle b_\lambda^\dagger(\vec{k}) b_{\lambda'}(\vec{k}') \rangle = \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \delta_{\lambda\lambda'} N_k \quad (3.236)$$

$$\langle b_\lambda(\vec{k}) b_{\lambda'}(\vec{k}') \rangle = \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \delta_{\lambda\lambda'} M_k \quad (3.237)$$

$$\langle b_\lambda^\dagger(\vec{k}) b_{\lambda'}^\dagger(\vec{k}') \rangle = \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \delta_{\lambda\lambda'} M_k^* \quad (3.238)$$

where we have defined the quantities

$$N_k \equiv \sinh^2 r_k, \quad M_k \equiv -\cosh r_k \sinh r_k e^{i\theta_k} \quad (3.239)$$

We note that these relations are compatible with the commutation relations (3.177), (3.178) of the field operators and that

$$|M_k|^2 = N_k (N_k + 1) \quad (3.240)$$

As for a thermal reservoir we have $\langle \vec{E}(t) \rangle = \langle \phi | \vec{E}(t) | \phi \rangle = 0$. However, the correlation functions (3.189) of the electric field operator are no longer homogeneous in time since ρ_B is not an invariant state. As a consequence the spectral correlation tensor now depends explicitly on time t . With the help of eqn (3.191) the spectral correlation tensor for the squeezed vacuum can be written as follows,

$$\begin{aligned} \Gamma_{ij}(\omega) &= \frac{2\delta_{ij}}{3\pi\hbar c^3} \int_0^\infty d\omega_k \omega_k^3 \left[(1 + N_k) \int_0^\infty ds e^{-i(\omega_k - \omega)s} + N_k \int_0^\infty ds e^{+i(\omega_k + \omega)s} \right. \\ &\quad \left. - M_k e^{-2i\omega_k t} \int_0^\infty ds e^{+i(\omega_k + \omega)s} - M_k^* e^{+2i\omega_k t} \int_0^\infty ds e^{-i(\omega_k - \omega)s} \right] \\ &\equiv \Gamma_{ij}^{(1)}(\omega) + \Gamma_{ij}^{(2)}(\omega). \end{aligned} \quad (3.241)$$

It has been assumed that the squeezing is uniform over the total 4π solid angle. We observe that the spectral correlation tensor consists of two parts: The first contribution $\Gamma_{ij}^{(1)}(\omega)$ is independent of t and is formally identical to the thermal correlation tensor given in eqn (3.201), while the second contribution $\Gamma_{ij}^{(2)}(\omega)$ involves the rapidly oscillating exponentials $\exp(\pm 2i\omega_k t)$.

Correspondingly, the dissipator of the master equation consists of two parts,

$$\frac{d}{dt} \rho(t) = \mathcal{D}^{(1)}(\rho(t)) + \mathcal{D}^{(2)}(\rho(t)) \quad (3.242)$$

The contribution $\mathcal{D}^{(1)}$ is determined through $\Gamma_{ij}^{(1)}(\omega)$. Formally it therefore has the same structure as the thermal dissipator given by the right-hand side of

eqn (3.219), where N is the value of N_k at the resonance frequency $\omega_0 = ck_0$. It is given in terms of the resonant squeeze parameter r as

$$N = \sinh^2 r, \quad N + 1 = \cosh^2 r. \quad (3.243)$$

If we neglect the Lamb and Stark shift contributions we find for the timedependent part of the spectral correlation tensor

$$\Gamma_{ij}^{(2)}(\omega) = -\frac{2\omega^3}{3\hbar c^3} \delta_{ij} M^* e^{2i\omega t}, \quad \text{for } \omega > 0 \quad (3.244)$$

and

$$\Gamma_{ij}^{(2)}(\omega) = -\frac{2|\omega|^3}{3\hbar c^3} \delta_{ij} M e^{2i\omega t}, \quad \text{for } \omega < 0 \quad (3.245)$$

where again M is the value of M_k taken at the resonance frequency, that is

$$M = -\cosh r \sinh r e^{i\theta} \quad (3.246)$$

with the resonant squeeze parameter r and the resonant phase θ . In order to determine the contribution $\mathcal{D}^{(2)}$ of the dissipator of the master equation we substitute $\Gamma_{ij}^{(2)}(\omega)$ into the right-hand side of eqn (3.188) and perform the rotating wave approximation. Since $\Gamma_{ij}^{(2)}(\omega)$ oscillates with $\exp(2i\omega t)$ the rotating wave approximation selects exactly two resonant terms from the double frequency sum, namely the terms corresponding to the case $\omega = -\omega_0, \omega' = +\omega_0$ and to the case $\omega = +\omega_0, \omega' = -\omega_0$. The first case is seen to lead to the contribution

$$\vec{A}(\omega) \rho \vec{A}^\dagger(\omega') \equiv \vec{A}^\dagger \rho \vec{A} = \vec{d}^{*2} \sigma_+ \rho \sigma_+ \quad (3.247)$$

whereas the second case leads to the contribution

$$\vec{A}(\omega) \rho \vec{A}^\dagger(\omega') \equiv \vec{A} \rho \vec{A} = \vec{d}^2 \sigma_- \rho \sigma_- \quad (3.248)$$

Absorbing the phase of the dipole matrix element into the squeezing phase θ we therefore get

$$\mathcal{D}^{(2)}(\rho) = -\frac{\gamma_0}{2} [M \sigma_+ \rho \sigma_+ + M^* \sigma_- \rho \sigma_-] + \text{h.c.} \quad (3.249)$$

Adding the first part $\mathcal{D}^{(1)}(\rho)$ of the dissipator we finally arrive at the density matrix equation

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \rho(t) = & \gamma_0 (N + 1) \left(\sigma_- \rho(t) \sigma_+ - \frac{1}{2} \sigma_+ \sigma_- \rho(t) - \frac{1}{2} \rho(t) \sigma_+ \sigma_- \right) \\ & + \gamma_0 N \left(\sigma_+ \rho(t) \sigma_- - \frac{1}{2} \sigma_- \sigma_+ \rho(t) - \frac{1}{2} \rho(t) \sigma_- \sigma_+ \right) \\ & - \gamma_0 M \sigma_+ \rho(t) \sigma_+ - \gamma_0 M^* \sigma_- \rho(t) \sigma_-. \end{aligned} \quad (3.250)$$

This is the master equation describing the decay of a two-level system into a squeezed vacuum. It is important to realize that it can be written in Lindblad form. In fact, introducing the Lindblad operator

$$C \equiv \sigma_- \cosh r + \sigma_+ \sinh r e^{i\theta} \quad (3.251)$$

we find

$$\frac{d}{dt} \rho(t) = \gamma_0 \left(C \rho(t) C^\dagger - \frac{1}{2} C^\dagger C \rho(t) - \frac{1}{2} \rho(t) C^\dagger C \right). \quad (3.252)$$

Invoking the algebra of the Pauli matrices we obtain the equations of motion

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt} \langle \sigma_+(t) \rangle &= \frac{d}{dt} \langle \sigma_-(t) \rangle^* \\ &= -\frac{\gamma_0}{2} (\cosh^2 r + \sinh^2 r) \langle \sigma_+(t) \rangle + \gamma_0 \sinh r \cosh r e^{-i\theta} \langle \sigma_-(t) \rangle\end{aligned}\quad (3.253)$$

$$\frac{d}{dt} \langle \sigma_3(t) \rangle = -\gamma_0 (\cosh^2 r + \sinh^2 r) \langle \sigma_3(t) \rangle - \gamma_0. \quad (3.254)$$

These equations describe a phase-dependent relaxation of the coherences and a relaxation of the 3-component of the Bloch vector which is enhanced in comparison with the decay into the field vacuum. Setting $\theta = 0$ the equations of motion for the Bloch vector take the form

$$\frac{d}{dt} \langle \sigma_1(t) \rangle = -\frac{\gamma_0}{2} e^{-2r} \langle \sigma_1(t) \rangle, \quad (3.255)$$

$$\frac{d}{dt} \langle \sigma_2(t) \rangle = -\frac{\gamma_0}{2} e^{+2r} \langle \sigma_2(t) \rangle, \quad (3.256)$$

$$\frac{d}{dt} \langle \sigma_3(t) \rangle = -\gamma_0 (2 \sinh^2 r + 1) \langle \sigma_3(t) \rangle - \gamma_0. \quad (3.257)$$

The corresponding vacuum Bloch equations (eqns (3.224)-(3.226) for $\gamma = \gamma_0$) are obtained in the limit $r \rightarrow 0$. We observe that for a squeezed vacuum the components $\langle \sigma_{1,2} \rangle$ of the Bloch vector decay with different relaxation rates: In comparison to the vacuum case the relaxation rate is enhanced in one direction and diminished in the other. The 3-component of the Bloch vector approaches the stationary state

$$\langle \sigma_3 \rangle_s = -\frac{1}{2 \sinh^2 r + 1} \quad (3.258)$$

which has the same form as in eqn (3.227), where $N = \sinh^2 r$ here plays the rôle of the Planck distribution.

9.7.4 3.4.4 More general reservoirs

The form of the master equation (3.250) holds for a general environmental state ρ_B which can be represented by a product of independent modes satisfying $\langle b_\lambda(\vec{k}) \rangle = \langle b_\lambda^\dagger(\vec{k}) \rangle = 0$. For example, if we consider a squeezed thermal state, that is if we replace the vacuum state $|0\rangle\langle 0|$ used in the preceding subsection by a thermal equilibrium state and squeeze the latter, we get instead of eqns (3.243) and (3.246)

$$N = N_{\text{th}} (\cosh^2 r + \sinh^2 r) + \sinh^2 r, \quad (3.259)$$

$$M = -\cosh r \sinh r e^{i\theta} (2N_{\text{th}} + 1), \quad (3.260)$$

where we have written $N_{\text{th}} = 1/(\exp[\beta\omega_0] - 1)$ for the Planck distribution. Obviously, the quantities N and M are not independent. One easily verifies the relation

$$|M|^2 = N(N+1) - N_{\text{th}}(N_{\text{th}}+1). \quad (3.261)$$

The last equation shows that the inequality

$$|M|^2 \leq N(N+1) \quad (3.262)$$

holds. This inequality is satisfied for general ρ_B of the above form and may be proven with the help of an appropriate uncertainty relation. To this end we take a fixed mode $b \equiv b_\lambda(\vec{k})$ and write

$$\langle b^\dagger b \rangle = N, \quad \langle b b^\dagger \rangle = N + 1, \quad (3.263)$$

$$\langle b b \rangle = M = |M|e^{i\theta}, \quad \langle b^\dagger b^\dagger \rangle = M^* = |M|e^{-i\theta}. \quad (3.264)$$

This is the most general parametrization which is compatible with the commutation relations $[b, b^\dagger] = 1$. Next one defines the operators

$$X = \frac{1}{\sqrt{2}} (e^{-i\theta/2} b + e^{+i\theta/2} b^\dagger), \quad Y = \frac{i}{\sqrt{2}} (e^{-i\theta/2} b - e^{+i\theta/2} b^\dagger), \quad (3.265)$$

which are Hermitian and satisfy $\langle X \rangle = \langle Y \rangle = 0$ and $[X, Y] = -i$. The uncertainty relation $\langle X^2 \rangle \cdot \langle Y^2 \rangle \geq 1/4$ then immediately leads to the inequality (3.262).

The significance of the inequality (3.262) is that it guarantees the positivity of the generator of the master equation (3.250). In fact, the generator of eqn (3.250) is in the first standard form (3.63) with $F_1 = \sigma_-$, $F_2 = \sigma_+$ and the coefficient matrix

$$(a_{ij}) = \gamma_0 \begin{pmatrix} N + 1 & -M^* \\ -M & N \end{pmatrix}. \quad (3.266)$$

The positivity of this matrix leads to the condition (3.262).

9.7.5 3.4.5 Resonance fluorescence

Let us consider the case that the atomic transition $|e\rangle \leftrightarrow |g\rangle$ is driven by an external, coherent single-mode field on resonance. Invoking the dipole approximation we obtain the following interaction picture Hamiltonian describing the interaction of the system with the driving mode,

$$H_L = -\vec{E}_L(t) \cdot \vec{D}(t) \quad (3.267)$$

Here, the quantity

$$\vec{E}_L(t) = \vec{\varepsilon}^{-i\omega_0 t} + \vec{\varepsilon}^* e^{+i\omega_0 t} \quad (3.268)$$

is the electric field strength of the driving mode. The product

$$\Omega = 2\vec{\varepsilon} \cdot \vec{d}^* \quad (3.269)$$

is referred to as the Rabi frequency. In the following we choose the phase of the external field such that Ω is real and positive. With these definitions we can write the atom-field interaction in the rotating wave approximation as follows,

$$H_L = -\frac{\Omega}{2} (\sigma_+ + \sigma_-). \quad (3.270)$$

Now we couple the system to a thermal reservoir of radiation modes. According to Section 3.4.2 the quantum master equation becomes

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\rho(t) = & \frac{i\Omega}{2} [\sigma_+ + \sigma_-, \rho(t)] \\
& + \gamma_0(N+1) \left(\sigma_- \rho(t) \sigma_+ - \frac{1}{2} \sigma_+ \sigma_- \rho(t) - \frac{1}{2} \rho(t) \sigma_+ \sigma_- \right) \\
& + \gamma_0 N \left(\sigma_+ \rho(t) \sigma_- - \frac{1}{2} \sigma_- \sigma_+ \rho(t) - \frac{1}{2} \rho(t) \sigma_- \sigma_+ \right).
\end{aligned} \tag{3.271}$$

3.4.5.1 Equation of motion for the Bloch vector

The master equation (3.271) leads to the following system of differential equations,

$$\frac{d}{dt}\langle \vec{\sigma}(t) \rangle = G \langle \vec{\sigma}(t) \rangle + \vec{b}, \tag{3.272}$$

where we have introduced the matrix

$$G = \begin{pmatrix} -\gamma/2 & 0 & 0 \\ 0 & -\gamma/2 & \Omega \\ 0 & -\Omega & -\gamma \end{pmatrix} \tag{3.273}$$

and the 3-vector

$$\vec{b} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -\gamma_0 \end{pmatrix} \tag{3.274}$$

Equation (3.272) is known as the optical Bloch equation.

The stationary solution of the differential equation (3.272) is found to be

$$\langle \sigma_3 \rangle_s = -\frac{\gamma_0 \gamma}{\gamma^2 + 2\Omega^2}, \tag{3.275}$$

$$\langle \sigma_+ \rangle_s = \langle \sigma_- \rangle_s^* = \frac{-i\Omega\gamma_0}{\gamma^2 + 2\Omega^2}. \tag{3.276}$$

The stationary population of the upper level is therefore

$$p_e^s = \frac{1}{2} \frac{\gamma(\gamma - \gamma_0) + 2\Omega^2}{\gamma^2 + 2\Omega^2}. \tag{3.277}$$

At zero temperature ($N = 0, \gamma = \gamma_0$) the stationary solutions take the form

$$\langle \sigma_3 \rangle_s = -\frac{\gamma_0^2}{\gamma_0^2 + 2\Omega^2} \tag{3.278}$$

$$\langle \sigma_+ \rangle_s = \langle \sigma_- \rangle_s^* = \frac{-i\Omega\gamma_0}{\gamma_0^2 + 2\Omega^2} \tag{3.279}$$

while the stationary population of the upper level is

$$p_e^s = \frac{\Omega^2}{\gamma_0^2 + 2\Omega^2}. \tag{3.280}$$

In the strong driving limit $\Omega \gg \gamma_0$ we get the limiting forms $p_e^s = 1/2$ and $\langle \sigma_+ \rangle_s = -i\gamma_0/2\Omega$.

The time-dependent solution of the Bloch equation (3.272) is most easily found by introducing the vector

$$\langle\langle\vec{\sigma}(t)\rangle\rangle = \langle\vec{\sigma}(t)\rangle - \langle\vec{\sigma}\rangle_s. \quad (3.281)$$

Representing the difference to the stationary solution this vector satisfies the homogeneous equation

$$\frac{d}{dt}\langle\langle\vec{\sigma}(t)\rangle\rangle = G\langle\langle\vec{\sigma}(t)\rangle\rangle, \quad (3.282)$$

which can easily be solved by diagonalization of the matrix G . The eigenvalues of G are given by

$$\lambda_1 = -\frac{\gamma}{2}, \quad \lambda_{2,3} = -\frac{3\gamma}{4} \pm i\mu, \quad (3.283)$$

where we have introduced

$$\mu = \sqrt{\Omega^2 - \left(\frac{\gamma}{4}\right)^2} \quad (3.284)$$

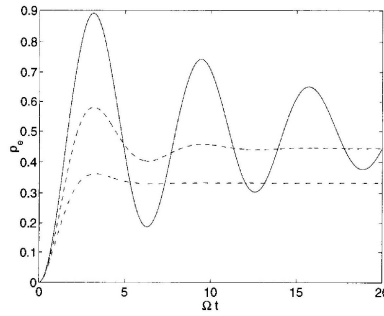


Fig. 3.3. The population of the upper level $p_e(t)$ for the driven two-level system as a function of time. Parameters: $\gamma_0/\Omega = 0.1$ (solid line), $\gamma_0/\Omega = 0.5$ (dashed line), and $\gamma_0/\Omega = 1$ (dashed-dotted line).

We note that all eigenvalues have negative real parts. It follows that any initial density matrix is driven to the unique stationary solution $\langle\vec{\sigma}\rangle_s$ of the Bloch equation determined above. The time-dependent solution can be represented by

$$\begin{aligned} \langle\langle\sigma_3(t)\rangle\rangle = & e^{-3\gamma t/4} \left[\cos \mu t - \frac{\gamma}{4\mu} \sin \mu t \right] \langle\langle\sigma_3(0)\rangle\rangle \\ & + \frac{i\Omega}{\mu} e^{-3\gamma t/4} \sin \mu t (\langle\langle\sigma_+(0)\rangle\rangle - \langle\langle\sigma_-(0)\rangle\rangle) \end{aligned} \quad (3.285)$$

and

$$\begin{aligned} \langle\langle\sigma_+(t)\rangle\rangle = & \frac{1}{2} e^{-\gamma t/2} (\langle\langle\sigma_+(0)\rangle\rangle + \langle\langle\sigma_-(0)\rangle\rangle) \\ & + \frac{1}{2} e^{-3\gamma t/4} \left[\cos \mu t + \frac{\gamma}{4\mu} \sin \mu t \right] (\langle\langle\sigma_+(0)\rangle\rangle - \langle\langle\sigma_-(0)\rangle\rangle) \\ & + \frac{i\Omega}{2\mu} e^{-3\gamma t/4} \sin \mu t \langle\langle\sigma_3(0)\rangle\rangle \end{aligned} \quad (3.286)$$

Let us consider here the case that the atom is initially in the ground state, $\rho(0) = |g\rangle\langle g|$, which gives

$$\langle\langle\sigma_{\pm}(0)\rangle\rangle = -\langle\sigma_{\pm}\rangle_s \quad (3.287)$$

$$\langle\langle\sigma_3(0)\rangle\rangle = -1 - \langle\sigma_3\rangle_s. \quad (3.288)$$

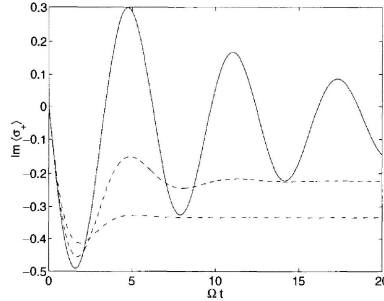


Fig. 3.4. The imaginary part of the coherence $\langle\sigma_+(t)\rangle$ for the driven two-level system as a function of time. Parameters: $\gamma_0/\Omega = 0.1$ (solid line), $\gamma_0/\Omega = 0.5$ (dashed line), and $\gamma_0/\Omega = 1$ (dashed-dotted line).

At zero temperature ($\gamma = \gamma_0$) we find for arbitrary driving strength

$$p_e(t) = \frac{\Omega^2}{\gamma_0^2 + 2\Omega^2} \left[1 - e^{-3\gamma_0 t/4} \left\{ \cos \mu t + \frac{3\gamma_0}{4\mu} \sin \mu t \right\} \right], \quad (3.289)$$

$$\langle\sigma_+(t)\rangle = \frac{-i\Omega\gamma_0}{\gamma_0^2 + 2\Omega^2} \left[1 - e^{-3\gamma_0 t/4} \left\{ \cos \mu t + \left(\frac{\gamma_0}{4\mu} - \frac{\Omega^2}{\gamma_0\mu} \right) \sin \mu t \right\} \right]. \quad (3.290)$$

In the underdamped case, which is defined by $\Omega > \gamma_0/4$, the quantity μ is real and both the occupation of the upper level and the coherences exhibit exponentially damped oscillations as shown in Figs. 3.3 and 3.4. By contrast, in the overdamped case, $\Omega < \gamma_0/4$, the quantity μ becomes purely imaginary and we write

$$\mu = i\tilde{\mu} = i\sqrt{\left(\frac{\gamma_0}{4}\right)^2 - \Omega^2}. \quad (3.291)$$

The occupation probabilities and the coherences then show a monotonic approach to their stationary values.

In the limit of very strong driving, $\Omega \gg \gamma_0/4$, we obtain the asymptotic expressions,

$$p_e(t) \approx \frac{1}{2} \left[1 - e^{-3\gamma_0 t/4} \cos \Omega t \right] \quad (3.292)$$

$$\langle\sigma_+(t)\rangle \approx -\frac{i}{2} e^{-3\gamma_0 t/4} \sin \Omega t \quad (3.293)$$

The tip of the Bloch vector thus follows an exponential spiral in the (2,3)-plane around the origin, the circular frequency being equal to the Rabi frequency Ω .

3.4.5.2 Spectrum of resonance fluorescence

As an application of the quantum regression theorem (see Section 3.2.4) we determine the fluorescence spectrum of the emitted radiation in the stationary state. The radiation spectrum

is determined by a certain two-time correlation function of the system. To see this we first note that the positive frequency component of the electric dipole field radiated by the source is found from the retarded solution of the Maxwell equations to be

$$\vec{E}^{(+)}(t, \vec{x}) = \frac{\omega_0^2}{c^2 r} ([\vec{n} \times \vec{d}] \times \vec{n}) \sigma_{-}(t - r/c) \quad (3.294)$$

Here, the dipole is located at the origin of the coordinate system, $r = |\vec{x}|$ and $\vec{n} = \vec{x}/r$ is the unit vector pointing into the direction of $\vec{x}$. This equation relates the positive frequency component of the radiated field to the atomic lowering operator σ_{-} at the retarded time $t - r/c$. On the other hand, the spectral intensity radiated per unit solid angle by the oscillating dipole is given by

$$\frac{dI(\omega)}{d\Omega} = \frac{cr^2}{4\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\tau}{2\pi} e^{i\omega\tau} \langle \vec{E}^{(-)}(t, \vec{x}) \vec{E}^{(+)}(t + \tau, \vec{x}) \rangle_s \quad (3.295)$$

Substituting eqn (3.294) one finds

$$\frac{dI(\omega)}{d\Omega} = \frac{\omega_0^4}{8\pi^2 c^3} |(\vec{n} \times \vec{d}) \times \vec{n}|^2 S(\omega), \quad (3.296)$$

which shows the typical angular distribution of dipole radiation, whereas the frequency dependence is embodied in the spectral function

$$S(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau e^{-i\omega\tau} \langle \sigma_{+}(\tau) \sigma_{-}(0) \rangle_s \quad (3.297)$$

Here, we have employed the homogeneity in time of the stationary correlation function.

Thus, in order to obtain the spectrum we need the atomic correlation function $\langle \sigma_{+}(\tau) \sigma_{-}(0) \rangle_s$. To this end, we consider the vector

$$\langle \langle \vec{\sigma}(\tau) \sigma_{-}(0) \rangle \rangle \equiv \langle \vec{\sigma}(\tau) \sigma_{-}(0) \rangle_s - \langle \vec{\sigma} \rangle_s \langle \sigma_{-} \rangle_s. \quad (3.298)$$

It follows from the quantum regression theorem that the dynamics of this vector is determined through the homogeneous part of the optical Bloch equation, i.e.

$$\frac{d}{d\tau} \langle \langle \vec{\sigma}(\tau) \sigma_{-}(0) \rangle \rangle = G \langle \langle \vec{\sigma}(\tau) \sigma_{-}(0) \rangle \rangle. \quad (3.299)$$

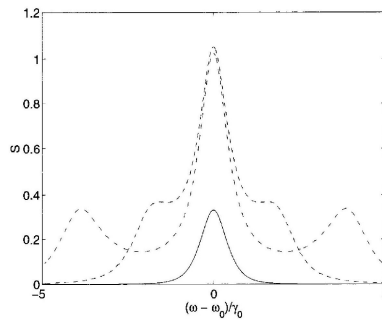


Fig. 3.5. The spectrum of resonance fluorescence according to (3.305) without the elastic contribution. The plot shows $S(\omega)$ for the three values $4\Omega/\gamma_0 = 2$ (solid line), $4\Omega/\gamma_0 = 8$ (dashed line), and $4\Omega/\gamma_0 = 16$ (dashed-dotted line).

We conclude that the desired correlation function $\langle \langle \sigma_{+}(\tau) \sigma_{-}(0) \rangle \rangle$ is given by the right-hand side of eqn (3.286), where the initial values $\langle \langle \sigma_{\pm}(0) \rangle \rangle$ and $\langle \langle \sigma_3(0) \rangle \rangle$ must be replaced, respectively, by

$$\langle\langle\sigma_+(0)\sigma_-(0)\rangle\rangle = \langle\sigma_+\sigma_-\rangle_s - \langle\sigma_+\rangle_s \langle\sigma_-\rangle_s = p_e^s - |\langle\sigma_+\rangle_s|^2, \quad (3.300)$$

$$\langle\langle\sigma_-(0)\sigma_-(0)\rangle\rangle = \langle\sigma_-\sigma_-\rangle_s - \langle\sigma_-\rangle_s \langle\sigma_-\rangle_s = -\langle\sigma_-\rangle_s^2, \quad (3.301)$$

$$\langle\langle\sigma_3(0)\sigma_-(0)\rangle\rangle = \langle\sigma_3\sigma_-\rangle_s - \langle\sigma_3\rangle_s \langle\sigma_-\rangle_s = -\langle\sigma_-\rangle_s - \langle\sigma_3\rangle_s \langle\sigma_-\rangle_s. \quad (3.302)$$

Finally, it must be taken into account that the Bloch equations have been solved in the interaction picture. To return to the Schrödinger picture we replace $\sigma_{\pm}(t)$ by $\exp[\pm i\omega_0 t] \sigma_{\pm}(t)$. This yields the two-time correlation function in the stationary state

$$\begin{aligned} \langle\sigma_+(\tau)\sigma_-(0)\rangle_s &= \frac{\Omega^2}{\gamma_0^2 + 2\Omega^2} \left\{ \frac{\gamma_0^2}{\gamma_0^2 + 2\Omega^2} \exp[i\omega_0\tau] + \frac{1}{2} \exp[-(\gamma_0/2 - i\omega_0)\tau] \right. \\ &+ A_+ \exp\left[-\left(\frac{3\gamma_0}{4} - \tilde{\mu} - i\omega_0\right)\tau\right] \\ &\left. + A_- \exp\left[-\left(\frac{3\gamma_0}{4} + \tilde{\mu} - i\omega_0\right)\tau\right] \right\} \end{aligned} \quad (3.303)$$

where we have defined the amplitudes

$$A_{\pm} = \frac{1}{4} \frac{1}{\gamma_0^2 + 2\Omega^2} \left[2\Omega^2 - \gamma_0^2 \pm \frac{\gamma_0}{4\tilde{\mu}} (10\Omega^2 - \gamma_0^2) \right]. \quad (3.304)$$

Equation (3.303) gives the two-time correlation for $\tau \geq 0$; for negative times it is found with the help of the relation $\langle\sigma_+(-\tau)\sigma_-(0)\rangle_s = \langle\sigma_+(\tau)\sigma_-(0)\rangle_s^*$.

The correlation function is seen to consist of four terms. The first term represents the contribution from elastic Rayleigh scattering which gives rise to a δ -shape spectral function (see below). The other three terms describe inelastic scattering processes and yield Lorentzian line shapes. In the overdamped case, $\Omega < \gamma_0/4$, the quantity $\tilde{\mu}$ is real, such that the spectral function contains a sum of three Lorentzian peaks centred at $\omega = \omega_0$. If one goes over to the underdamped case, $\Omega > \gamma_0/4$, the quantity $\tilde{\mu} = -i\mu$ becomes imaginary and the single inelastic peak splits into three peaks centred at $\omega = \omega_0$ and $\omega = \omega_0 \pm \mu$. In fact, on taking the Fourier transform of (3.303) we find the spectral function for the fluorescence radiation of an atomic dipole in the underdamped case (see Fig. 3.5):

$$\begin{aligned} S(\omega) &= \frac{2\Omega^2}{\gamma_0^2 + 2\Omega^2} \left\{ \frac{\pi\gamma_0^2}{\gamma_0^2 + 2\Omega^2} \delta(\omega - \omega_0) + \frac{1}{2} \frac{\gamma_0/2}{(\gamma_0/2)^2 + (\omega - \omega_0)^2} \right. \\ &\quad \left. + \Re \frac{A_+ (3\gamma_0/4 - i[\omega - \omega_0 + \mu])}{(3\gamma_0/4)^2 + (\omega - \omega_0 + \mu)^2} + \Re \frac{A_- (3\gamma_0/4 - i[\omega - \omega_0 - \mu])}{(3\gamma_0/4)^2 + (\omega - \omega_0 - \mu)^2} \right\}. \end{aligned} \quad (3.305)$$

In the limit of strong driving, $\Omega \gg \gamma_0/4$, the amplitudes $A_{\pm}$ approach 1/4 and the elastic scattering contribution is negligible. This yields the following spectrum in the strong driving limit,

$$\begin{aligned} S(\omega) &= \frac{1}{2} \frac{\gamma_0/2}{(\gamma_0/2)^2 + (\omega - \omega_0)^2} \\ &\quad + \frac{1}{4} \frac{3\gamma_0/4}{(3\gamma_0/4)^2 + (\omega - \omega_0 + \Omega)^2} + \frac{1}{4} \frac{3\gamma_0/4}{(3\gamma_0/4)^2 + (\omega - \omega_0 - \Omega)^2}. \end{aligned} \quad (3.306)$$

The spectrum thus consists of three Lorentzian peaks: A central peak at $\omega = \omega_0$ with width $\gamma_0/2$, and two sideband peaks at $\omega = \omega_0 \pm \Omega$ with width $3\gamma_0/4$. The heights of the peaks

are in the ratio 1 : 3 : 1, while their integrated intensities are in the ratio 1 : 2 : 1. The above spectrum was derived theoretically by Mollow (1969), and verified experimentally by Wu, Grove and Ezekiel (1975) and by Hartig et al. (1976). Further interesting features of the two-level system, such as the photon statistics and the phenomenon of photon antibunching, will be discussed in Section 6.3.2.

9.7.6 3.4.6 The damped harmonic oscillator

As a further example of a dynamical semigroup we study the master equation for a damped harmonic oscillator. The free evolution is generated by the system Hamiltonian $H_S = \omega_0 a^\dagger a$, describing a harmonic oscillator with frequency ω_0 . The Schrödinger picture master equation reads

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\rho_S(t) = & -i\omega_0 [a^\dagger a, \rho_S(t)] \\ & + \gamma_0(N+1) \left\{ a\rho_S(t)a^\dagger - \frac{1}{2}a^\dagger a\rho_S(t) - \frac{1}{2}\rho_S(t)a^\dagger a \right\} \\ & + \gamma_0 N \left\{ a^\dagger \rho_S(t)a - \frac{1}{2}aa^\dagger \rho_S(t) - \frac{1}{2}\rho_S(t)aa^\dagger \right\} \\ \equiv & \mathcal{L}\rho_S(t). \end{aligned} \quad (3.307)$$

This equation may be used, for example, to describe the damping of an electromagnetic field mode inside a cavity, in which case $a^\dagger$ and a denote the creation and annihilation operators of the cavity mode. The environment is provided, for example, by the modes outside the cavity and leads to a damping of the cavity mode with a rate γ_0 . The quantity

$$N = [\exp(\omega_0/k_B T) - 1]^{-1} \quad (3.308)$$

is the mean number of quanta in a mode with frequency ω_0 of the thermal reservoir.

3.4.6.1 Pauli master equation and stationary solution

We denote by $|n\rangle, n = 0, 1, 2, \dots$, the n -th oscillator eigenstate, i.e. $a^\dagger a|n\rangle = n|n\rangle$. The master equation (3.307) leads to a closed equation for the populations of the n -th level,

$$P(n, t) = \langle n | \rho_S(t) | n \rangle, \quad (3.309)$$

which takes on the form of a classical master equation for a one-step process (see Section 1.4.4.2), the Pauli master equation

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}P(n, t) = & \gamma_0(N+1)[(n+1)P(n+1, t) - nP(n, t)] \\ & + \gamma_0 N[nP(n-1, t) - \langle n+1 \rangle P(n, t)] \end{aligned} \quad (3.310)$$

The stationary solution of this equation is given by

$$P_s(n) = \frac{1}{1+N} \left(\frac{N}{1+N} \right)^n. \quad (3.311)$$

Invoking eqn (3.308) this can be rewritten as

$$P_s(n) = [1 - \exp(-\omega_0/k_B T)] \exp[-n\omega_0/k_B T], \quad (3.312)$$

which is recognized as the Boltzmann distribution over the eigenstates of the oscillator. The stationary value for the mean number of quanta in the mode is thus equal to the thermal average,

$$\langle a^\dagger a \rangle_s = \sum_{n=0}^{\infty} n P_s(n) = N. \quad (3.313)$$

3.4.6.2 Adjoint master equation

To investigate the dynamics one may deduce equations of motion for expectation values of system operators directly from the master equation. Alternatively, one can use the adjoint master equation (3.84) which becomes

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} A_H(t) = & + i\omega_0 [a^\dagger a, A_H(t)] \\ & + \gamma_0(N+1) \left\{ a^\dagger A_H(t) a - \frac{1}{2} a^\dagger a A_H(t) - \frac{1}{2} A_H(t) a^\dagger a \right\} \\ & + \gamma_0 N \left\{ a A_H(t) a^\dagger - \frac{1}{2} a a^\dagger A_H(t) - \frac{1}{2} A_H(t) a a^\dagger \right\} \end{aligned} \quad (3.314)$$

in order to determine the dynamics of the corresponding Heisenberg operators $A_H(t)$. Solving this equation with the initial condition that Heisenberg and Schrödinger operators coincide at $t = 0$ one finds, for example,

$$a_H(t) = e^{(-i\omega_0 - \gamma_0/2)t} a, \quad (3.315)$$

$$a_H^\dagger(t) = e^{(+i\omega_0 - \gamma_0/2)t} a^\dagger, \quad (3.316)$$

$$(a^\dagger a)_H(t) = e^{-\gamma_0 t} a^\dagger a + N(1 - e^{-\gamma_0 t}). \quad (3.317)$$

From these equations one immediately deduces the mean amplitude of the oscillator,

$$\langle a(t) \rangle = \text{tr} \{ a_H(t) \rho_S(0) \} = \langle a(0) \rangle e^{(-i\omega_0 - \gamma_0/2)t}, \quad (3.318)$$

and the mean number of quanta,

$$\langle a^\dagger a(t) \rangle = \text{tr} \{ (a^\dagger a)_H(t) \rho_S(0) \} = \langle a^\dagger a(0) \rangle e^{-\gamma_0 t} + N(1 - e^{-\gamma_0 t}). \quad (3.319)$$

The mean oscillator amplitude thus follows an exponential spiral in the complex plane, converging for $\gamma_0 t \gg 1$ to the origin. The mean number of quanta is seen to start from the initial value $\langle a^\dagger a(0) \rangle$ and approaches, for times which are large compared to the inverse damping rate, the thermal average N which is independent of the initial value.

9.7.7 3.4.6.3 Coherent state representation

In quantum optical applications one often studies the master equation with the help of phase space methods. As an example we consider here the coherent state or P -representation of the master equation. More details and various other related representations may be found in Gardiner and Zoller (2000). For any complex number α the coherent state $|\alpha\rangle$ is defined in terms of the number states $|n\rangle$ of the oscillator by

$$|\alpha\rangle = \exp\left[-\frac{1}{2}|\alpha|^2\right] \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle = \exp[\alpha a^\dagger - \alpha^* a] |0\rangle \quad (3.320)$$

The coherent states are normalized to 1 but are not orthogonal to each other. The overlap of two coherent states is given by

$$\langle\alpha|\beta\rangle = \exp\left[-\frac{1}{2}|\alpha|^2 - \frac{1}{2}|\beta|^2 + \alpha^* \beta\right]. \quad (3.321)$$

The coherent states are eigenstates of the non-Hermitian operator a , that is

$$a|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle. \quad (3.322)$$

They form an overcomplete set of states satisfying the completeness relation

$$\frac{1}{\pi} \int d^2\alpha |\alpha\rangle\langle\alpha| = I \quad (3.323)$$

The coherent state representation of the system's density matrix goes back to Glauber (1963) and Sudarshan (1963) and is defined by

$$\rho_S(t) = \int d^2\alpha P(\alpha, \alpha^*, t) |\alpha\rangle\langle\alpha|. \quad (3.324)$$

Thus, $\rho_S(t)$ is represented as a mixture of coherent states $|\alpha\rangle$ with a corresponding weight function $P(\alpha, \alpha^*, t)$ which is uniquely defined by the given density matrix. It should be noted, however, that P is only some kind of quasi-probability for it is, in general, not a positive distribution function. It can be shown (Klauder, McKenna and Currie, 1965) that the distribution P exists for any density matrix provided one permits P to be a generalized, singular function. The normalization of the density matrix leads to the normalization condition

$$\text{tr}_S \rho_S(t) = \int d^2\alpha P(\alpha, \alpha^*, t) = 1 \quad (3.325)$$

A product of (equal-time) creation and annihilation operators $a^\dagger(t), a(t)$ is said to be normally ordered if all creation operators stand to the left of all annihilation operators. For such a normally ordered product we find

$$\langle (a^\dagger(t))^p a(t)^q \rangle = \int d^2\alpha (\alpha^*)^p \alpha^q P(\alpha, \alpha^*, t) \quad (3.326)$$

This is an important property of the P-representation which means that the expectation value of any normally ordered product of creation and annihilation operators transforms into a corresponding moment of the distribution $P(\alpha, \alpha^*, t)$.

To derive an equation for $P(\alpha, \alpha^*, t)$ one substitutes the P-representation into the quantum master equation (3.307) and uses the properties

$$a|\alpha\rangle\langle\alpha| = \alpha|\alpha\rangle\langle\alpha|, \quad (3.327)$$

$$|\alpha\rangle\langle\alpha|a^\dagger = \alpha^*|\alpha\rangle\langle\alpha|, \quad (3.328)$$

$$a^\dagger|\alpha\rangle\langle\alpha| = \left(\frac{\partial}{\partial\alpha} + \alpha^*\right)|\alpha\rangle\langle\alpha|, \quad (3.329)$$

$$|\alpha\rangle\langle\alpha|a = \left(\frac{\partial}{\partial\alpha^*} + \alpha\right)|\alpha\rangle\langle\alpha|, \quad (3.330)$$

which may easily be deduced from the definition for the coherent states. Next, one performs an integration by parts (assuming zero boundary conditions at infinity) which introduces an additional minus sign for each differential operator. The above properties then show that we have the following correspondences,

$$a\rho_S \leftrightarrow \alpha P, \quad (3.331)$$

$$\rho_S a^\dagger \leftrightarrow \alpha^* P, \quad (3.332)$$

$$a^\dagger \rho_S \leftrightarrow \left(-\frac{\partial}{\partial \alpha} + \alpha^*\right) P, \quad (3.333)$$

$$\rho_S a \leftrightarrow \left(-\frac{\partial}{\partial \alpha^*} + \alpha\right) P. \quad (3.334)$$

With the help of these relations one easily derives the following Fokker-Planck type equation of motion in the P-representation, (Scully and Zubairy, 1997),

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} P(\alpha, \alpha^*, t) = & - \left[\left(-i\omega_0 - \frac{\gamma_0}{2}\right) \frac{\partial}{\partial \alpha} \alpha + \left(+i\omega_0 - \frac{\gamma_0}{2}\right) \frac{\partial}{\partial \alpha^*} \alpha^* \right] P(\alpha, \alpha^*, t) \\ & + \gamma_0 N \frac{\partial^2}{\partial \alpha \partial \alpha^*} P(\alpha, \alpha^*, t) \end{aligned} \quad (3.335)$$

The structure of this equation is similar to that of the classical Fokker-Planck equation (1.129) for a diffusion process: The first term on the right-hand side represents the deterministic drift, while the second term has the structure of a diffusion term.

Let us solve eqn (3.335) for the initial value

$$P(\alpha, \alpha^*, 0) = \delta^2(\alpha - \alpha_0) \quad (3.336)$$

which means that the initial state is the coherent state $|\alpha_0\rangle$. The corresponding solution can be obtained by substituting the Gaussian ansatz

$$P(\alpha, \alpha^*, t) = \frac{1}{\pi \sigma^2(t)} \exp \left[-\frac{|\alpha - \beta(t)|^2}{\sigma^2(t)} \right] \quad (3.337)$$

into (3.335) and deriving differential equations for the time-dependent functions $\sigma^2(t)$ and $\beta(t)$. However, a simpler way is to observe that $\beta(t)$ is equal to the mean amplitude since

$$\beta(t) = \int d^2\alpha \alpha P(\alpha, \alpha^*, t) = \langle \alpha_0 | a_H(t) | \alpha_0 \rangle = \alpha_0 e^{(-i\omega_0 - \gamma_0/2)t}. \quad (3.338)$$

Correspondingly, we find that $\sigma^2(t)$ is equal to the variance of $a^\dagger a$ which can be obtained using (3.317),

$$\begin{aligned} \sigma^2(t) &= \text{Var}(a^\dagger(t)a(t)) \\ &= \langle \alpha_0 | (a^\dagger a)_H(t) | \alpha_0 \rangle - \alpha_0^* \alpha_0 e^{-\gamma_0 t} \\ &= N(1 - e^{-\gamma_0 t}). \end{aligned} \quad (3.339)$$

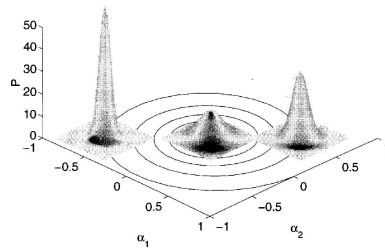


Fig. 3.6. Coherent state representation of the damped harmonic oscillator. The figure shows the distribution function $P(\alpha, \alpha^*, t)$ according to eqn (3.337) over the complex phase plane with coordinates $\alpha = \alpha_1 + i\alpha_2$ at three different times given by $\omega_0 t = 3\pi/4, 7\pi/4, 32\pi$. Parameters: $\gamma_0/\omega_0 = 0.1, \alpha_0 = 1$, and $N = 0.025$. The trajectory of the mean amplitude $\beta(t)$ is also shown.

The P-representation is therefore given by a Gaussian function whose mean value spirals around the origin of the phase plane. The width $\sigma^2(t)$ increases from zero to the thermal average N when the oscillator comes to equilibrium with the surrounding reservoir (see Fig. 3.6). We also note that at zero temperature ($N = 0$) the initial coherent state remains a coherent state under the time evolution.

The Fokker-Planck equation (3.335) describes the evolution of a complex Ornstein-Uhlenbeck process (see Section 1.4.5), the equivalent stochastic Itô differential equation (see Section 1.5.4.1) being given by

$$d\alpha(t) = \left(-i\omega_0 - \frac{\gamma_0}{2}\right) \alpha(t)dt + \sqrt{\gamma_0 N} dW(t). \quad (3.340)$$

Here, $dW(t)$ is the increment of a complex Wiener process which satisfies

$$E[dW(t)] = E[dW^*(t)] = 0 \quad (3.341)$$

$$dW(t)dW(t) = dW^*(t)dW^*(t) = 0 \quad (3.342)$$

$$dW(t)dW^*(t) = dt \quad (3.343)$$

The complex increment can be represented in terms of two statistically independent real Wiener processes as follows

$$dW(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} (dW_1(t) + idW_2(t)) \quad (3.344)$$

9.7.8 Open two-level system, Lasers, Bloch's equations

(write this also in quantum optics better. I'll think later, what to leave here and what to move to that note?)

уравнение Линдблада при спонтанной эмиссии

Решим уравнение Линдблада для эволюции матрицы плотности двухуровневой системы, когда релаксационный член описывает потери на спонтанную эмиссию (естественная ширина спектральной линии).

Уравнение для матрицы плотности в виде квантового уравнения Лиувилля (уравнения фон Неймана)

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

является как мощным инструментом исследования функции распределения, так и источником противоречий.

сохранение энтропии

Убедимся в том, что согласно ему энтропия замкнутой квантовой системы $S = -\text{Sp}\{\hat{\rho} \ln \hat{\rho}\}$ сохраняется.

Прямым дифференцированием получаем $-\dot{S} = \text{Sp}\{\dot{\hat{\rho}} \ln \hat{\rho}\} + \text{Sp} \dot{\hat{\rho}}$.

Подставляя в первое слагаемое $\hat{\rho}$ из уравнения фон Неймана $\frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{H}, \hat{\rho}]$ и используя циклическую перестановку под знаком следа, получаем $\text{Sp}\{\hat{H}\hat{\rho} \ln \hat{\rho}\} - \text{Sp}\{\hat{\rho}\hat{H} \ln \hat{\rho}\} = 0$.

Второе слагаемое также равно нулю из-за нормировки матрицы плотности условием $\text{Sp} \hat{\rho} = 1$.

Таким образом, энтропия замкнутой системы не возрастает, $dS/dt = 0$, и она не сможет прийти к равновесию.

Выход из этого противоречия заключается в том, чтобы учесть, что замкнутых систем не бывает и рассмотреть открытую систему.

Открытая квантовая система взаимодействует с окружением (резервуаром).

Динамика открытой квантовой системы неэрмитова и описывается уравнением Линдблада:

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

Это уравнение описывает релаксацию системы к равновесному гиббсовскому состоянию.

Конкретный вид релаксационного оператора Линдблада $\mathcal{L}$ зависит от характера взаимодействия системы и резервуара.

В отличие от уравнения фон Неймана, описывающего эрмитову динамику, уравнение Линдблада совместимо с началами термодинамики.

Оно позволяет объяснить релаксацию к распределению Гиббса $\exp\{(F - \hat{H})/T\}$, второе начало термодинамики (закон возрастания энтропии) и т.д.

уравнение Паули из правила Ферми

Дадим качественные соображения, на основе которых оно может быть получено.

Для того, чтобы описать релаксацию открытой квантовой системы, воспользуемся золотым правилом Ферми, вычисляющего вероятность перехода из состояния дискретного спектра в непрерывный.

Пусть в начальный момент времени открытая система S находилась в одном из возбужденных состояний $|S_i\rangle$, а резервуар R находился в равновесном состоянии.

Резервуар так велик, что содержит континуум мод и его спектр непрерывен.

Взаимодействие между системой и резервуаром имеет вид: $\hat{H}_{SR} = \lambda \hat{S} \hat{R}$, где λ - размерный параметр, а операторы $\hat{S}$ и $\hat{R}$ описывают систему и резервуар соответственно.

Тогда вероятность перехода из начального состояния системы и резервуара $|S_i, R_i\rangle$ с энергией системы E_i в конечное состояние $|S_f, R_f\rangle$ с энергией системы E_f и числом конечных состояний резервуара в интервале от ν_f до $\nu_f + d\nu_f$ дается выражением

$$dw_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle S_f, R_f | \hat{H}_{SR} | S_i, R_i \rangle \right|^2 \delta(E_i - E_f - \hbar\omega_{if}) d\nu_f$$

Мы считаем, что квант возбуждения системы $\hbar\omega_{if} = E_i - E_f$ перешел в резервуар.

Если теперь просуммировать по всем возможным конечным состояниям резервуара, которые имеют энергию $\hbar\omega_{if}$, то мы получим полную вероятность перехода в единицу времени системы из состояния $|S_i\rangle$ в состояние $|S_f\rangle$ вне зависимости от конечного состояния резервуара.

Без ограничения общности эта полная скорость перехода w_{fi} может быть представлена в виде $w_{fi} = \gamma_{if} |\langle f | \hat{S} | i \rangle|^2 \equiv \gamma_{if} |S_{fi}|^2$, где мы в явном виде выделили матричный элемент перехода одной только системы из состояния $|S_i\rangle$ в состояние $|S_f\rangle$.

Вся информация о резервуаре после усреднения по его степеням свободы содержится в γ_{if} .

По своему определению, величина вероятности перехода в единицу времени означает, что диагональный элемент матрицы плотности ρ_{ii} заселения состояния $|S_i\rangle$ меняется по

закону

$$\dot{\rho}_{ii} = -\gamma_{if} |\langle f | \hat{S} | i \rangle|^2 \rho_{ii}.$$

В то же время, вероятность заселенности ρ_{ff} состояния $|S_f\rangle$ будет меняться как

$$\dot{\rho}_{ff} = \gamma_{if} |\langle f | \hat{S} | i \rangle|^2 \rho_{ii},$$

поскольку суммарная вероятность должна сохраняться.

Полученный результат очевидным образом обобщается на динамику вероятностей заселенностей всех собственных состояний системы $|k\rangle$, когда их больше двух.

Собственные состояния определяются из уравнения Шредингера $\hat{H}_S |k\rangle = E_k |k\rangle$

Результирующая система уравнений имеет вид

$$\dot{\rho}_{k_1 k_1} = -\rho_{k_1 k_1} \sum_{k_2=1}^N \gamma_{k_1 k_2} |S_{k_1 k_2}|^2 + \sum_{k_2=1}^N \rho_{k_2 k_2} \gamma_{k_2 k_1} |S_{k_2 k_1}|^2, \quad \left[\sum_{k_1=1}^N \dot{\rho}_{k_1 k_1} = \frac{d}{dt} \sum_{k_1=1}^N \rho_{k_1 k_1} = 0 \right],$$

где учтены переходы между всеми собственными состояниями.

Полученная система уравнений называется уравнениями Паули.

Они описывают динамику диагональных элементов матрицы плотности.

Какова будет динамика недиагональных элементов матрицы плотности? Строгое рассмотрение показывает, что любой процесс перехода из одного собственного состояния в другое сопровождается затуханием недиагональных элементов.

При релаксации к равновесию каждый недиагональный элемент эволюционирует как

$$\dot{\rho}_{fi} = -\frac{1}{2} \left(\gamma_{fi} |\langle f | \hat{S} | i \rangle|^2 + \gamma_{if} |\langle i | \hat{S} | f \rangle|^2 \right) \rho_{fi}.$$

Если учесть переходы из каждого состояния в каждое, то получаем

$$\dot{\rho}_{k_1 k_2} = -\frac{1}{2} \sum_{k'} \left(\gamma_{k' k_1} |S_{k' k_1}|^2 + \gamma_{k' k_2} |S_{k' k_2}|^2 \right) \rho_{k_1 k_2}.$$

Два уравнения для диагональных и недиагональных элементов можно переписать в виде одного уравнения на матрицу плотности открытой системы:

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

где суммирование ведется по всевозможным парам собственных состояний $k = \{k_1, k_2\}$.

Такое уравнение называется уравнением Линдблада.

Его более строгий вывод показывает, что оно справедливо только при выполнении двух приближений: борновского и марковского.

Борновское приближение означает, что система не меняет состояние резервуара.

Марковское приближение означает, что мы можем описывать динамику системы локальным по времени уравнением.

Уравнение Линдблада является модельным и приближенным.

Его достоинством является то, что оно позволяет описать релаксацию открытой системы к равновесию и совместимо с началами термодинамики.

Его стандартный вид следующий:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{\rho}(t)}{\partial t} &= \frac{1}{i\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}] + \frac{1}{2} \sum_k \left([\hat{L}_k \hat{\rho}, \hat{L}_k^+] + [\hat{L}_k, \hat{\rho} \hat{L}_k^+] \right) \equiv \\ &\equiv \frac{1}{i\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}] + \frac{1}{2} \sum_k \left(2\hat{L}_k \hat{\rho} \hat{L}_k^+ - \hat{L}_k^+ \hat{L}_k \hat{\rho} - \hat{\rho} \hat{L}_k^+ \hat{L}_k \right) \end{aligned}$$

где $\hat{L}_k$ - операторы Линдблада.

Уравнение Линдблада является наиболее общим уравнением, описывающим неунитарную эволюцию матрицы плотности открытой квантовой подсистемы.

Его еще называют квантовым марковским уравнением.

некогерентная накачка и спонтанное излучение

с) Рассмотрим некогерентную накачку в качестве линдбладана.

Рассмотрим атом как двухуровневую систему (ДУС).

В нашем случае роль резервуара выполняет континуум мод электромагнитного поля свободного пространства.

Гамильтониан ДУС с основным состоянием $|g\rangle$ с нулевой энергией и возбужденным состоянием $|e\rangle$ с энергией $\hbar\omega_0$ можно представить в виде $\hat{H}_S = \hbar\omega_0\hat{\sigma}^+\hat{\sigma}$, где оператор $\hat{\sigma}$ - понижающий оператор, $\hat{\sigma}|e\rangle = |g\rangle$, а оператор $\hat{\sigma}^+$ - повышающий оператор, $\hat{\sigma}^+|g\rangle = |e\rangle$. Используя в качестве операторов Линдблада $\hat{L}_k$ операторы $\hat{\sigma}$ и $\hat{\sigma}^+$, можно получить следующее уравнение Линдблада для матрицы плотности ДУС:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = & -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}_S, \hat{\rho}] + \gamma_{\text{diss}} (1 + N_{\omega_0}) \left(\hat{\sigma} \hat{\rho} \hat{\sigma}^+ - \frac{1}{2} \hat{\sigma}^+ \hat{\sigma} \hat{\rho} - \frac{1}{2} \hat{\rho} \hat{\sigma}^+ \hat{\sigma} \right) + \\ & + \gamma_{\text{diss}} N_{\omega_0} \left(\hat{\sigma}^+ \hat{\rho} \hat{\sigma} - \frac{1}{2} \hat{\sigma} \hat{\sigma}^+ \hat{\rho} - \frac{1}{2} \hat{\rho} \hat{\sigma} \hat{\sigma}^+ \right) \end{aligned}$$

где $\gamma_{\text{diss}} = 4\omega_0^3 |d_{eg}|^2 / (3\hbar c^3)$ и $N_{\omega} = (\exp(\hbar\omega/T) - 1)^{-1}$.

Запишем это уравнение в базисе собственных состояний гамильтониана ДУС: $|e\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, $|g\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$, $\sigma = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $\sigma^+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$, $\hat{\rho} = \begin{pmatrix} \rho_{ee} & \rho_{eg} \\ \rho_{ge} & \rho_{gg} \end{pmatrix}$.

Проводя несложные матричные вычисления, получаем уравнения для диагональных и недиагональных элементов матрицы плотности ДУС:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_{ee}}{\partial t} &= -\gamma_{\text{diss}} (N_{\omega_0} + 1) \rho_{ee} + \gamma_{\text{diss}} N_{\omega_0} \rho_{gg}, & \frac{\partial \rho_{eg}}{\partial t} &= -i\omega_0 \rho_{eg} - \frac{\gamma_{\text{diss}} (2N_{\omega_0} + 1) \rho_{eg}}{2} \\ \frac{\partial \rho_{ge}}{\partial t} &= i\omega_0 \rho_{ge} - \frac{\gamma_{\text{diss}} (2N_{\omega_0} + 1) \rho_{ge}}{2}, & \frac{\partial \rho_{gg}}{\partial t} &= -\gamma_{\text{diss}} N_{\omega_0} \rho_{gg} + \gamma_{\text{diss}} (N_{\omega_0} + 1) \rho_{ee} \end{aligned}$$

Для диагональных элементов мы получили по существу кинетические уравнения, которые сохраняют полную вероятность $\rho_{ee} + \rho_{gg} = \text{const} = 1$, то есть след матрицы плотности сохраняется во все моменты времени.

Величины γ_{diss} и $\gamma_{\text{diss}} N_{\omega_0}$ являются аналогами коэффициентов Эйнштейна, относящихся к спонтанному и индуцированному переходам соответственно.

Видно, что в релаксацию вносят вклад как спонтанные, так и индуцированные процессы в то время как в накачку - только индуцированные переходы.

Таким образом, слагаемое, пропорциональное $\gamma_{\text{diss}} (N_{\omega_0} + 1)$, описывает релаксацию энергии в резервуар за счёт как спонтанных, так и индуцированных процессов, а пропорциональное $\gamma_{\text{diss}} N_{\omega_0}$ описывает накачку системы резервуаром только за счёт индуцированных процессов.

Решения уравнений для диагональных элементов с учетом их нормировки имеют простой вид:

$$\rho_{ee}(t) = \frac{N_{\omega_0}}{2N_{\omega_0} + 1} - C e^{-\gamma_{\text{diss}} (2N_{\omega_0} + 1)t}, \quad \rho_{gg}(t) = \frac{N_{\omega_0} + 1}{2N_{\omega_0} + 1} + C e^{-\gamma_{\text{diss}} (2N_{\omega_0} + 1)t},$$

где $C = \frac{N_{\omega_0}}{2N_{\omega_0} + 1} - \rho_{ee}(0) \equiv \rho_{gg}(0) - \frac{N_{\omega_0} + 1}{2N_{\omega_0} + 1}$.

Проиллюстрируем выполнение начал термодинамики.

У системы не существует интеграла движения, то есть оператора, который коммутирует одновременно с гамильтонианом $\hat{H}_S$ и оператором взаимодействия системы с резервуаром.

Поэтому стационарным решением системы уравнений является распределение Гиббса:

$$\rho_{ee} = \frac{N_{\omega_0}}{2N_{\omega_0} + 1}, \quad \rho_{gg} = \frac{N_{\omega_0} + 1}{2N_{\omega_0} + 1}, \quad \frac{\rho_{ee}}{\rho_{gg}} = \frac{N_{\omega_0}}{N_{\omega_0} + 1} = \exp\left(-\frac{\hbar\omega_0}{T}\right)$$

Недиагональные элементы эволюционируют следующим образом:

$$\rho_{ge}(t) = \rho_{ge}(0)e^{i\omega_0 t}e^{-(\gamma_{\text{diss}}(2N_{\omega_0}+1)/2)t}, \quad \rho_{eg}(t) = \rho_{eg}(0)e^{-i\omega_0 t}e^{-(\gamma_{\text{diss}}(2N_{\omega_0}+1)/2)t}$$

то есть экспоненциально затухают.

Отметим, что иногда скорость релаксации энергии (диагональных элементов) называют скоростью продольной релаксации, а скорость затухания дипольного момента (недиагональных элементов) - скоростью поперечной релаксации.

Для рассматриваемого резервуара скорость продольной релаксации $\gamma_{\parallel} = \gamma_{\text{diss}}(2N_{\omega_0} + 1)$, а скорость поперечной релаксации $\gamma_{\perp} = \gamma_{\text{diss}}(2N_{\omega_0} + 1)/2$.

Отметим, что для рассматриваемого резервуара скорости поперечной и продольной релаксации относятся как один к двум.

Можно отметить, что для оптических переходов при комнатной температуре уравнение Линдблада может быть упрощено.

Так как энергия оптического кванта много больше комнатной температуры, то можно считать, что температура резервуара равна нулю.

Как следствие, $N_{\omega_0} = 0$ и имеют место только спонтанные процессы, отвечающие за релаксацию.

Уравнение Линдблада упрощается до

$$\frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}_S, \hat{\rho}] + \gamma_{\text{diss}} \left(\hat{\sigma} \hat{\rho} \hat{\sigma}^+ - \frac{1}{2} \hat{\sigma}^+ \hat{\sigma} \hat{\rho} - \frac{1}{2} \hat{\rho} \hat{\sigma}^+ \hat{\sigma} \right)$$

Таким образом, даже в отсутствие квантов возбуждения в резервуаре релаксация возбужденной системы (в данном случае двухуровневого атома) всё равно происходит.

Это связано с наличием нулевых колебаний энергии резервуара даже тогда, когда он находится при нулевой температуре.

В этом случае скорость продольной релаксации равна $\gamma_{\parallel} = \gamma_{\text{diss}}$, а скорость поперечной релаксации $\gamma_{\perp} = \gamma_{\text{diss}}/2$.

Релаксация двухуровневого атома в дефазирующий резервуар

Ранее был рассмотрен пример гамильтониана взаимодействия с резервуаром, когда происходит релаксация энергии системы.

Однако в некоторых системах могут иметь место процессы, которые приводят только к сбою фазы системы но не меняют её энергию.

Такие процессы называют дефазировкой, или декогеренцией.

Скорость дефазировки может на несколько порядков превосходить скорость диссипации энергии.

Ниже приведен простейший пример резервуара, который приводит к сбою фазы системы, но не меняет её энергию.

Рассмотрим резервуар из гармонических осцилляторов с гамильтонианом $\hat{H}_R = \hbar \sum_k \omega_k \hat{a}_k^+ \hat{a}_k$.

Примем, что гамильтониан двухуровневой системы имеет обычный вид, а взаимодействие ДУС с таким резервуаром описывается гамильтонианом

$$\hat{H}_{SR} = \hbar \sum_k \gamma_k \hat{\sigma}_z (\hat{a}_k^+ + \hat{a}_k) \equiv \hbar \lambda \hat{S} \hat{R},$$

где $\hat{S} \equiv \hat{\sigma}_z = |e\rangle\langle e| - |g\rangle\langle g|$, $\hat{R} = \sum_k (\gamma_k/\lambda) (\hat{a}_k^+ + \hat{a}_k)$.

Этот гамильтониан описывает процесс поглощения и испускания кванта возбуждения резервуара таким образом, что энергия системы не меняется.

Иными словами, он описывает процесс упругого рассеяния возбуждения резервуара на системе.

Используя в качестве оператора Линдблада $\hat{L}_k$ оператор $\hat{\sigma}_z$, получаем уравнение Линдблада:

$$\frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}_S, \hat{\rho}] + \frac{\gamma_{\text{deph}}}{2} \left(\hat{\sigma}_z \hat{\rho} \hat{\sigma}_z - \frac{1}{2} \hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_z \hat{\rho} - \frac{1}{2} \hat{\rho} \hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_z \right) = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}_S, \hat{\rho}] + \frac{\gamma_{\text{deph}}}{2} (\hat{\sigma}_z \hat{\rho} \hat{\sigma}_z - \hat{\rho})$$

поскольку $\hat{\sigma}_z^2 = \hat{I}$.

Отметим, что для подавляющего большинства оптических систем имеет место существенное превышение скорости дефазировки над скоростью релаксации энергии (в реальных системах это отношение может достигать пяти порядков).

Для компонент матрицы плотности уравнения запишутся так:

$$\frac{\partial \rho_{ee}}{\partial t} = 0, \quad \frac{\partial \rho_{gg}}{\partial t} = 0, \quad \frac{\partial \rho_{eg}}{\partial t} = -i\omega_0 \rho_{eg} - \gamma_{\text{deph}} \rho_{eg}, \quad \frac{\partial \rho_{ge}}{\partial t} = i\omega_0 \rho_{ge} - \gamma_{\text{deph}} \rho_{ge}$$

Отметим как важное свойство этих уравнений, что нет связи между диагональными элементами матрицы плотности.

Это и означает, что энергия системы остаётся постоянной,

$$\langle \hat{\sigma}_z \rangle \equiv \text{Sp} (\hat{\sigma}_z \hat{\rho}) = \rho_{ee} - \rho_{gg} = \text{const} = \langle \hat{\sigma}_z(0) \rangle.$$

Недиагональные же элементы матрицы плотности затухают экспоненциально.

Стационарной матрицей плотности будет

$$\hat{\rho} = \begin{pmatrix} \rho_{ee}(0) & 0 \\ 0 & \rho_{gg}(0) \end{pmatrix}.$$

Таким образом, дефазирующий резервуар приводит к занулению недиагональных матричных элементов, при сохранении диагональных.

Поэтому такой процесс называют и процессом дефазировки (есть только поперечная релаксация, но нет продольной).

Естественно, что в реальных системах присутствуют сразу оба вида релаксации, поэтому рассмотрение только одного дефазирующего резервуара всегда является приближением.

* лазеры: оптические уравнения Максвелла-Блоха

Выведем уравнение Максвелла-Блоха для одномодового лазера из уравнений Линдблада.

Рассмотрим динамику ДУС, взаимодействующей с классической монохроматической электромагнитной волной.

Впервые решение задачи о стационарном состоянии ДУС во внешнем монохроматическом поле было получено при помощи феноменологических оптических уравнений Блоха

$$\begin{aligned}\frac{d\langle\hat{\sigma}\rangle}{dt} &= -i\omega_0\langle\hat{\sigma}\rangle - \frac{i}{2}\Omega e^{-i\omega t}\langle\hat{\sigma}_z\rangle - \gamma_{\perp}\langle\hat{\sigma}\rangle, \\ \frac{d\langle\hat{\sigma}^+\rangle}{dt} &= i\omega_0\langle\hat{\sigma}^+\rangle + \frac{i}{2}\Omega e^{i\omega t}\langle\hat{\sigma}_z\rangle - \gamma_{\perp}\langle\hat{\sigma}^+\rangle, \\ \frac{d\langle\hat{\sigma}_z\rangle}{dt} &= i\Omega\{\langle\hat{\sigma}^+\rangle e^{-i\omega t} - \langle\hat{\sigma}\rangle e^{i\omega t}\} - \gamma_{\parallel}(\langle\hat{\sigma}_z\rangle + 1)\end{aligned}$$

где $\langle\ldots\rangle$ есть среднее значение операторов, ω - частота внешней монохроматической волны, $\Omega = (\mathbf{E}_0 \cdot \mathbf{d}_{eg})/\hbar$ - частота Раби, которая определяет взаимодействие ДУС с внешним переменным электрическим полем с амплитудой $\mathbf{E}_0$, $\mathbf{d}_{eg}$ - матричный элемент дипольного перехода ДУС, $\gamma_{\parallel}$ - скорость продольной релаксации и $\gamma_{\perp}$ - скорость поперечной релаксации, феноменологически введенные для описания процессов релаксации в ДУС.

В наших прежних обозначениях,

$$\langle\hat{\sigma}\rangle \equiv \text{Sp}(\hat{\rho}\hat{\sigma}) = \rho_{eg}$$

$$\langle\hat{\sigma}^+\rangle \equiv \text{Sp}(\hat{\rho}\hat{\sigma}^+) = \rho_{ge},$$

$$\langle\hat{\sigma}_z\rangle \equiv \text{Sp}(\hat{\rho}\hat{\sigma}_z) = \rho_{ee} - \rho_{gg}.$$

Применим уравнения Линдблада для вывода (обоснования) уравнений Блоха.

Наличие внешней монохроматической волны учтем добавлением дополнительного члена в гамильтониан ДУС, который описывает дипольное взаимодействие ДУС с внешним полем:

$$\hat{V} = -\hat{\mathbf{d}}\mathbf{E}(t) = -\mathbf{d}_{eg}(\hat{\sigma} + \hat{\sigma}^+)\mathbf{E}_0 \cos \omega t = -\mathbf{d}_{eg}(\hat{\sigma} + \hat{\sigma}^+)\mathbf{E}_0(e^{-i\omega t} + e^{i\omega t})/2.$$

В приближении вращающейся волны он превратится в

$$\hat{V} = -\frac{\mathbf{d}_{eg}\mathbf{E}_0}{2}(\hat{\sigma}^+e^{-i\omega t} + \hat{\sigma}e^{i\omega t}) = -\frac{\hbar\Omega}{2}(\hat{\sigma}^+e^{-i\omega t} + \hat{\sigma}e^{i\omega t}),$$

вклад взаимодействия в гамильтониан $\hat{H}_S$, который описывает дипольное взаимодействие ДУС с внешним полем.

В итоге получается гамильтониан системы $\hat{H}_S(t) = \hbar\omega_0\hat{\sigma}^+\hat{\sigma} - \frac{\hbar\Omega}{2}(\hat{\sigma}^+e^{-i\omega t} + \hat{\sigma}e^{i\omega t})$ и феноменологическое уравнение Линдблада

$$\begin{aligned}\frac{\partial\hat{\rho}}{\partial t} &= -\frac{i}{\hbar}[\hat{H}_S, \hat{\rho}] + \gamma_{\text{diss}}(1 + N_{\omega_0})\left(\hat{\sigma}\hat{\rho}\hat{\sigma}^+ - \frac{1}{2}\hat{\sigma}^+\hat{\sigma}\hat{\rho} - \frac{1}{2}\hat{\rho}\hat{\sigma}^+\hat{\sigma}\right) + \\ &+ (\gamma_{\text{diss}}N_{\omega_0} + \gamma_{\text{pump}})\left(\hat{\sigma}^+\hat{\rho}\hat{\sigma} - \frac{1}{2}\hat{\sigma}\hat{\sigma}^+\hat{\rho} - \frac{1}{2}\hat{\rho}\hat{\sigma}\hat{\sigma}^+\right) + \frac{\gamma_{\text{deph}}}{2}(\hat{\sigma}_z\hat{\rho}\hat{\sigma}_z - \hat{\rho})\end{aligned}$$

где γ_{diss} и γ_{deph} - скорости диссипации и дефазировки соответственно, введенные ранее, а также добавлена γ_{pump} , которую называют скоростью некогерентной накачки ДУС каким-то внешним полем.

В результате мы получим уравнения для компонент матрицы плотности, которые обобщают уравнения, полученные нами ранее:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho_{ee}}{\partial t} &= \frac{i}{2} \Omega (e^{-i\omega t} \rho_{ge} - e^{i\omega t} \rho_{eg}) - \gamma_{\text{diss}} (N_{\omega_0} + 1) \rho_{ee} + (\gamma_{\text{diss}} N_{\omega_0} + \gamma_{\text{pump}}) \rho_{gg}, \\ \frac{\partial \rho_{eg}}{\partial t} &= -\frac{i}{2} \Omega e^{-i\omega t} (\rho_{ee} - \rho_{gg}) - i\omega_0 \rho_{eg} - \frac{\{\gamma_{\text{diss}} (2N_{\omega_0} + 1) + \gamma_{\text{pump}}\} \rho_{eg}}{2} - \gamma_{\text{deph}} \rho_{eg} \\ \frac{\partial \rho_{ge}}{\partial t} &= \frac{i}{2} \Omega e^{i\omega t} (\rho_{ee} - \rho_{gg}) + i\omega_0 \rho_{ge} - \frac{\{\gamma_{\text{diss}} (2N_{\omega_0} + 1) + \gamma_{\text{pump}}\} \rho_{ge}}{2} - \gamma_{\text{deph}} \rho_{ge} \\ \frac{\partial \rho_{gg}}{\partial t} &= -\frac{i}{2} \Omega (e^{-i\omega t} \rho_{ge} - e^{i\omega t} \rho_{eg}) - (\gamma_{\text{diss}} N_{\omega_0} + \gamma_{\text{pump}}) \rho_{gg} + \gamma_{\text{diss}} (N_{\omega_0} + 1) \rho_{ee}\end{aligned}$$

Видно, что уравнения для недиагональных компонент в точности совпадут с соответствующими уравнениями Блоха, если принять $\gamma_{\perp} = \frac{\gamma_{\text{diss}} (2N_{\omega_0} + 1) + \gamma_{\text{pump}}}{2} + \gamma_{\text{deph}}$.

В то же время соответствующее уравнение для разностей населенностей верхнего и нижнего уровней $\langle \hat{\sigma}_z \rangle = \rho_{ee} - \rho_{gg}$ будет иметь вид

$$\begin{aligned}\frac{\partial \langle \hat{\sigma}_z \rangle}{\partial t} &= i\Omega (e^{-i\omega t} \rho_{ge} - e^{i\omega t} \rho_{eg}) - 2\gamma_{\text{diss}} (N_{\omega_0} + 1) \rho_{ee} + 2(\gamma_{\text{diss}} N_{\omega_0} + \gamma_{\text{pump}}) \rho_{gg} = \\ &= i\Omega (e^{-i\omega t} \rho_{ge} - e^{i\omega t} \rho_{eg}) - (2\gamma_{\text{diss}} N_{\omega_0} + \gamma_{\text{diss}} + \gamma_{\text{pump}}) \langle \hat{\sigma}_z \rangle - \gamma_{\text{diss}} + \gamma_{\text{pump}}\end{aligned}$$

и совпадение с соответствующим вышеприведенным уравнением Блоха будет лишь в том случае, если $N_{\omega_0} = 0$ и $\gamma_{\text{pump}} = 0$, и тогда $\gamma_{\parallel} = \gamma_{\text{diss}}$.

Отметим одну важную особенность введенной некогерентной накачки.

Пусть внешнее монохроматическое поле отсутствует: $\Omega = 0$.

Тогда рассмотрим стационарное решение уравнений для диагональных элементов матрицы плотности, обобщающее полученное нами ранее:

$$\begin{aligned}\rho_{ee} - \rho_{gg} &= \frac{\gamma_{\text{pump}} - \gamma_{\text{diss}}}{2\gamma_{\text{diss}} N_{\omega_0} + \gamma_{\text{diss}} + \gamma_{\text{pump}}}, \quad \rho_{ee} + \rho_{gg} = 1 \quad \rightarrow \\ \rho_{ee} &= \frac{\gamma_{\text{diss}} N_{\omega_0} + \gamma_{\text{pump}}}{2\gamma_{\text{diss}} N_{\omega_0} + \gamma_{\text{diss}} + \gamma_{\text{pump}}}, \quad \rho_{gg} = \frac{\gamma_{\text{diss}} N_{\omega_0} + \gamma_{\text{diss}}}{2\gamma_{\text{diss}} N_{\omega_0} + \gamma_{\text{diss}} + \gamma_{\text{pump}}}, \quad \frac{\rho_{ee}}{\rho_{gg}} = \frac{N_{\omega_0} + \frac{\gamma_{\text{pump}}}{\gamma_{\text{diss}}}}{N_{\omega_0} + 1}.\end{aligned}$$

Видно, что даже если $N_{\omega_0} = 0$, некогерентная накачка приводит к заселению верхнего уровня ДУС, а также в общем случае при $\gamma_{\text{pump}} > \gamma_{\text{diss}}$ имеет место инверсное заселение верхнего уровня, то есть $\rho_{ee} > \rho_{gg}$.

Теперь рассмотрим стационарное решение уравнений для матрицы плотности в присутствии когерентной монохроматической накачки, при $\Omega \neq 0$.

Решение будем искать в виде $\rho_{eg}(t) = \tilde{\rho}_{eg} e^{-i\omega t}$, $\rho_{ge}(t) = \tilde{\rho}_{ge} e^{i\omega t}$, причем $\tilde{\rho}_{eg}$, $\tilde{\rho}_{ge}$, ρ_{ee} и ρ_{gg} будем считать независимыми от времени.

Тогда из уравнений для недиагональных элементов матрицы плотности легко находим, что $\tilde{\rho}_{eg} = \frac{\Omega(\rho_{ee} - \rho_{gg})}{2(\omega - \omega_0 + i\gamma_{\perp})}$, $\tilde{\rho}_{ge} = (\tilde{\rho}_{eg})^*$, где $\gamma_{\perp}$ была определена ранее.

Из уравнения для $\langle \hat{\sigma}_z \rangle$ получаем, что

$$i\Omega (\tilde{\rho}_{ge} - \tilde{\rho}_{eg}) = \gamma_{\text{diss}} - \gamma_{\text{pump}} + (2\gamma_{\text{diss}} N_{\omega_0} + \gamma_{\text{diss}} + \gamma_{\text{pump}}) (\rho_{ee} - \rho_{gg}),$$

откуда мы находим, что

$$\rho_{ee} - \rho_{gg} = \frac{\gamma_{\text{pump}} - \gamma_{\text{diss}}}{2\gamma_{\text{diss}} N_{\omega_0} + \gamma_{\text{diss}} + \gamma_{\text{pump}} + \frac{\Omega^2 \gamma_{\perp}}{(\omega - \omega_0)^2 + \gamma_{\perp}^2}}$$

Учитывая это, а также то, что $\rho_{ee} + \rho_{gg} = 1$, окончательно находим, что

$$\begin{aligned}\rho_{ee} &= \frac{\gamma_{\text{diss}} N_{\omega_0} + \gamma_{\text{pump}} + \frac{\Omega^2 \gamma_{\perp}}{2[(\omega - \omega_0)^2 + \gamma_{\perp}^2]}}{2\gamma_{\text{diss}} N_{\omega_0} + \gamma_{\text{diss}} + \gamma_{\text{pump}} + \frac{\Omega^2 \gamma_{\perp}}{(\omega - \omega_0)^2 + \gamma_{\perp}^2}}, \\ \rho_{gg} &= \frac{\gamma_{\text{diss}} N_{\omega_0} + \gamma_{\text{diss}} + \frac{\Omega^2 \gamma_{\perp}}{2[(\omega - \omega_0)^2 + \gamma_{\perp}^2]}}{2\gamma_{\text{diss}} N_{\omega_0} + \gamma_{\text{diss}} + \gamma_{\text{pump}} + \frac{\Omega^2 \gamma_{\perp}}{(\omega - \omega_0)^2 + \gamma_{\perp}^2}}, \\ \frac{\rho_{ee}}{\rho_{gg}} &= \frac{N_{\omega_0} + \frac{\gamma_{\text{pump}}}{\gamma_{\text{diss}}} + \frac{\Omega^2 \gamma_{\perp} / \gamma_{\text{diss}}}{2[(\omega - \omega_0)^2 + \gamma_{\perp}^2]}}{N_{\omega_0} + 1 + \frac{\Omega^2 \gamma_{\perp} / \gamma_{\text{diss}}}{2[(\omega - \omega_0)^2 + \gamma_{\perp}^2]}}, \\ \tilde{\rho}_{eg} &= \frac{(\gamma_{\text{pump}} - \gamma_{\text{diss}}) \Omega / [2(\omega - \omega_0 + i\gamma_{\perp})]}{\left(2\gamma_{\text{diss}} N_{\omega_0} + \gamma_{\text{diss}} + \gamma_{\text{pump}} + \frac{\Omega^2 \gamma_{\perp}}{(\omega - \omega_0)^2 + \gamma_{\perp}^2}\right)}\end{aligned}$$

Из этого решения видно, что и в случае действия монохроматической электромагнитной волны на двухуровневую систему инверсная заселенность может быть только тогда, когда есть некогерентная накачка с $\gamma_{\text{pump}} > \gamma_{\text{diss}}$.

С помощью только одной монохроматической волны в ДУС нельзя создать стационарную инверсную заселенность.

* лазеры: условия лазерной генерации

?

Обсудим условия лазерной генерации.

* лазеры: Нестационарное решение уравнений Блоха, спектр резонансной флюоресценции, условия лазерной генерации и триплет Моллоу

Рассмотрим нестационарное (общее) решение уравнений для матрицы плотности в присутствии когерентной монохроматической накачки, при $\Omega \neq 0$.

Решение будем искать в виде $\rho_{eg}(t) = \tilde{\rho}_{eg}(t)e^{-i\omega t}$, $\rho_{ge}(t) = \tilde{\rho}_{ge}(t)e^{i\omega t}$, то есть $\tilde{\rho}_{eg}$, $\tilde{\rho}_{ge}$, ρ_{ee} и ρ_{gg} будем считать зависящими от времени.

Для них получим систему линейных уравнений

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho_{ee}}{\partial t} &= \frac{i}{2} \Omega (\tilde{\rho}_{ge} - \tilde{\rho}_{eg}) - \gamma_{\parallel e} \rho_{ee} + \gamma_{\parallel g} \rho_{gg}, \\ \frac{\partial \tilde{\rho}_{ge}}{\partial t} &= \frac{i}{2} \Omega (\rho_{ee} - \rho_{gg}) - i(\omega - \omega_0) \tilde{\rho}_{ge} - \gamma_{\perp} \tilde{\rho}_{ge} \\ \frac{\partial \tilde{\rho}_{eg}}{\partial t} &= -\frac{i}{2} \Omega (\rho_{ee} - \rho_{gg}) + i(\omega - \omega_0) \tilde{\rho}_{eg} - \gamma_{\perp} \tilde{\rho}_{eg}, \\ \frac{\partial \rho_{gg}}{\partial t} &= -\frac{i}{2} \Omega (\tilde{\rho}_{ge} - \tilde{\rho}_{eg}) - \gamma_{\parallel g} \rho_{gg} + \gamma_{\parallel e} \rho_{ee}\end{aligned}$$

где для краткости введено $\gamma_{\parallel e} = \gamma_{\text{diss}}(N_{\omega_0} + 1)$ и $\gamma_{\parallel g} = (\gamma_{\text{diss}} N_{\omega_0} + \gamma_{\text{pump}})$.

С обозначением отстройки $\Delta = \omega - \omega_0$ частоты поля от частоты ДУС, полагая для всех компонент зависимость $\sim e^{-\lambda t}$, характерное ее уравнение имеет вид

$$\begin{vmatrix} \lambda - \gamma_{\parallel e} & -i\Omega/2 & i\Omega/2 & \gamma_{\parallel g} \\ -i\Omega/2 & \lambda + i\Delta - \gamma_{\perp} & 0 & i\Omega/2 \\ i\Omega/2 & 0 & \lambda - i\Delta - \gamma_{\perp} & -i\Omega/2 \\ \gamma_{\parallel e} & i\Omega/2 & -i\Omega/2 & \lambda - \gamma_{\parallel g} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \lambda & 0 & 0 & 2\lambda \\ 0 & \lambda + i\Delta - \gamma_{\perp} & 2\lambda - 2\gamma_{\perp} & 0 \\ i\Omega/2 & 0 & \lambda - i\Delta - \gamma_{\perp} & 0 \\ \gamma_{\parallel e} & i\Omega/2 & 0 & \lambda - \gamma_{\parallel g} + \gamma_{\perp e} \end{vmatrix} =$$

$$= \lambda \{ \lambda^3 - \lambda^2 (2\gamma_{\perp} + \gamma_{\parallel}) + \lambda (\Delta^2 + \Omega^2 + \gamma_{\perp}^2 + 2\gamma_{\perp}\gamma_{\parallel}) - (\Omega^2\gamma_{\perp} + \Delta^2\gamma_{\parallel} + \gamma_{\perp}^2\gamma_{\parallel}) \} = 0$$

где $\gamma_{\parallel} = \gamma_{\parallel e} + \gamma_{\parallel g}$.

Если релаксацией полностью пренебречь, то уравнение сведется к уравнению

$$\lambda^2 (\lambda^2 + \Delta^2 + \Omega^2) = 0$$

с четырьмя корнями $\lambda_{1,2} = 0$ и $\lambda_{3,4} = \pm i\sqrt{\Delta^2 + \Omega^2}$.

В общем случае $\lambda_1 = 0$, а для нахождения остальных трех корней можно воспользоваться аналитической формулой Кардано решения кубического уравнения.

Но и оно в общем случае выглядит громоздко.

В сильном монохроматическом поле однако можно считать релаксацию слабой и учесть её в линейном приближении по константам γ_{11} и $\gamma_{\perp}$.

В этом приближении

$$\lambda_2 \approx \frac{\Omega^2\gamma_{\perp} + \Delta^2\gamma_{\parallel}}{\Delta^2 + \Omega^2} \equiv \Gamma_1, \quad \lambda_{3,4} \approx \pm i\sqrt{\Delta^2 + \Omega^2} + \frac{\Delta^2\gamma_{\perp} + \Omega^2\frac{\gamma_{\perp} + \gamma_{\parallel}}{2}}{\Delta^2 + \Omega^2} \equiv \pm i\tilde{\Omega} + \Gamma_2,$$

где введено обозначение $\tilde{\Omega} = \sqrt{\Delta^2 + \Omega^2}$, и введены константы релаксации Γ_1 и Γ_2 .

Поэтому, если в присутствии монохроматического электромагнитного поля вывести двухуровневую систему из её стационарного состояния, определяемого значениями матрицы плотности $\rho_{ee} = \rho_{ee}^{\text{ст}}$, $\rho_{gg} = \rho_{gg}^{\text{ст}}$, $\tilde{\rho}_{eg} = \tilde{\rho}_{eg}^{\text{ст}}$ и $\tilde{\rho}_{ge} = \tilde{\rho}_{ge}^{\text{ст}}$, найденными ранее, то впоследствии она снова срелаксирует к этому состоянию по закону

$$\begin{aligned} \rho_{gg}(t) &= \rho_{gg}^{\text{ст}} + C_1 e^{-\Gamma_1 t} + C_2 e^{-i\tilde{\Omega}t - \Gamma_2 t} + C_2^* e^{i\tilde{\Omega}t - \Gamma_2 t}, \\ \rho_{ee}(t) &= 1 - \rho_{gg}(t) \\ \rho_{eg}(t) &= \tilde{\rho}_{eg}^{\text{ст}} e^{-i\omega t} + C_3 e^{-i\omega t - \Gamma_1 t} + C_4 e^{-i(\omega + \tilde{\Omega})t - \Gamma_2 t} + C_5 e^{-i(\omega - \tilde{\Omega})t - \Gamma_2 t}, \\ \rho_{ge}(t) &= (\rho_{eg}(t))^* \end{aligned}$$

где C_1, C_2, C_3, C_4, C_5 - константы (в общем случае комплексные), определяемые из уравнений и начальных условий.

Интенсивность резонансной флюоресценции на частоте ω_{rf} определяется квадратом модуля амплитуды фурье дипольного момента ДУС $\left| \int_0^{+\infty} \rho_{eg}(t) e^{i\omega_{\text{rf}} t} dt \right|^2$, и она будет содержать очевидный δ -функциональный пик на частоте $\omega_{\text{rf}} = \omega$ от первого члена, и три уширенных пика с лоренцевской формой линии на частотах

$$\omega_{\text{rf}} = \omega$$

и

$$\omega_{\text{rf}} = \omega \pm \tilde{\Omega} \equiv \omega \pm \sqrt{\Delta^2 + \Omega^2}$$

с ширинами Γ_1 и Γ_2 соответственно.

Последние три пика образуют так называемый триплет Моллоу (Mollow).

дефазировка

б) Пусть релаксационный член описывает дефазировку.

Что измениться в решении, какая фаза сбивается?

когерентная накачка

д) Рассмотреть задачу (а), но с дополнительными членами в уравнении Линдблада, соответствующими когерентной накачке.

форма спектральной линии

Найти форму спектральной линии.

9.8 3.5 Non-selective, continuous measurements**9.8.1 3.5.1 The quantum Zeno effect**

We consider the measurement of an observable A whose spectrum is assumed, for simplicity, to be purely discrete and non-degenerate,

$$A = \sum_n a_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n| \quad (3.345)$$

A series of ideal and instantaneous measurements of the observable A is carried out in such a way that two successive measurements are separated by a fixed time interval θ . In between two successive measurements the state vector evolves according to the Schrödinger equation

$$i \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = H |\psi(t)\rangle \quad (3.346)$$

with some Hamiltonian H . In the limit $\theta \rightarrow 0$ one speaks of a continuous measurement of the observable A .

Let us assume that the system is initially in an eigenstate $|\psi_n\rangle$ belonging to the eigenvalue a_n of A ,

$$|\psi(0)\rangle = |\psi_n\rangle. \quad (3.347)$$

For sufficiently small t we then have according to the Schrödinger equation,

$$|\psi(t)\rangle = \left[I - iHt - \frac{1}{2}H^2t^2 + \dots \right] |\psi_n\rangle. \quad (3.348)$$

The first ideal measurement of A is carried out at time $t = \theta$. The probability of obtaining the eigenvalue a_n in this measurement is given by

$$w_{nn}(\theta) = |\langle \psi_n | \psi(\theta) \rangle|^2 = 1 - (\Delta E)_n^2 \theta^2 + \dots, \quad (3.349)$$

where the dots indicate terms of higher order and

$$(\Delta E)_n^2 = \langle \psi_n | H^2 | \psi_n \rangle - \langle \psi_n | H | \psi_n \rangle^2 \quad (3.350)$$

is the energy uncertainty in the state $|\psi_n\rangle$. The quantity $w_{nn}(\theta)$ is just the probability that the system is still in the initial state $|\psi_n\rangle$ after time θ . After time $\tau = k\theta$, that is after k measurements this probability is thus

$$w_{nn}(\tau) \approx [1 - (\Delta E)_n^2 \theta^2]^k. \quad (3.351)$$

For large k and fixed τ , that is in the limit $\theta = \tau/k \rightarrow 0$, this leads to

$$w_{nn}(\tau) \approx \left[1 - (\Delta E)_n^2 \frac{\tau \theta}{k} \right]^k \approx \exp [- (\Delta E)_n^2 \tau \theta] \rightarrow 1 \quad (3.352)$$

This equation tells us that the system remains with probability 1 in the initial state $|\psi_n\rangle$ if a continuous, ideal measurement of the observable A is carried out on the system. As a result of the continuous state reduction induced by the measurements the system cannot leave its initial state. Formally, the reason for this fact is that in the limit of small θ the probability of leaving the state $|\psi_n\rangle$ is proportional to the square of θ , that is we have $1 - w_{nn}(\theta) \propto \theta^2$, while the number k of measurements increases as θ^{-1} . The state reduction induced by the succession of measurements is thus faster than possible transitions into other states. In analogy to Zeno's paradox this phenomenon is known as the quantum Zeno effect.

9.8.2 3.5.2 Density matrix equation

The quantum Zeno effect described above results, or course, from an idealization which presupposes an ideal, continuous measurement. In order to investigate what happens for non-ideal measurements we consider the following model for an indirect continuous monitoring of the system.

As in the preceding subsection we first subdivide the time axis into intervals of length θ . Over each interval the object system evolves according to the Schrödinger equation (3.346). However, instead of performing ideal measurements at the beginning of each interval we carry out indirect measurements of A (see Section 2.4.6). At the beginning of each interval a single probe particle with coordinate Q interacts with the quantum object through an interaction Hamiltonian of the form $H_I(t) = g(t)AQ$. The probe particles are independent and supposed to be in identical initial states $|\phi_\theta\rangle$. After the object-probe interaction the momentum P canonically conjugated to Q is measured directly on each probe particle. This leads to a quantum operation which is described by the operators (compare eqn (2.217))

$$\langle p | \exp(-iGAQ) | \phi_\theta \rangle \quad (3.353)$$

where $|p\rangle$ is a momentum eigenstate and $G = \int dt g(t) = \theta$ is the integrated coupling strength which is assumed to scale with θ .

Including the coherent evolution generated by H we thus have an operation described by the operators

$$\Omega_p = \exp(-iH\theta) \langle p | \exp(-iAQ\theta) | \phi_\theta \rangle \quad (3.354)$$

The evolution of the object's density matrix over a time interval θ on the nonselective level can thus be written as

$$\rho(t + \theta) = \int dp \Omega_p \rho(t) \Omega_p^\dagger \quad (3.355)$$

Substituting expression (3.354) and expanding the coherent part to first and the incoherent part to second order in θ one obtains

$$\begin{aligned} \rho(t + \theta) = & \rho(t) - i[H, \rho(t)]\theta - i[A, \rho(t)]\langle Q \rangle_\theta \theta \\ & + \left[A\rho(t)A - \frac{1}{2}A^2\rho(t) - \frac{1}{2}\rho(t)A^2 \right] \langle Q^2 \rangle_\theta \theta^2, \end{aligned} \quad (3.356)$$

where we have defined

$$\langle Q \rangle_\theta = \langle \phi_\theta | Q | \phi_\theta \rangle, \quad \langle Q^2 \rangle_\theta = \langle \phi_\theta | Q^2 | \phi_\theta \rangle. \quad (3.357)$$

We now assume that $\langle Q \rangle_\theta = 0$. This means that the drift contribution $-i[A, \rho(t)]\langle Q \rangle_\theta$ vanishes and, therefore, that the measuring device does not lead to a systematic back-action on the dynamics of the quantum object. Furthermore, it will be assumed that the limit

$$\sigma_Q^2 \equiv \lim_{\theta \rightarrow 0} \theta \langle Q^2 \rangle_\theta \quad (3.358)$$

exists and is finite. It follows that the stochastic back-action induced by the measurement device remains finite in the continuum limit $\theta \rightarrow 0$.

In the continuum limit we therefore obtain the following equation of motion for the state of the object system,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \rho(t) &= -i[H, \rho(t)] + \sigma_Q^2 \left[A \rho(t) A - \frac{1}{2} A^2 \rho(t) - \frac{1}{2} \rho(t) A^2 \right] \\ &= -i[H, \rho(t)] - \frac{1}{2} \sigma_Q^2 [A, [A, \rho(t)]]. \end{aligned} \quad (3.359)$$

The right-hand side of this equation obviously takes on the form of the generator of a quantum dynamical semigroup. The generator is of the form obtained in Section 3.3.3 for the singular-coupling limit. It involves a single Hermitian Lindblad operator A given by the observable being measured indirectly.

The dissipator of the master equation describes the back-action on the object system induced by the measurement device. We observe that the strength of this back-action is related to the accuracy of the A -measurement. Namely, assuming $\langle P \rangle_\theta = 0$ we have by virtue of the uncertainty relation

$$\frac{\langle P^2 \rangle_\theta}{\theta} \cdot \theta \langle Q^2 \rangle_\theta \geq \frac{1}{4}. \quad (3.360)$$

Taking the limit $\theta \rightarrow 0$ one obtains

$$\sigma_A^2 \cdot \sigma_Q^2 \geq \frac{1}{4} \quad (3.361)$$

where we have defined

$$\sigma_A^2 = \lim_{\theta \rightarrow 0} \frac{\langle P^2 \rangle_\theta}{\theta}. \quad (3.362)$$

The quantity σ_A is a measure for the uncertainty of the A -measurement (see Section 2.4.6) and eqn (3.361) tells us that the back-action induced by the measurement is the stronger the more accurate is the A -measurement. Equation (3.361) thus provides a kind of uncertainty relation for the accuracy of the monitoring and the resulting fluctuating back-action on the measured system. If we take A to be dimensionless the quantity σ_Q^2 has the dimension of an inverse time,

$$\tau_0 \equiv [\sigma_Q^2]^{-1} \quad (3.363)$$

which may be referred to as the Zeno time. In fact, the time τ_0 is proportional to the accuracy of the A -measurement. For vanishing Zeno time, $\tau_0 \rightarrow 0$, that is for an arbitrarily accurate A -measurement, one is led back to the quantum Zeno effect described above.

The interplay between the characteristic time scale of the coherent motion of the object system and the Zeno time τ_0 can be nicely illustrated by considering again a two-level system. The free object Hamiltonian is taken to be $H = -\frac{\Omega}{2} \sigma_1$ describing coherent Rabi oscillations with frequency Ω . The measured quantity

is chosen to be $A = \sigma_3$, that is the measurement device is designed to monitor whether the system is in the upper level $|e\rangle$ or in the ground state $|g\rangle$. The corresponding density matrix equation thus takes the form

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = \frac{i\Omega}{2} [\sigma_1, \rho(t)] - \frac{1}{2\tau_0} [\sigma_3, [\sigma_3, \rho(t)]], \quad (3.364)$$

which leads to the following system of differential equations for the components of the Bloch vector,

$$\frac{d}{dt} \langle \sigma_1(t) \rangle = -\frac{2}{\tau_0} \langle \sigma_1(t) \rangle \quad (3.365)$$

$$\frac{d}{dt} \langle \sigma_2(t) \rangle = -\frac{2}{\tau_0} \langle \sigma_2(t) \rangle + \Omega \langle \sigma_3(t) \rangle \quad (3.366)$$

$$\frac{d}{dt} \langle \sigma_3(t) \rangle = -\Omega \langle \sigma_2(t) \rangle \quad (3.367)$$

Let us consider the case that the object system is initially in the upper level. which means $\rho(0) = |e\rangle\langle e|$ such that $\langle \sigma_1(0) \rangle = \langle \sigma_2(0) \rangle = 0$ and $\langle \sigma_3(0) \rangle = 1$. The corresponding solution of the above differential equations leads to

$$\langle \sigma_3(t) \rangle = \frac{1}{\mu_2 - \mu_1} (\mu_2 e^{-\mu_1 t} - \mu_1 e^{-\mu_2 t}), \quad (3.368)$$

where the characteristic frequencies are given by

$$\mu_{1,2} = \frac{1}{\tau_0} \pm \sqrt{\frac{1}{\tau_0^2} - \Omega^2} \quad (3.369)$$

With the help of these relations the population of the upper level is given by

$$p_e(t) = \frac{1}{2} (1 + \langle \sigma_3(t) \rangle). \quad (3.370)$$

Since the real parts of $\mu_{1,2}$ are always positive the occupation probability. $p_e(t)$ of the upper level approaches $1/2$ in the long time limit. This means that the back-action of the measurement device drives the quantum object into a stationary state with equal populations of upper and lower level. In the underdamped case $\Omega\tau_0 > 1$ the characteristic frequencies are complex. We write them as $\mu_{1,2} = 1/\tau_0 \pm i\nu$ with

$$\nu = \Omega \sqrt{1 - \frac{1}{\Omega^2 \tau_0^2}} \quad (3.371)$$

Then we have

$$\langle \sigma_3(t) \rangle = \left(\cos \nu t + \frac{1}{\nu \tau_0} \sin \nu t \right) e^{-t/\tau_0} \quad (3.372)$$

This shows that $p_e(t)$ follows an exponentially damped oscillation with frequency ν . For $\Omega\tau_0 \gg 1$, that is for a Zeno time which is much larger than the inverse

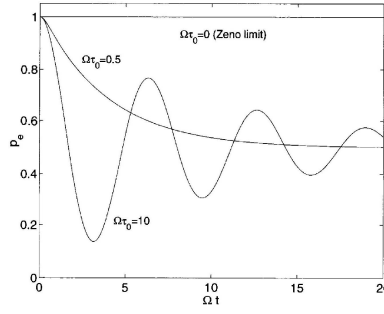


Fig. 3.7. The occupation probability $p_e(t)$ (eqn (3.370)) as a function of time for three different values of the Zeno time τ_0 .

of the Rabi frequency, the object system oscillates many times with a nearly unperturbed frequency $\nu \approx \Omega$. If the Zeno time is decreased the frequency ν becomes smaller and the coherent oscillations die out at $\Omega\tau_0 = 1$.

For the overdamped case $\Omega\tau_0 < 1$ one has a monotonic approach to the stationary state. Thus, for a sufficiently small Zeno time the coherent oscillations of the unperturbed motion are completely suppressed (see Fig. 3.7). In the case $\Omega\tau_0 \ll 1$ one finds the approximate solution

$$\langle \sigma_3(t) \rangle \approx e^{-t/\tau} \quad (3.373)$$

where the time constant τ is given by

$$\tau = \frac{2}{\Omega^2 \tau_0} \quad (3.374)$$

The decay time of the upper level thus becomes inversely proportional to the Zeno time τ_0 . In the limit $\tau_0 \rightarrow 0$ we have $\tau \rightarrow \infty$. This limit corresponds to infinite accuracy of the σ_3 -measurement and to the emergence of the quantum Zeno effect: The lifetime of the upper level becomes infinite, i.e. the object system remains frozen in its initial state. We remark that the occurrence of the quantum Zeno effect has been observed experimentally in a similar system (Itano, Heinzen, Bollinger and Wineland, 1990).

9.9 3.6 Quantum Brownian motion

In the preceding sections we were mainly concerned with the investigation of master equations which arise in the quantum optical limit. In this limit the rotating wave approximation enabled the derivation of Markovian density matrix equations defining a quantum dynamical semigroup. The physical condition underlying the rotating wave approximation is that the systematic evolution of the reduced system is fast, which means that the coherent dynamics goes through many cycles during a typical relaxation time. In several physical applications involving strong system-environment couplings and low temperatures this condition is violated. By contrast to the typical situation in quantum optics it may even happen that the systematic dynamics of the reduced system is slow compared to the correlation times of the environment. This is the characteristic situation of quantum Brownian motion. Under such circumstances another type of master equation arises which requires an approximation scheme that differs from the quantum optical one.

In this section we are going to introduce and discuss in detail a specific system-reservoir model which is appropriate for the study of several aspects of quantum Brownian motion. This is the famous Caldeira-Leggett model (Caldeira and Leggett, 1983) which is a prototype of a system-reservoir model for the description of dissipation phenomena in solid state physics (Weiss, 1999). In the high-temperature limit the model leads to a quantum master equation which is quite different from the ones obtained in the quantum optical case, but is still of Markovian nature. However, for low temperatures and/or strong couplings the reduced system

dynamics exhibits a pronounced non-Markovian character and one must resort to different techniques in order to describe the reduced system dynamics. We shall discuss here the use of the exact Heisenberg equations of motion for the coupled system, the fluctuation-dissipation theorem and the prominent Feynman-Vernon influence functional technique (Feynman and Vernon, 1963). More details on the treatment of non-Markovian processes and a systematic perturbation expansion are postponed to Part IV.

9.9.1 3.6.1 The Caldeira-Leggett model

The model describes a Brownian particle of mass m with coordinate x which moves in a potential $V(x)$. The free Hamiltonian H_S of the particle is thus taken to be

$$H_S = \frac{1}{2m}p^2 + V(x) \quad (3.375)$$

where p is the particle momentum. The particle is assumed to be coupled to a bath consisting of a large number of harmonic oscillators with masses m_n and frequencies ω_n described by the Hamiltonian

$$H_B = \sum_n \hbar \omega_n \left(b_n^\dagger b_n + \frac{1}{2} \right) = \sum_n \left(\frac{1}{2m_n} p_n^2 + \frac{1}{2} m_n \omega_n^2 x_n^2 \right) \quad (3.376)$$

Here, the $b_n, b_n^\dagger$ denote the annihilation and creation operators of the bath modes, while the x_n and p_n are the corresponding coordinates and canonically conjugated momenta.

In the model under consideration the coordinate x of the Brownian particle is assumed to be coupled linearly to the coordinates x_n of the bath oscillators. The corresponding interaction Hamiltonian H_I takes the form

$$H_I = -x \sum_n \kappa_n x_n \equiv -xB, \quad (3.377)$$

where the bath operator

$$B = \sum_n \kappa_n x_n = \sum_n \kappa_n \sqrt{\frac{\hbar}{2m_n \omega_n}} (b_n + b_n^\dagger) \quad (3.378)$$

is a weighted sum over the coordinates x_n of the bath modes involving the corresponding coupling constants κ_n . This type of interaction will be seen later to yield a renormalization of the potential $V(x)$ of the Brownian particle. To compensate for this renormalization it is convenient to include a further term into the interaction Hamiltonian which is of the form

$$H_c = x^2 \sum_n \frac{\kappa_n^2}{2m_n \omega_n^2}. \quad (3.379)$$

This term, known as the counter-term, acts only in the Hilbert space $\mathcal{H}_S$ of the Brownian particle. It ensures, as will be shown later, that the potential $V(x)$ involves the physical frequencies of the motion of the Brownian particle.

The total Hamiltonian of the combined system $S + B$ is thus given by

$$\begin{aligned} H &= H_S + H_B + H_I + H_c \\ &= \frac{1}{2m}p^2 + V_c(x) + \sum_n \left(\frac{1}{2m_n} p_n^2 + \frac{1}{2} m_n \omega_n^2 x_n^2 \right) - x \sum_n \kappa_n x_n. \end{aligned} \quad (3.380)$$

In the second expression we have included the counter-term H_c into the potential of the particle,

$$V_c(x) = V(x) + x^2 \sum_n \frac{\kappa_n^2}{2m_n \omega_n^2}. \quad (3.381)$$

9.9.2 3.6.2 High-temperature master equation

We start our discussion with an investigation of the simplest case, namely of the motion of the Brownian particle in the weak-coupling and high-temperature limit. This limit allows the derivation of a Markovian master equation for the reduced density matrix of the particle, which is known as the Caldeira-Leggett master equation.

3.6.2.1 Derivation of the master equation

The starting point is the Born-Markov approximation for the reduced density matrix of the Brownian particle which can be written in the Schrödinger picture as follows,

$$\frac{d}{dt} \rho_S(t) = -\frac{i}{\hbar} [H_S + H_c, \rho_S(t)] + \mathcal{K} \rho_S(t) \quad (3.382)$$

where we have introduced the super-operator

$$\mathcal{K} \rho_S(t) = -\frac{1}{\hbar^2} \int_0^\infty d\tau \operatorname{tr}_B [H_I, [H_I(-\tau), \rho_S(t) \otimes \rho_B]]. \quad (3.383)$$

This expression may be derived easily by transforming eqn (3.118) back to the Schrödinger picture. Note that the counter-term H_c must be treated as a term of second order in the coupling, while H_I is of first order, such that (3.382) provides a consistent expansion of the equation of motion to second order in the coupling. Here and in the following, operators with a time argument such as $H_I(t)$ denote interaction picture operators with respect to the unperturbed Hamiltonian $H_0 = H_S + H_B$. We shall assume factorizing initial conditions and that the bath is in a thermal equilibrium state ρ_B at temperature $T = 1/k_B\beta$.

$$\rho_B = \frac{\exp(-\beta H_B)}{\operatorname{tr}_B \exp(-\beta H_B)} \quad (3.384)$$

Again, averages with respect to ρ_B are denoted by angular brackets. For the discussion of quantum Brownian motion it is convenient to introduce the following correlation functions,⁸

$$D(\tau) \equiv i\langle [B, B(-\tau)] \rangle = i[B, B(-\tau)], \quad (3.385)$$

$$D_1(\tau) \equiv \langle \{B, B(-\tau)\} \rangle. \quad (3.386)$$

For reasons which will become clear below, the functions $D(\tau)$ and $D_1(\tau)$ are often referred to as the dissipation and noise kernel, respectively. We note that the average over the bath may be omitted in the expression for the dissipation kernel $D(\tau)$, since the commutator $[B, B(-\tau)]$ is a c-number. Making use of the spectral density defined by

$$J(\omega) = \sum_n \frac{\kappa_n^2}{2m_n \omega_n} \delta(\omega - \omega_n) \quad (3.387)$$

we can express the bath correlation functions by

$$D(\tau) = 2\hbar \int_0^\infty d\omega J(\omega) \sin \omega\tau \quad (3.388)$$

$$D_1(\tau) = 2\hbar \int_0^\infty d\omega J(\omega) \coth(\hbar\omega/2k_B T) \cos \omega\tau \quad (3.389)$$

After a little rearrangement the super-operator $\mathcal{K}$ can now be written as

$$\mathcal{K}\rho_S(t) = \frac{1}{\hbar^2} \int_0^\infty d\tau \left(\frac{i}{2} D(\tau) [x, \{x(-\tau), \rho_S(t)\}] - \frac{1}{2} D_1(\tau) [x, [x(-\tau), \rho_S(t)]] \right) \quad (3.390)$$

The properties of the generator $\mathcal{K}$ strongly depend on the behaviour of the dissipation and the noise kernel which, in turn, is determined by the spectral density $J(\omega)$. In order to obtain true irreversible dynamics one introduces a continuous distribution of bath modes and replaces the spectral density by a smooth function of the frequency ω of the bath modes. In phenomenological modelling one often introduces a frequency-independent damping constant γ and takes the spectral density to be proportional to the frequency for small ω ,

$$J(\omega) = \frac{2m\gamma}{\pi} \omega, \quad \text{for } \omega \rightarrow 0 \quad (3.391)$$

It will be seen below that this form for the spectral density, which is known as the Ohmic spectral density, gives rise to frequency-independent damping with the rate γ . On the other hand, the high-frequency modes of the environment lead to a renormalization of the physical parameters in the particle potential. To account for this renormalization of the particle Hamiltonian one introduces a high-frequency cutoff Ω into the spectral density. To give an example we take an Ohmic spectral density with a Lorentz-Drude cutoff function,

$$J(\omega) = \frac{2m\gamma}{\pi} \omega \frac{\Omega^2}{\Omega^2 + \omega^2} \quad (3.392)$$

For this type of spectral density the bath correlations can be determined analytically as

$$D(\tau) = 2m\gamma\hbar\Omega^2 e^{-\Omega|\tau|} \text{sign } \tau \quad (3.393)$$

$$D_1(\tau) = 4m\gamma k_B T \Omega^2 \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{\Omega e^{-\Omega|\tau|} - |\nu_n| e^{-|\nu_n||\tau|}}{\Omega^2 - \nu_n^2} \quad (3.394)$$

Here, the noise kernel $D_1(\tau)$ is calculated by using the formula

$$\coth(\hbar\omega/2k_B T) = \frac{2k_B T}{\hbar} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{\omega}{\omega^2 + \nu_n^2} \quad (3.395)$$

where the $\nu_n = 2\pi n k_B T / \hbar$ are known as the Matsubara frequencies. The remaining integrals are then determined with the help of the method of residues.

Table 3.1 Separation of the time scales in the quantum optical limit and in quantum Brownian motion.

⁰⁸ We use a notation which is analogous to the usual notation for the corresponding correlation functions in QED, see Chapter 12.

quantum optical limit	quantum Brownian motion
$\tau_B \ll \tau_R$	$\tau_B \ll \tau_R$
$\tau_S \ll \tau_R$	$\tau_B \ll \tau_S$

We observe that the correlation functions involve the correlation times Ω^{-1} and $|\nu_n|^{-1}$ for $n \neq 0$. The largest correlation time is therefore equal to $\tau_B = \text{Max} \{\Omega^{-1}, \hbar/2\pi k_B T\}$ and the condition for the applicability of the Born-Markor approximation becomes

$$\hbar\gamma \ll \text{Min} \{\hbar\Omega, 2\pi k_B T\}. \quad (3.396)$$

This condition corresponds to the condition $\tau_B \ll \tau_R$ which has already been used in the derivation of the weak-coupling and the quantum optical master equations in Sections 3.3.1 and 3.4. However, in the quantum optical case one proceeds by performing the rotating wave approximation which requires that the systematic evolution of the reduced system is fast compared to the typical relaxation time, that is $\tau_S \sim |\omega' - \omega|^{-1} \ll \tau_R$. By contrast, here we investigate the case that the systematic system's evolution is slow in comparison to the bath correlation time. If we denote by $\omega_0 = \tau_S^{-1}$ a typical frequency of the system evolution the latter condition becomes

$$\hbar\omega_0 \ll \text{Min} \{\hbar\Omega, 2\pi k_B T\}. \quad (3.397)$$

The fundamental difference between the quantum optical and the quantum Brownian motion case is summarized in Table 3.1.

In order to simplify the expression for the generator $\mathcal{K}$ we exploit condition (3.397) and approximate $x(-\tau)$ by the free dynamics,

$$x(-\tau) \equiv e^{-iH_S\tau/\hbar} x e^{iH_S\tau/\hbar} \approx x - \frac{i}{\hbar} [H_S, x] \tau = x - \frac{p}{m} \tau. \quad (3.398)$$

Substituting into eqn (3.390) the generator is seen to consist of four terms:

$$\begin{aligned} \mathcal{K}\rho_S = & \frac{i}{2\hbar^2} \int_0^\infty d\tau D(\tau) [x, \{x, \rho_S\}] - \frac{i}{2\hbar^2 m} \int_0^\infty d\tau \tau D(\tau) [x, \{p, \rho_S\}] \\ & - \frac{1}{2\hbar^2} \int_0^\infty d\tau D_1(\tau) [x, [x, \rho_S]] + \frac{1}{2\hbar^2 m} \int_0^\infty d\tau \tau D_1(\tau) [x, [p, \rho_S]]. \end{aligned} \quad (3.399)$$

The first term on the right-hand side of this equation can be determined with the help of the relation

$$\int_0^\infty d\tau \sin \omega \tau = \text{P} \frac{1}{\omega} \quad (3.400)$$

Hence, we have

$$\int_0^\infty d\tau D(\tau) = 2\hbar \int_0^\infty d\omega \frac{J(\omega)}{\omega} = 2\hbar \sum_n \frac{\kappa_n^2}{2m_n \omega_n^2} \quad (3.401)$$

Since, in addition, $[x, \{x, \rho_S\}] = [x^2, \rho_S]$ the first term on the right-hand side of eqn (3.399) can be cast into the form

$$\frac{i}{\hbar} \sum_n \frac{\kappa_n^2}{2m_n \omega_n^2} [x^2, \rho_S] = \frac{i}{\hbar} [H_c, \rho_S] \quad (3.402)$$

Evidently, this term compensates the contribution from the counter-term to the Hamiltonian part of eqn (3.382). Thus we indeed see, as claimed earlier, that the interaction with the bath

induces a renormalization of the free-particle Hamiltonian H_S which is exactly cancelled by the counter-term H_c .

In order to determine the second term on the right-hand side of (3.399) we use

$$\int_0^\infty d\tau \tau \sin \omega \tau = -\frac{\partial}{\partial \omega} \int_0^\infty d\tau \cos \omega \tau = -\pi \delta'(\omega) \quad (3.403)$$

which yields

$$\int_0^\infty d\tau \tau D(\tau) = \hbar \pi J'(0) = 2m\gamma \hbar \quad (3.404)$$

and allows the second term to be written as

$$-\frac{i\gamma}{\hbar} [x, \{p, \rho_S\}] \quad (3.405)$$

Correspondingly, we find

$$\begin{aligned} \int_0^\infty d\tau D_1(\tau) &= 2\hbar \pi \int_0^\infty d\omega J(\omega) \coth(\hbar\omega/2k_B T) \delta(\omega) \\ &= \hbar \pi \lim_{\omega \rightarrow 0} J(\omega) \coth(\hbar\omega/2k_B T) = 4m\gamma k_B T \end{aligned} \quad (3.406)$$

The third term of (3.399) may thus be cast into the form

$$-\frac{2m\gamma k_B T}{\hbar^2} [x, [x, \rho_S]]. \quad (3.407)$$

The fourth term of (3.399), finally, depends on the frequency cutoff Ω and will be determined by use of the explicit expression (3.394) for the Ohmic spectral density with Lorentz-Drude cutoff. In the limit of high temperatures such that $k_B T \gtrsim \hbar\Omega$ we get

$$\int_0^\infty d\tau \tau D_1(\tau) \approx \frac{4m\gamma k_B T}{\Omega} \quad (3.408)$$

Hence, the fourth term reads

$$\frac{2\gamma k_B T}{\hbar^2 \Omega} [x, [p, \rho_S]] \quad (3.409)$$

To estimate the importance of this contribution we compare it with the third term (3.407). Since the momentum is of the order of $p = m\dot{x} \sim m\omega_0 x$, we see that the term (3.409) differs from the term (3.407) by a factor of ω_0/Ω , which, by assumption, is very small. Thus we may neglect the fourth term in the master equation.

Collecting our results we thus arrive finally at the Caldeira-Leggett master equation (Caldeira and Leggett, 1983)

$$\frac{d}{dt} \rho_S(t) = -\frac{i}{\hbar} [H_S, \rho_S(t)] - \frac{i\gamma}{\hbar} [x, \{p, \rho_S(t)\}] - \frac{2m\gamma k_B T}{\hbar^2} [x, [x, \rho_S(t)]] . \quad (3.410)$$

The first term on the right-hand side of the master equation describes the free coherent dynamics of the system. The second term, which is proportional to the relaxation rate γ , is a dissipative term which stems from the contribution involving the dissipation kernel $D(\tau)$. The last term, which is proportional to the temperature, describes thermal fluctuations and will turn out, as we will see later on, to be of fundamental importance in the theoretical description of the phenomenon of decoherence.

One might ask the question of whether the generator of the Brownian motion master equation (3.410) can be brought into Lindblad form. The answer to this question is negative. However, it can be written in Lindblad form by just adding a term which is small in the high-temperature limit. To see this we observe that (3.410) can be written in the form

$$\frac{d}{dt}\rho_S = -\frac{i}{\hbar}[H_S, \rho_S] - \frac{i\gamma}{2\hbar}[xp + px, \rho_S] + \mathcal{D}(\rho_S) \quad (3.411)$$

The commutator $[xp + px, \rho_S]$ gives a Hamiltonian contribution to the generator, while $\mathcal{D}(\rho_S)$ is of the form of the dissipator in eqn (3.63) with $F_1 = x, F_2 = p$ and the coefficient matrix

$$(a_{ij}) = \begin{pmatrix} 4m\gamma k_B T / \hbar^2 & -i\gamma / \hbar \\ i\gamma / \hbar & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.412)$$

Thus, the generator of the Caldeira-Leggett master equation is of the first standard form (3.63) under the condition that the matrix a_{ij} is positive. This condition is obviously violated for $\det a = -(\gamma/\hbar)^2 < 0$. However, we could introduce a non-vanishing coefficient a_{22} which corresponds to an additional term of the form $-a_{22}[p, [p, \rho_S]]/2$ in the generator of the master equation. With such a term the positivity condition reads

$$\det a = \frac{4m\gamma k_B T}{\hbar^2} a_{22} - (\gamma/\hbar)^2 \geq 0. \quad (3.413)$$

Let us employ a minimally invasive modification and require that $\det a = 0$, which yields $a_{22} = \gamma/4mk_B T$. This amounts to adding the term

$$-\frac{\gamma}{8mk_B T}[p, [p, \rho_S]] \quad (3.414)$$

to the right-hand side of the master equation which makes the generator positive and allows the master equation to be written in Lindblad form (3.66) with a single relaxation rate γ and a single Lindblad operator

$$A = \sqrt{\frac{4mk_B T}{\hbar^2}}x + i\sqrt{\frac{1}{4mk_B T}}p \quad (3.415)$$

The term (3.414) is small compared to the term with the double x -commutator provided $\hbar/k_B T \ll \omega_0^{-1}$. This shows that the term added above is in fact small under the conditions which were used to derive the master equation.

3.6.2.2 Approximate stationary solution

In the position representation the master equation (3.410) takes the form

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}\rho_S(x, x't) = & \left[\frac{i\hbar}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial x'^2} \right) - \frac{i}{\hbar} (V(x) - V(x')) \right. \\ & \left. - \gamma(x - x') \left(\frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x'} \right) - \frac{2m\gamma k_B T}{\hbar^2} (x - x')^2 \right] \rho_S(x, x't) \end{aligned} \quad (3.416)$$

Introducing new variables r and q defined through

$$x = r + \hbar q, \quad x' = r - \hbar q, \quad (3.417)$$

we obtain an equation for the function $f(r, q, t) = \rho_S(x, x', t)$,

$$\frac{\partial}{\partial t} f = \left[\frac{i}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r \partial q} - \frac{i}{\hbar} (V(r + \hbar q) - V(r - \hbar q)) - 2\gamma q \frac{\partial}{\partial q} - 8\gamma m k_B T q^2 \right] f. \quad (3.418)$$

On approximating

$$V(r + \hbar q) - V(r - \hbar q) \approx 2V'(r)\hbar q \quad (3.419)$$

the stationary solution can be written

$$f(r, q) = N \exp \left[-\frac{V(r)}{k_B T} - 2mk_B T q^2 \right], \quad (3.420)$$

such that an approximate stationary solution of the master equation (3.410) is found to be

$$\rho_S(x, x') = N \exp \left[-\frac{V((x + x')/2)}{k_B T} - \frac{mk_B T (x - x')^2}{2\hbar^2} \right], \quad (3.421)$$

with the normalization factor

$$N^{-1} = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \exp \left[-\frac{V(x)}{k_B T} \right]. \quad (3.422)$$

We see that the diagonal of the position space density matrix represents an equilibrium distribution proportional to $\exp[-V(x)/k_B T]$ in accordance with the result of statistical mechanics. The off-diagonal elements decay exponentially with the distance $|x - x'|$ from the diagonal, where the relevant length scale is given by the thermal wavelength $\lambda_{\text{th}} = \hbar/\sqrt{2mk_B T}$. Expanding the left-hand side of (3.419) to second order we thus see that (3.419) provides a good approximation as long as the thermal wavelength is small compared to $\sqrt{24|V'|/|V''|}$.

We also note that (3.419) becomes an equality for a quadratic potential $V(x) = \frac{1}{2}m\omega_0^2 x^2$, in which case the stationary density is represented by a Gaussian function

$$\rho_S(x, x') = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_x^2}} \exp \left[-\frac{1}{2\sigma_x^2} \left(\frac{x + x'}{2} \right)^2 - \frac{\sigma_p^2}{2\hbar^2} (x - x')^2 \right], \quad (3.423)$$

with corresponding expressions for the variances of position and momentum coordinates,

$$\sigma_x^2 = \langle x^2 \rangle = \frac{k_B T}{m\omega_0^2}, \quad \sigma_p^2 = \langle p^2 \rangle = mk_B T. \quad (3.424)$$

The product of position and momentum uncertainty is therefore

$$\sigma_x \cdot \sigma_p = \frac{k_B T}{\omega_0} \gg \frac{\hbar}{2} \quad (3.425)$$

Thus, in the present high-temperature approximation the product of the uncertainties is large compared to the minimal possible value allowed by the uncertainty relation.

3.6.2.3 Equations of motion for mean values and variances

With the help of the master equation (3.410) one easily obtains the following equations for the first and second moments of the coordinate and the momentum of the Brownian particle,

$$\frac{d}{dt}\langle x \rangle = \frac{1}{m}\langle p \rangle \quad (3.426)$$

$$\frac{d}{dt}\langle p \rangle = -\langle V'(x) \rangle - 2\gamma\langle p \rangle \quad (3.427)$$

$$\frac{d}{dt}\langle x^2 \rangle = \frac{1}{m}\langle px + xp \rangle \quad (3.428)$$

$$\frac{d}{dt}\langle px + xp \rangle = \frac{2}{m}\langle p^2 \rangle - 2\langle xV'(x) \rangle - 2\gamma\langle px + xp \rangle \quad (3.429)$$

$$\frac{d}{dt}\langle p^2 \rangle = -\langle pV'(x) + V'(x)p \rangle - 4\gamma\langle p^2 \rangle + 4m\gamma k_B T \quad (3.430)$$

These are the Ehrenfest equations for the first and second moments of coordinate and momentum of a damped particle. They involve the friction force $-2\gamma p$. The corresponding classical equations of motion are given by the stochastic differential equations

$$dx(t) = \frac{1}{m}p(t)dt \quad (3.431)$$

$$dp(t) = -V'(x(t))dt - 2\gamma p(t)dt + \sqrt{4m\gamma k_B T}dW(t). \quad (3.432)$$

Let us solve the equations of motion (3.426)-(3.430) for a free Brownian particle, that is for $V = 0$. The solutions for the first moments yield

$$\langle x(t) \rangle = \langle x(0) \rangle + \frac{1}{2m\gamma} (1 - e^{-2\gamma t}) \langle p(0) \rangle, \quad (3.433)$$

$$\langle p(t) \rangle = e^{-2\gamma t} \langle p(0) \rangle. \quad (3.434)$$

Thus, the initial momentum relaxes exponentially to zero over a time scale $1/2\gamma$, while the average position is displaced asymptotically by the value $\langle \dot{x}(0) \rangle / 2\gamma$. Defining

$$\sigma_x^2(t) = \langle x^2(t) \rangle - \langle x(t) \rangle^2 \quad (3.435)$$

$$\sigma_p^2(t) = \langle p^2(t) \rangle - \langle p(t) \rangle^2 \quad (3.436)$$

$$\sigma_{px}(t) = \langle \{p(t), x(t)\} \rangle - 2\langle p(t) \rangle \langle x(t) \rangle, \quad (3.437)$$

we can represent the solutions for the second moments as follows,

$$\begin{aligned} \sigma_x^2(t) = & \sigma_x^2(0) + \left(\frac{1 - e^{-2\gamma t}}{2\gamma} \right)^2 \frac{\sigma_p^2(0)}{m^2} + \frac{1 - e^{-2\gamma t}}{2m\gamma} \sigma_{px}(0) \\ & + \frac{k_B T}{m\gamma^2} \left[\gamma t - (1 - e^{-2\gamma t}) + \frac{1}{4} (1 - e^{-4\gamma t}) \right], \end{aligned} \quad (3.438)$$

$$\sigma_p^2(t) = e^{-4\gamma t} \sigma_p^2(0) + m k_B T (1 - e^{-4\gamma t}), \quad (3.439)$$

$$\begin{aligned} \sigma_{px}(t) = & e^{-2\gamma t} \sigma_{px}^2(0) + \frac{1}{m\gamma} (1 - e^{-2\gamma t}) e^{-2\gamma t} \sigma_p^2(0) \\ & + \frac{k_B T}{\gamma} (1 - e^{-2\gamma t})^2. \end{aligned} \quad (3.440)$$

In the long time limit ($\gamma t \gg 1$) we thus get the asymptotic expressions

$$\sigma_x^2 \longrightarrow \frac{k_B T}{m\gamma} t, \quad \sigma_p^2 \longrightarrow mk_B T, \quad \sigma_{px} \longrightarrow \frac{k_B T}{\gamma}. \quad (3.441)$$

Obviously, the process does not become stationary in the long time limit. The momentum uncertainty approaches a value which is equal to that given by the thermal equilibrium value (see eqn (3.424)). The position uncertainty, however, increases with the square root of time, exactly as in classical Brownian motion.

For a pure Gaussian (minimal uncertainty) initial state we have $\sigma_p^2(0) = \hbar^2/4\sigma_x^2(0)$ and $\sigma_{px}(0) = 0$, which leads to

$$\begin{aligned} \sigma_x^2(t) &= \sigma_x^2(0) + \frac{\hbar^2}{4m^2\sigma_x^2(0)} \left(\frac{1 - e^{-2\gamma t}}{2\gamma} \right)^2 \\ &\quad + \frac{k_B T}{m\gamma^2} \left[\gamma t - (1 - e^{-2\gamma t}) + \frac{1}{4} (1 - e^{-4\gamma t}) \right] \\ &\approx \sigma_x^2(0) + \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2\sigma_x^2(0)} + \frac{4k_B T}{3m\gamma^2} (\gamma t)^3, \end{aligned} \quad (3.442)$$

where the second relation holds for $\gamma t \ll 1$. The second term of this second form describes the spreading of the Gaussian wave packet according to the free Schrödinger equation. For short times the influence of the environment is seen to yield an additional contribution to the spreading which is proportional to the third power of t .

9.9.3 3.6.3 The exact Heisenberg equations of motion

For a number of applications it is useful not to resort to an approximate master equation for the reduced density matrix, but to work instead directly with the Heisenberg equations of motion of the system. Since in the Caldeira-Leggett model the bath is a collection of harmonic oscillators and since the coupling to the reduced system is linear, one can eliminate the dynamics of the bath variables completely from the Heisenberg equations of motion for the variables pertaining to the reduced system. This will be done in the present subsection. The usage of the resulting Heisenberg equations of motion will be illustrated with the help of several examples for free Brownian motion and by means of the fluctuation-dissipation theorem.

3.6.3.1 Derivation of the Heisenberg equations

The complete Caldeira-Leggett model leads to the following exact Heisenberg equations of motion for the Brownian particle and the environmental oscillators,

$$\dot{x}(t) = \frac{i}{\hbar} [H, x(t)] = \frac{1}{m} p \quad (3.443)$$

$$\dot{x}_n(t) = \frac{i}{\hbar} [H, x_n(t)] = \frac{1}{m_n} p_n, \quad (3.444)$$

$$\dot{p}(t) = \frac{i}{\hbar} [H, p(t)] = -V'_c(x(t)) + \sum_n \kappa_n x_n(t), \quad (3.445)$$

$$\dot{p}_n(t) = \frac{i}{\hbar} [H, p_n(t)] = -m_n \omega_n^2 x_n(t) + \kappa_n x(t) \quad (3.446)$$

The corresponding equation for the coordinate of the Brownian particles is thus

$$m\ddot{x}(t) + V'_c(x(t)) - \sum_n \kappa_n x_n(t) = 0 \quad (3.447)$$

while the equations for the coordinates of the bath oscillators take the form

$$m_n \ddot{x}_n(t) + m_n \omega_n^2 x_n(t) - \kappa_n x(t) = 0 \quad (3.448)$$

The last equation shows that the n -th bath oscillator is driven by the force $\kappa_n x(t)$ which depends linearly on the coordinate of the Brownian particle. In order to get a closed equation of motion for $x(t)$ one solves eqn (3.448) in terms of $x(t)$ and of the initial conditions for the bath modes and substitutes the result into eqn (3.447). To this end, it is convenient to express the coordinates of the bath oscillators in terms of the creation and annihilation operators $b_n^\dagger, b_n$ as

$$x_n(0) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m_n\omega_n}} (b_n + b_n^\dagger), \quad p_n(0) = -i\sqrt{\frac{m_n\hbar\omega_n}{2}} (b_n - b_n^\dagger). \quad (3.449)$$

The solution of eqn (3.448) is then given by

$$x_n(t) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m_n\omega_n}} (e^{-i\omega_n t} b_n + e^{i\omega_n t} b_n^\dagger) + \frac{\kappa_n}{m_n\omega_n} \int_0^t ds \sin[\omega_n(t-s)] x(s). \quad (3.450)$$

Substituting into eqn (3.447) yields

$$m\ddot{x}(t) + V'_c(x(t)) - \sum_n \frac{\kappa_n^2}{m_n\omega_n} \int_0^t ds \sin[\omega_n(t-s)] x(s) = B(t) \quad (3.451)$$

where we recall that the operator $B(t)$ which appears here on the right-hand side is the interaction picture operator

$$B(t) = \sum_n \kappa_n \sqrt{\frac{\hbar}{2m_n\omega_n}} (e^{-i\omega_n t} b_n + e^{i\omega_n t} b_n^\dagger) \quad (3.452)$$

corresponding to the Schrödinger operator $B = \sum_n \kappa_n x_n(0)$. With the help of the dissipation kernel we can write the equation of motion for the coordinate of the Brownian particle as

$$\ddot{x}(t) + \frac{1}{m} V'_c(x(t)) - \frac{1}{\hbar m} \int_0^t ds D(t-s) x(s) = \frac{1}{m} B(t) \quad (3.453)$$

In the theory of quantum Brownian motion it is useful to express the dissipation kernel in terms of another quantity which is known as the damping kernel

$$\gamma(t-s) = \frac{2}{m} \int_0^\infty d\omega \frac{J(\omega)}{\omega} \cos[\omega(t-s)] \quad (3.454)$$

which satisfies

$$\frac{d}{dt} \gamma(t-s) = -\frac{1}{\hbar m} D(t-s) \quad (3.455)$$

and

$$\gamma(0) = \frac{2}{m} \int_0^\infty d\omega \frac{J(\omega)}{\omega} = \sum_n \frac{\kappa_n^2}{m m_n \omega_n^2} \quad (3.456)$$

With the help of this damping kernel we can write the dissipative term of eqn (3.453) as follows

$$\begin{aligned}
-\frac{1}{\hbar m} \int_0^t ds D(t-s)x(s) &= \int_0^t ds \frac{d}{dt} \gamma(t-s)x(s) \\
&= \frac{d}{dt} \int_0^t ds \gamma(t-s)x(s) - \gamma(0)x(t)
\end{aligned} \tag{3.457}$$

In view of eqn (3.456) the last term $-\gamma(0)x(t)$ is seen to cancel the contribution from the counter-term contained in the potential $V_c(x)$. Thus we finally arrive at the following exact Heisenberg equation of motion,

$$\ddot{x}(t) + \frac{1}{m} V'(x(t)) + \frac{d}{dt} \int_0^t ds \gamma(t-s)x(s) = \frac{1}{m} B(t) \tag{3.458}$$

Equation (3.458) is the desired equation of motion for the coordinate of the Brownian particle. It may be viewed as the quantum analogue of a classical stochastic differential equation, involving a damping kernel $\gamma(t-s)$ and a stochastic force $B(t)$ whose statistical properties depend on the initial distribution at $t=0$. In the case of an environment with an Ohmic spectral density with an infinite cutoff, $\Omega \rightarrow \infty$, we get the damping kernel (see eqns (3.392) and (3.454))

$$\gamma(t) = 4\gamma\delta(t) \tag{3.459}$$

such that the Heisenberg equations of motion take the form

$$\dot{x}(t) = \frac{1}{m} p(t), \tag{3.460}$$

$$\dot{p}(t) = -V'(x(t)) - 2m\gamma\dot{x}(t) + B(t). \tag{3.461}$$

As in the classical stochastic differential equations (3.431) and (3.432) the friction force is equal to $-2m\gamma\dot{x}$.

The statistics of the forcing term $B(t)$ in eqn (3.458) is described by the quantum correlation function $\langle\{B(t), B(t')\}\rangle$. We emphasize that the angular brackets denote here the average over the initial distribution $\rho(0)$ of the total system since we are working in the Heisenberg picture. If we use an uncorrelated initial state of the form $\rho(0) = \rho_S(0) \otimes \rho_B$ this correlation function is equal to the noise kernel $D_1(t-t')$ introduced in eqn (3.386). For an Ohmic spectral density it is given by

$$D_1(t-t') = \langle\{B(t), B(t')\}\rangle = \frac{4m\gamma\hbar}{\pi} \int_0^\Omega d\omega \omega \coth(\hbar\omega/2k_B T) \cos[\omega(t-t')]. \tag{3.462}$$

In the high-temperature limit one may assume that $2k_B T \gg \hbar\omega$ for all relevant frequencies ω which gives

$$\frac{1}{2} \langle\{B(t), B(t')\}\rangle \approx \frac{2m\gamma\hbar}{\pi} \frac{2k_B T}{\hbar} \int_0^\infty d\omega \cos[\omega(t-t')] = 4m\gamma k_B T \delta(t-t'). \tag{3.463}$$

This shows that $\hbar$ drops out of the correlation function and that we obtain precisely the correlation function of the noise term in the classical stochastic differential equations (3.431) and (3.432).

3.6.3.2 Quadratic potentials

For a quadratic potential

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega_0^2 x^2 \quad (3.464)$$

the Heisenberg equation (3.458) becomes

$$\ddot{x}(t) + \omega_0^2 x(t) + \frac{d}{dt} \int_0^t ds \gamma(t-s)x(s) = \frac{1}{m}B(t) \quad (3.465)$$

To solve this equation we introduce the fundamental solutions $G_1(t)$ and $G_2(t)$ of the homogeneous part of eqn (3.465), which is obtained by setting the right-hand side equal to zero. These solutions are defined through the initial conditions

$$\begin{aligned} G_1(0) &= 1, & \dot{G}_1(0) &= 0 \\ G_2(0) &= 0, & \dot{G}_2(0) &= 1 \end{aligned} \quad (3.467)$$

Introducing the Laplace transformation

$$\hat{f}(z) = \int_0^\infty dt e^{-zt} f(t) \quad (3.468)$$

one can write the Laplace transforms of the fundamental solutions as follows,

$$\begin{aligned} \hat{G}_1(z) &= \frac{z}{z^2 + \omega_0^2 + z\hat{\gamma}(z)} \\ \hat{G}_2(z) &= \frac{1}{z^2 + \omega_0^2 + z\hat{\gamma}(z)} \end{aligned} \quad (3.469)$$

where $\hat{\gamma}(z)$ is the Laplace transform of the damping kernel.

In terms of the fundamental solutions one can write the general solution of the Heisenberg equation (3.465) as

$$x(t) = G_1(t)x(0) + G_2(t)\dot{x}(0) + \frac{1}{m} \int_0^t ds G_2(t-s)B(s) \quad (3.470)$$

With the help of this solution all desired mean values, variances and correlation functions of the Brownian particle may be expressed in terms of averages over the initial distribution $\rho(0)$ of the total system.

3.6.3.3 Free Brownian motion

As an example we study free Brownian motion, that is $V = 0$, for an Ohmic spectral density. For an infinite cutoff the fundamental solutions then take the form

$$G_1(t) = 1, \quad G_2(t) = \frac{1}{2\gamma} (1 - e^{-2\gamma t}) \quad (3.471)$$

which yields

$$x(t) = x(0) + \frac{1 - e^{-2\gamma t}}{2\gamma} \dot{x}(0) + \int_0^t ds \frac{1 - e^{-2\gamma(t-s)}}{2m\gamma} B(s) \quad (3.472)$$

$$p(t) = e^{-2\gamma t} p(0) + \int_0^t ds e^{-2\gamma(t-s)} B(s) \quad (3.473)$$

Let us consider a factorizing initial state $\rho(0) = \rho_S(0) \otimes \rho_B$. The initial coordinates of the Brownian particle and of the bath oscillators are then uncorrelated and averages of the form $\langle x(0)B(s) \rangle$ and $\langle p(0)B(s) \rangle$ vanish. With the help of (3.473) the mean kinetic energy of the Brownian particle, for example, is found to be

$$\begin{aligned} E(t) &\equiv \frac{1}{2m} \langle p^2(t) \rangle \\ &= \frac{1}{2m} \langle p^2(0) \rangle e^{-4\gamma t} + \frac{1}{4m} \int_0^t ds \int_0^t ds' e^{-2\gamma(2t-s-s')} D_1(s-s') \\ &= \frac{1}{2m} \langle p^2(0) \rangle e^{-4\gamma t} + \frac{\gamma \hbar}{\pi} \int_0^\Omega d\omega \omega \coth(\hbar\omega/2k_B T) \frac{|e^{i\omega t} - e^{-2\gamma t}|^2}{\omega^2 + (2\gamma)^2}, \end{aligned} \quad (3.474)$$

where we have used expression (3.462) for the noise kernel. If we perform here the limit $\gamma t \rightarrow \infty$ we find that the mean kinetic energy approaches the value

$$E(\infty) = \frac{2\gamma}{\pi} \int_0^\Omega d\omega \frac{\hbar\omega (N(\omega) + \frac{1}{2})}{\omega^2 + (2\gamma)^2} \equiv E_{\text{th}} + E_{\text{vac}} \quad (3.475)$$

This equation provides a spectral representation of the mean kinetic energy of the Brownian particle: Each frequency component is given by the mean energy of the environmental oscillators at that frequency times a Lorentzian-type spectral density.

The thermal contribution E_{th} to the kinetic energy is given by an integral which converges in the limit of an infinite cutoff,

$$E_{\text{th}} = \frac{2\gamma}{\pi} \int_0^\infty d\omega \frac{\hbar\omega N(\omega)}{\omega^2 + (2\gamma)^2} \quad (3.476)$$

In the high-temperature limit $k_B T \gg \hbar\gamma$ this expression leads to the well-known result of classical statistical mechanics, $E_{\text{th}} \approx \frac{1}{2} k_B T$. On the other hand, the vacuum contribution E_{vac} is seen to diverge logarithmically with the cutoff,

$$E_{\text{vac}} = \frac{2\gamma}{\pi} \int_0^\Omega d\omega \frac{\hbar\omega/2}{\omega^2 + (2\gamma)^2} = \frac{\gamma \hbar}{2\pi} \ln \left[1 + \left(\frac{\Omega}{2\gamma} \right)^2 \right] \quad (3.477)$$

The interaction of the Brownian particle with the vacuum fluctuations of the high-frequency modes of the environment thus yields a logarithmically divergent contribution to its mean kinetic energy.

As a further example we determine the mean square displacement

$$d^2(t, t') = \langle [x(t) - x(t')]^2 \rangle \quad (3.478)$$

of the particle which is an important quantity in the theory of Brownian motion. On using eqns (3.472) and (3.462) one obtains

$$\begin{aligned} d^2(t, t') &= \frac{1}{4m^2\gamma^2} (e^{-2\gamma t} - e^{-2\gamma t'})^2 \langle p^2(0) \rangle \\ &\quad + \frac{2\gamma \hbar}{m\pi} \int_0^\Omega d\omega \frac{\omega \coth(\hbar\omega/2k_B T)}{\omega^2 + (2\gamma)^2} \left| \frac{e^{i\omega t} - e^{i\omega t'}}{i\omega} + \frac{e^{-2\gamma t} - e^{-2\gamma t'}}{2\gamma} \right|^2 \end{aligned} \quad (3.479)$$

The second term within the squared modulus leads to an integral which diverges in the limit of an infinite cutoff. In fact, the cutoff-dependent contribution to the mean squared displacement is found to be

$$d^2(t, t')|_{\text{singular}} = \frac{1}{4\gamma^2} \left(e^{-2\gamma t} - e^{-2\gamma t'} \right)^2 \frac{2E_{\text{vac}}}{m} \quad (3.480)$$

This shows that the ultraviolet divergent vacuum part of the mean quadratic velocity $2E_{\text{vac}}/m$ leads to a corresponding divergent contribution of the mean square displacement: The Brownian particle can absorb an arbitrary amount of energy from the high-frequency environmental modes and can travel an arbitrary distance within a finite time interval.

This singular behaviour, known as initial jolts, is clearly a result of the artificial assumption of an uncorrelated initial state. Namely, if we let the times t and t' go to infinity, keeping fixed their difference $\tau \equiv t - t'$, all transient terms vanish and the mean square displacement becomes a function of τ which is given by the ultraviolet convergent integral

$$d^2(\tau) = \frac{2\gamma\hbar}{m\pi} \int_0^\infty d\omega \frac{\omega \coth(\hbar\omega/2k_B T)}{\omega^2 + (2\gamma)^2} \frac{4 \sin^2(\omega\tau/2)}{\omega^2} \quad (3.481)$$

For any finite temperature we can replace the second factor of the integrand by $2\pi|\tau|\delta(\omega)$ which leads to the asymptotic expression

$$d^2(\tau) \approx \frac{k_B T}{m\gamma} |\tau| \quad (3.482)$$

This formula describes the well-known regime of classical diffusion which is valid for $\gamma|\tau| \gg 1$ and $|\tau| \gg \hbar/k_B T$. The same result is found for a classical Brownian particle. On the other hand, for zero temperature the term $\omega \coth(\hbar\omega/k_B T)$ in the integrand must be replaced by ω and one obtains the asymptotic expression

$$d^2(\tau) = \frac{8\gamma\hbar}{m\pi} \int_0^\infty d\omega \frac{\sin^2(\omega\tau/2)}{\omega(\omega^2 + (2\gamma)^2)} \approx \frac{\hbar}{m\pi\gamma} \ln(\gamma|\tau|) \quad (3.483)$$

which is valid for $\gamma|\tau| \gg 1$. We observe a strong subdiffusive behaviour of the particle in the quantum regime. The mean square displacement increases only weakly with the logarithm of time, the relevant length scale for the quantum diffusion being given by $\sqrt{\hbar/m\pi\gamma}$.

9.9.4 3.6.3.4 Response function, equilibrium correlation function and the FDT

In order to determine the equilibrium fluctuations of the total system it is useful to invoke the fluctuation-dissipation theorem (FDT). Together with the exact solutions of the Heisenberg equations of motion the FDT allows us to determine all equilibrium correlations of the Brownian particle. To formulate the FDT we introduce the symmetrized autocorrelation function of some Heisenberg picture operator $z(t)$ of the total system,

$$S(\tau) = \frac{1}{2} \langle \{z(t+\tau), z(t)\} \rangle = \frac{1}{2} \langle \{z(\tau), z(0)\} \rangle. \quad (3.484)$$

For simplicity we assume that $\langle z(t) \rangle = 0$ and $z^\dagger(t) = z(t)$. We emphasize that the angular brackets denote here the average over the equilibrium distribution of the total system given by

$$\rho = \frac{\exp(-\beta H)}{\text{tr} \exp(-\beta H)}, \quad (3.485)$$

where we recall that H is the Hamiltonian of the combined system $S + B$. Due to the homogeneity in time the autocorrelation only depends on τ and satisfies $S^*(\tau) = S(\tau) = S(-\tau)$. The spectrum of the equilibrium fluctuations is given by the Fourier transform of the autocorrelation function,

$$\tilde{S}(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau \cos \omega\tau S(\tau) \quad (3.486)$$

We note that the spectrum has the property $\tilde{S}^*(\omega) = \tilde{S}(\omega) = \tilde{S}(-\omega)$. The response function pertaining to the variable $z(t)$ is defined as

$$\chi(\tau) = \frac{i}{\hbar} \theta(\tau) \langle [z(\tau), z(0)] \rangle. \quad (3.487)$$

It describes the linear response of the system to an external force $F(t)$ which is applied for times $t > 0$ and is represented by a time-dependent perturbation of the form $V(t) = -zF(t)$ in the Hamiltonian of the total system. First-order perturbation theory then yields the linear response of the system

$$\langle \delta z(t) \rangle = \int_0^\infty ds \chi(t-s) F(s) \quad (3.488)$$

where $\delta z(t) \equiv z_V(t) - z(t)$ and $z_V(t)$ denotes the Heisenberg operator corresponding to the perturbed Hamiltonian $H + V(t)$. The average first-order change of the variable $z(t)$ is thus given by a linear integral transform of the applied force where the integral kernel is provided by the response function. We note that the linear response at time t only depends on the values of the force at times prior to t , showing the causal character of the system's response. The Fourier transform of the response function may be written as

$$\tilde{\chi}(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau e^{i\omega\tau} \chi(\tau) = \int_0^{+\infty} d\tau e^{i\omega\tau} \chi(\tau) \equiv \tilde{\chi}'(\omega) + i\tilde{\chi}''(\omega) \quad (3.489)$$

where we have decomposed $\tilde{\chi}(\omega)$ into real and imaginary parts. The fluctuation-dissipation theorem provides a relation between the linear response of the system to an external force and the fluctuations in equilibrium. In frequency language this relation is given by (see, e.g. Landau and Lifshitz. 1958)

$$\tilde{S}(\omega) = \hbar \coth(\hbar\omega/2k_B T) \tilde{\chi}''(\omega), \quad (3.490)$$

which expresses the spectrum of the equilibrium fluctuations in terms of the imaginary part of the Fourier transform of the response function.

The fluctuation-dissipation theorem holds for a general system in thermal equilibrium and for any Heisenberg picture observable $z(t)$. Let us now apply the theorem to the coordinate $x(t)$ of a Brownian particle in a harmonic potential. Since the commutator $[x(\tau), x(0)]$ is a c-number we can immediately determine the response function with the help of the exact solution (3.470) of the Heisenberg equation of motion (3.465),

$$\chi(\tau) = \frac{i}{\hbar} \theta(\tau) [x(\tau), x(0)] = \frac{i}{\hbar} \theta(\tau) G_2(\tau) [\dot{x}(0), x(0)] = \theta(\tau) \frac{1}{m} G_2(\tau) \quad (3.491)$$

This relation can also be inferred directly from (3.470). Namely, adding the perturbation $-x F(t)$ to the total Hamiltonian of the system amounts to replacing $B(t)$ by $B(t) + F(t)$ in the equation of motion (3.465). This replacement yields the additional term $\int_0^t ds G_2(t-s) F(s)/m$ on the right-hand side of (3.470), which shows that the response function is in fact related to the fundamental solution $G_2(\tau)$ by eqn (3.491).

Expressing the Fourier transform of the response function in terms of its Laplace transform we therefore obtain

$$\tilde{\chi}(\omega) = \frac{1}{m} \int_0^{+\infty} d\tau e^{i\omega\tau} G_2(\tau) = \frac{1}{m} \hat{G}_2(-i\omega) = \frac{1}{m} \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\omega\hat{\gamma}(-i\omega)}. \quad (3.492)$$

The imaginary part of the Fourier transform of the response function is thus

$$\tilde{\chi}''(\omega) = \frac{1}{m} \frac{\omega \Re[\hat{\gamma}(-i\omega)]}{(\omega_0^2 - \omega^2 + \omega \Im[\hat{\gamma}(-i\omega)])^2 + \omega^2 (\Re[\hat{\gamma}(-i\omega)])^2}, \quad (3.493)$$

and the FDT (3.490) immediately leads to the following expression for the autocorrelation function of the coordinate of the Brownian particle,

$$S(\tau) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \hbar \coth(\hbar\omega/2k_B T) \tilde{\chi}''(\omega) \cos \omega\tau. \quad (3.494)$$

With the help of eqns (3.494) and (3.493) one can determine the exact equilibrium correlations in terms of the Laplace transform $\hat{\gamma}(z)$ of the damping kernel. For example, we have by definition of the autocorrelation function

$$\langle x^2 \rangle = S(0), \quad (3.495)$$

$$\langle px + xp \rangle = 2m\dot{S}(0) = 0, \quad (3.496)$$

$$\langle p^2 \rangle = -m^2 \ddot{S}(0), \quad (3.497)$$

and therefore

$$\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \hbar \coth(\hbar\omega/2k_B T) \tilde{\chi}''(\omega), \quad (3.498)$$

$$\langle p^2 \rangle = m^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \hbar \omega^2 \coth(\hbar\omega/2k_B T) \tilde{\chi}''(\omega). \quad (3.499)$$

As an example, let us consider the Ohmic spectral density (3.392) with a Lorentz-Drude cutoff. According to definition (3.454) this leads to the damping kernel

$$\gamma(\tau) = 2\gamma\Omega e^{-\Omega|\tau|} \quad (3.500)$$

with the Laplace transform

$$\hat{\gamma}(z) = \frac{2\gamma\Omega}{\Omega + z}. \quad (3.501)$$

Thus, we have

$$\Re[\hat{\gamma}(\varepsilon - i\omega)] = 2\gamma \frac{\Omega^2}{\Omega^2 + \omega^2} \longrightarrow 2\gamma \quad (3.502)$$

$$\Im[\hat{\gamma}(\varepsilon - i\omega)] = 2\gamma \frac{\omega}{\Omega} \frac{\Omega^2}{\Omega^2 + \omega^2} \longrightarrow 0 \quad (3.503)$$

where we have indicated the limits of an infinite cutoff, $\Omega \longrightarrow \infty$. The Laplace transform of the damping kernel becomes real for an infinite cutoff and the spectrum of the fluctuations takes the form

$$\tilde{S}(\omega) = \frac{2\hbar\gamma}{m} \frac{\omega}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + (2\gamma\omega)^2} \coth(\hbar\omega/2k_B T). \quad (3.504)$$

For frequencies such that $k_B T \gg \hbar\omega$ the Planck constant drops out and the spectrum becomes

$$\tilde{S}(\omega) = \frac{4\gamma k_B T}{m} \frac{1}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + (2\gamma\omega)^2}, \quad (3.505)$$

which exactly corresponds to the classical fluctuation spectrum of a damped harmonic oscillator in thermal equilibrium.

9.9.5 3.6.4 The influence functional

In the case of the Caldeira-Leggett model it is possible to eliminate the environmental variables exactly. This is due to the fact that the environment is supposed to be in a thermal state whose characteristic function is Gaussian, and because the reduced system couples linearly to the bath operators $B(t)$ whose commutator represents a c-number. In the present subsection we are going to construct an exact super-operator representation for the reduced density matrix and derive from it the corresponding path integral representation. The path integral involves a certain functional, known as the Feynman-Vernon influence functional, which represents exactly the influence of the heat bath on the reduced system.

3.6.4.1 The influence super-operator

To obtain an exact representation for the reduced density matrix, let us assume factorizing initial conditions and that the initial environmental state is a Gaussian (thermal) state. We emphasize that the assumption of an uncorrelated initial state is made here only for simplicity; it is possible to carry out the derivation also for correlated initial states (for a review, see Grabert, Schramm and Ingold, 1988).

An appropriate starting point of the derivation is the following exact representation of the reduced density matrix $\rho_S(t_f)$ at time t_f in terms of the total density $\rho(t_i)$ at some initial time t_i ,

$$\rho_S(t_f) = \text{tr}_B \{ U(t_f, t_i) \rho(t_i) U^\dagger(t_f, t_i) \}. \quad (3.506)$$

Again, we are working in the interaction picture such that $U(t_f, t_i)$ is the interaction picture time-evolution operator of the total system. To eliminate the bath variables from this expression one can employ the following method of derivation. The interaction picture time-evolution operator involves a time-ordering of the reduced system as well as of the bath variables. First, one eliminates the time-ordering of the bath variables, which is easily done, for the commutator of the bath variables is a c-number. One is then left with a simple average taken over the state of the bath. In a second step this average is determined with the help of a cumulant expansion, which terminates at second order since the bath state is Gaussian. This procedure yields the final result

$$\rho_S(t_f) = T_{\leftarrow} \exp \left(\frac{i}{\hbar} \Phi[x_c, x_a] \right) \rho_S(t_i). \quad (3.507)$$

The details of the calculations leading to this result will be given in Section 12.2 (see, in particular, eqn (12.99)) in a more general context and will thus be omitted here. In eqn (3.507) the symbol $T_{\leftarrow}$ indicates, as usual, the chronological time ordering in the interaction picture. The phase of the time-ordered exponential represents a super-operator which is given by

$$\begin{aligned} \frac{i}{\hbar} \Phi [x_c, x_a] &= \int_{t_i}^{t_f} dt \mathcal{L}_c(t) \\ &+ \int_{t_i}^{t_f} dt \int_{t_i}^t dt' \left\{ \frac{i}{2\hbar^2} D(t-t') x_c(t) x_a(t') - \frac{1}{2\hbar^2} D_1(t-t') x_c(t) x_c(t') \right\} \end{aligned} \quad (3.508)$$

The first term on the right-hand side stems from the counter-term H_c in the Hamiltonian of the total system and is defined in terms of the commutator super-operator

$$\mathcal{L}_c(t) \rho_S \equiv -\frac{i}{\hbar} [H_c(t), \rho_S] = -\frac{i}{\hbar} \frac{m}{2} \gamma(0) [x^2(t), \rho_S]. \quad (3.509)$$

The second term on the right-hand side of (3.508) involves the commutator and the anti-commutator super-operators

$$x_c(t) \rho_S \equiv [x(t), \rho_S], \quad x_a(t) \rho_S \equiv \{x(t), \rho_S\} \quad (3.510)$$

where all operators carrying a time argument are interaction picture operators with respect to the free Hamiltonian $H_0 = H_S + H_B$.

The phase $\Phi [x_c, x_a]$ subsumes completely the influence of the environment on the reduced system's dynamics and may thus be called the influence phase functional. Formally, $\Phi [x_c, x_a]$ is both a super-operator acting on the initial state $\rho_S(t_i)$ and a bilinear functional which involves the dissipation kernel $D(t-t')$ and the noise kernel $D_1(t-t')$. We note that the second-order generator (3.390) may be obtained from eqn (3.507) by expanding the exponential to first order in the influence phase and by taking into account that the time integrals in expression (3.508) for the influence phase are already time-ordered.

3.6.4.2 Path integral representation

Equation (3.507) gives rise to an equivalent path integral representation for the reduced density matrix. It thus provides an operator formulation of the famous Feynman-Vernon influence functional. To construct the path integral representation we turn back to the Schrödinger picture and introduce the so-called propagator function J through the relation

$$\rho_S(x_f, x'_f, t_f) = \int dx_i \int dx'_i J(x_f, x'_f, t_f; x_i, x'_i, t_i) \rho_S(x_i, x'_i, t_i). \quad (3.511)$$

Thus, the propagator function is simply the Green function for the reduced density matrix in the position representation. In terms of the influence superoperator in eqn (3.507) it is given through the relation,

$$J(x_f, x'_f, t_f; x_i, x'_i, t_i) = \langle x_f t_f | \left(T_{\leftarrow} \exp \left(\frac{i}{\hbar} \Phi [x_c, x_a] \right) | x_i t_i \rangle \langle x'_i t_i | \right) | x'_f t_f \rangle \quad (3.512)$$

where $|xt\rangle$ is the eigenstate of the interaction picture operator $x(t)$ belonging to the eigenvalue x , that is

$$|xt\rangle = \exp(+iH_S(t-t_i)/\hbar) |x\rangle$$

We note that (3.512) leads to the following initial and normalization conditions.

$$\begin{aligned} \lim_{t_f \rightarrow t_i} J(x_f, x'_f, t_f; x_i, x'_i, t_i) &= \langle x_f | x_i \rangle \langle x'_i | x'_f \rangle \\ &= \delta(x_f - x_i) \delta(x'_f - x'_i) \end{aligned} \quad (3.514)$$

$$\int dx_f J(x_f, x_f, t_f; x_i, x'_i, t_i) = \langle x'_i | x_i \rangle = \delta(x_i - x'_i) \quad (3.515)$$

We also observe that for vanishing system-environment coupling ($\Phi = 0$) the propagator function reduces to a product of the Green function G_S for the Schrödinger equation with Hamiltonian H_S ,

$$\begin{aligned} J(x_f, x'_f, t_f; x_i, x'_i, t_i) &= \langle x_f t_f | x_i t_i \rangle \langle x'_i t_i | x'_f t_f \rangle \\ &= G_S(x_f, t_f; x_i, t_i) G_S^*(x'_f, t_f; x'_i, t_i) \end{aligned}$$

The path integral representation of the influence functional is obtained by writing G_S as a path integral:

$$G_S(x_f, t_f; x_i, t_i) = \langle x_f | \exp(-iH_S(t_f - t_i)/\hbar) | x_i \rangle = \int Dx \exp\left(\frac{i}{\hbar} S_0[x]\right) \quad (3.517)$$

where

$$S_0[x] = \int_{t_i}^{t_f} dt \left(\frac{1}{2} m \dot{x}^2 - V(x) \right)$$

is the classical action functional of the free Brownian particle. Here, the path integral is an integral over all paths $x(t)$ subjected to the boundary condition: $x(t_i) = x_i$, and $x(t_f) = x_f$.

Now, if $T_{\leftarrow} \mathcal{O}[x(t)]$ is any time-ordered product, the corresponding matrix element can be obtained from the path integral as follows

$$\langle x_f t_f | T_{\leftarrow} \mathcal{O}[x(t)] | x_i t_i \rangle = \int Dx \exp\left(\frac{i}{\hbar} S_0[x]\right) \mathcal{O}[x(t)]$$

In other words, the path integral performs the time ordering automatically if the time-ordered operator product is replaced by the corresponding classical expression under the path integral. In a similar way the matrix elements of the commutator or the anticommutator super-operators $x_{c,a}(t)$ are given as double path integrals as follows,

$$\begin{aligned} &\langle x_f t_f | x_{a,c}(t) (|x_i t_i\rangle \langle x'_i t_i|) | x'_f t_f \rangle \\ &= \langle x_f t_f | x(t) | x_i t_i \rangle \langle x'_i t_i | x'_f t_f \rangle \pm \langle x_f t_f | x_i t_i \rangle \langle x'_i t_i | x(t) | x'_f t_f \rangle \\ &= \int Dx \int Dx' \exp\left(\frac{i}{\hbar} (S_0[x] - S_0[x'])\right) (x(t) \pm x'(t)) \end{aligned} \quad (3.520)$$

Thus we see that the transition from the super-operator representation to the path integral representation may be achieved by performing the replacements

$$x_a(t) \longrightarrow x(t) + x'(t), \quad x_c(t) \longrightarrow x(t) - x'(t) \quad (3.521)$$

A moment's thought shows that this prescription is also valid in the general case of an arbitrary time-ordered product of the super-operators $x_{c,a}(t)$. We are therefore led to the expression

$$J(x_f, x'_f, t_f; x_i, x'_i, t_i) = \int Dx \int Dx' \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathcal{A}[x, x']\right) \quad (3.522)$$

This is the double path integral representation for the propagator function which is well known from the Feynman-Vernon influence functional technique (Feynman and Vernon, 1963). It involves an integration over all paths $x(t)$ and $x'(t)$ satisfying the boundary conditions

$$x(t_i) = x_i, \quad x(t_f) = x_f, \quad x'(t_i) = x'_i, \quad x'(t_f) = x'_f \quad (3.523)$$

The weight factor of the paths is given by the effective action functional

$$\mathcal{A}[x, x'] = S_0[x] - S_0[x'] + \Phi[x, x'] \quad (3.524)$$

where the path integral representation of the influence phase functional $\Phi[x, x']$ is obtained from (3.508) with the help of the replacements (3.521),

$$\begin{aligned} \Phi[x, x'] = & - \int_{t_i}^{t_f} dt \frac{m}{2} \gamma(0) [x^2(t) - x'^2(t)] \\ & + \int_{t_i}^{t_f} dt \int_{t_i}^t dt' \frac{1}{2\hbar} D(t-t') [x(t) - x'(t)] [x(t') + x'(t')] \\ & + \int_{t_i}^{t_f} dt \int_{t_i}^t dt' \frac{i}{2\hbar} D_1(t-t') [x(t) - x'(t)] [x(t') - x'(t')] \end{aligned} \quad (3.525)$$

For the further discussion it is convenient to introduce new variables through

$$q = x - x', \quad r = \frac{1}{2}(x + x') \quad (3.526)$$

and to consider the propagator function J as a function of $(r_f, q_f, t_f; r_i, q_i, t_i)$. The corresponding path integral representation reads

$$J(r_f, q_f, t_f; r_i, q_i, t_i) = \int Dr \int Dq \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathcal{A}[r, q]\right) \quad (3.527)$$

which is a double path integral over all paths $r(t), q(t)$ satisfying the boundary conditions

$$r(t_i) = r_i, \quad r(t_f) = r_f, \quad q(t_i) = q_i, \quad q(t_f) = q_f \quad (3.528)$$

The initial and normalization conditions for the propagator function read as follows,

$$\begin{aligned} \lim_{t_f \rightarrow t_i} J(r_f, q_f, t_f; r_i, q_i, t_i) &= \delta(r_f - r_i) \delta(q_f - q_i), \\ \int dr_f J(r_f, q_f = 0, t_f; r_i, q_i, t_i) &= \delta(q_i). \end{aligned}$$

The effective action functional (3.524) is now given in the new variables by

$$\begin{aligned} \mathcal{A}[r, q] = & \int_{t_i}^{t_f} dt (m\dot{r}\dot{q} - V(r + q/2) + V(r - q/2) - m\gamma(0)r q) \\ & + \int_{t_i}^{t_f} dt \int_{t_i}^t dt' \left\{ \frac{1}{\hbar} D(t-t') q(t)r(t') + \frac{i}{2\hbar} D_1(t-t') q(t)q(t') \right\}. \end{aligned}$$

3.6.4.3 Classical equation of motion

The action functional (3.531) leads to, classical equations of motion which are found by setting the first variation of $-t$ equal to zero. The variation with respect to $q(t)$ gives the equation of motion for $r(t)$,

$$\begin{aligned} \ddot{r}(t) + \frac{1}{2m} \frac{\partial}{\partial r} (V(r + q/2) + V(r - q/2)) + \frac{d}{dt} \int_{t_i}^t dt' \gamma(t - t') r(t') \\ = \frac{i}{2m\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt' D_1(t - t') q(t') \end{aligned}$$

whereas the variation of $r(t)$ leads to the equation for $q(t)$,

$$\ddot{q}(t) + \frac{2}{m} \frac{\partial}{\partial q} (V(r + q/2) + V(r - q/2)) - \frac{d}{dt} \int_t^{t_f} dt' \gamma(t' - t) q(t') = 0 \quad (3.533)$$

Here we have expressed the equations of motion through the damping kernel $\gamma(t - t')$ (eqn (3.454)) and the noise kernel $D_1(t - t')$. We note that for $q = 0$ the dynamical equation for the path $r(t)$ takes on the form of the homogeneous part of the Heisenberg equation of motion (3.458).

3.6.4.4 Determining the path integral for harmonic potentials

To illustrate the path integral technique we consider a harmonic potential

$$V(x) = \frac{1}{2} m \omega_0^2 x^2 \quad (3.534)$$

which leads to the classical equations of motion

$$\ddot{r}(t) + \omega_0^2 r(t) + \frac{d}{dt} \int_{t_i}^t dt' \gamma(t - t') r(t') = \frac{i}{2m\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt' D_1(t - t') q(t') \quad (3.535)$$

and

$$\ddot{q}(t) + \omega_0^2 q(t) - \frac{d}{dt} \int_t^{t_f} dt' \gamma(t' - t) q(t') = 0 \quad (3.536)$$

Note that eqn (3.536) represents the backward equation of the homogeneous part of eqn (3.535), that is, if $r(t)$ solves the homogeneous part of eqn (3.535), then $q(t) \equiv r(t_f + t_i - t)$ is a solution of eqn (3.536).

Since the action functional is quadratic the double path integral (3.527) can be determined exactly by evaluating the action along the classical solution and by taking into account the Gaussian fluctuations around the classical paths. Let $r(t), q(t)$ be a solution of the classical equations of motion (3.535) and (3.536) satisfying the boundary conditions (3.528). The value of the action functional (3.531) along this solution can be written as

$$\begin{aligned}
\mathcal{A}[r, q] &= m(\dot{r}_f q_f - \dot{r}_i q_i) \\
&\quad - \int_{t_i}^{t_f} dt m q(t) \left(\ddot{r}(t) + \omega_0^2 r(t) + \frac{d}{dt} \int_{t_i}^t dt' \gamma(t-t') r(t') \right) \\
&\quad + \frac{i}{4\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt \int_{t_i}^{t_f} dt' D_1(t-t') q(t) q(t') \\
&= m(\dot{r}_f q_f - \dot{r}_i q_i) - \frac{i}{4\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt \int_{t_i}^{t_f} dt' D_1(t-t') q(t) q(t')
\end{aligned} \tag{3.537}$$

where the equation of motion (3.535) has been used in the second step.

Due to the inhomogeneous term in eqn (3.535) $r(t)$ couples to $q(t)$ through the noise kernel $D_1(t-t')$. As a result the solution $r(t)$ is, in general, complex. We decompose $r(t)$ into real and imaginary parts,

$$r(t) = r^{(1)}(t) + i r^{(2)}(t) \tag{3.538}$$

The real part $r^{(1)}(t)$ solves the homogeneous part of eqn (3.535), while the imaginary part $r^{(2)}(t)$ is a solution of the inhomogeneous equation

$$\ddot{r}^{(2)}(t) + \omega_0^2 r^{(2)}(t) + \frac{d}{dt} \int_{t_i}^t dt' \gamma(t-t') r^{(2)}(t') = \frac{1}{2m\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt' D_1(t-t') q(t'). \tag{3.539}$$

We now show the following useful property: In order to find the classical action it suffices to determine the real solution $r^{(1)}(t)$ and to insert it into the action functional, which means that we have the relation

$$\begin{aligned}
\mathcal{A}[r, q] &= \mathcal{A}[r^{(1)}, q] \\
&= m(\dot{r}_f^{(1)} q_f - \dot{r}_i^{(1)} q_i) + \frac{i}{4\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt \int_{t_i}^{t_f} dt' D_1(t-t') q(t) q(t').
\end{aligned} \tag{3.540}$$

To prove this statement one first uses the equations of motion for the imaginary part $r^{(2)}(t)$ and for $q(t)$ to show that

$$\frac{i}{2\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt \int_{t_i}^{t_f} dt' D_1(t-t') q(t) q(t') = i m (\dot{r}_f^{(2)} q_f - \dot{r}_i^{(2)} q_i) \tag{3.541}$$

To obtain this equation one performs two integrations by part and uses the condition that $r_i^{(2)} = r_f^{(2)} = 0$, since the boundary conditions for the paths are real. Combining the last equation with (3.537) immediately leads to eqn (3.540): which proves the statement.

The procedure to determine the propagator function can thus be summarized as follows. One first solves the homogeneous classical equations of motion,

$$\begin{aligned}
\ddot{r}(t) + \omega_0^2 r(t) + \frac{d}{dt} \int_{t_i}^t dt' \gamma(t-t') r(t') &= 0 \\
\ddot{q}(t) + \omega_0^2 q(t) - \frac{d}{dt} \int_t^{t_f} dt' \gamma(t'-t) q(t') &= 0
\end{aligned} \tag{3.542}$$

under the boundary conditions (3.528). Substituting these solutions into the action functional then yields the propagator function

$$\begin{aligned}
J(r_f, q_f, t_f; r_i, q_i, t_i) &= N(t_f, t_i) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathcal{A}[r, q]\right) \\
&= N(t_f, t_i) \exp\left(\frac{im}{\hbar} (\dot{r}_f q_f - \dot{r}_i q_i) + \Gamma(q_f, t_f; q_i, t_i)\right)
\end{aligned} \tag{3.544}$$

where

$$\Gamma(q_f, t_f; q_i, t_i) = -\frac{1}{4\hbar^2} \int_{t_i}^{t_f} dt \int_{t_i}^{t_f} dt' D_1(t-t') q(t) q(t') \tag{3.545}$$

In eqn (3.544) $N(t_f, t_i)$ is a time-dependent normalization factor. Let us set $t_i = 0$ for simplicity in the following. With the help of the fundamental solutions $G_1(t)$ and $G_2(t)$ (see eqns (3.466) and (3.467)) we can write the solutions of (3.542) and (3.543) as

$$r(t) = \left[G_1(t) - \frac{G_1(t_f)}{G_2(t_f)} G_2(t) \right] r_i + \frac{G_2(t)}{G_2(t_f)} r_f \tag{3.546}$$

$$q(t) = \frac{G_2(t_f - t)}{G_2(t_f)} q_i + \left[G_1(t_f - t) - \frac{G_1(t_f)}{G_2(t_f)} G_2(t_f - t) \right] q_f \tag{3.547}$$

Invoking the normalization condition (3.530) the normalization factor is found to be

$$N(t_f, 0) = \frac{m}{2\pi\hbar G_2(t_f)} \tag{3.548}$$

With the above expressions the problem of determining the exact propagator function is solved completely. Obviously, the propagator function is a Gaussian function whose exponent is a quadratic form in the coordinates (r_f, q_f, r_i, q_i) , which is determined by substituting (3.546) and (3.547) into (3.544). We also note that the normalization factor is directly related to the response function through $N(t_f, 0) = 1/2\pi\hbar\chi(t_f)$.

3.6.4.5 Solution of the Caldeira-Leggett master equation

To give an example we consider free Brownian motion ($\omega_0 = 0$) for an Ohmic environment. In the limit of an infinite cutoff we have the simple expressions $G_1(t) \equiv 1$ and $G_2(t) = [1 - \exp(-2\gamma t)]/2\gamma$ which yields

$$\dot{r}_i = \frac{1}{G_2(t_f)} (r_f - r_i), \quad \dot{r}_f = \frac{\dot{G}_2(t_f)}{G_2(t_f)} (r_f - r_i) \tag{3.549}$$

showing the translational invariance of the propagator function. Thus we have

$$\begin{aligned}
J(r_f, q_f, t_f; r_i, q_i, t_i) \\
= \frac{m}{2\pi\hbar G_2(t_f)} \exp\left(\frac{im}{\hbar G_2(t_f)} (r_f - r_i) [\dot{G}_2(t_f) q_f - q_i] + \Gamma(q_f, t_f; q_i, 0)\right)
\end{aligned} \tag{3.550}$$

This expression for the propagator function can be used to obtain the general solution of the Caldeira-Leggett master equation (3.410). To this end, we just have to evaluate the function $\Gamma(q_f, t_f; q_i, 0)$ in the high-temperature limit which is provided by the expression

$$\Gamma(q_f, t_f; q_i, 0) \approx -\frac{2m\gamma k_B T}{\hbar^2} \int_0^{t_f} dt q^2(t) \quad (3.551)$$

Substituting the solution $q(t)$ (eqn (3.547)) and evaluating the time integral finally yields

$$\begin{aligned} J(r_f, q_f, t_f; r_i, q_i, 0) & \quad (3.552) \\ &= \frac{2m\gamma}{2\pi\hbar(1 - e^{-2\gamma t_f})} \\ & \times \exp\left(\frac{2im\gamma/\hbar}{1 - e^{-2\gamma t_f}}(r_f - r_i)(e^{-2\gamma t_f}q_f - q_i)\right. \\ & - \frac{2mk_B T}{\hbar^2} \left\{ \frac{\gamma t_f - (1 - e^{-2\gamma t_f}) + \frac{1}{4}(1 - e^{-4\gamma t_f})}{(1 - e^{-2\gamma t_f})^2} (q_f - q_i)^2 \right. \\ & \left. \left. - \frac{\gamma t_f - \frac{1}{2}(1 - e^{-2\gamma t_f})}{1 - e^{-2\gamma t_f}} 2q_f(q_f - q_i) + \gamma t_f q_f^2 \right\} \right) \end{aligned}$$

This is an explicit expression for the propagator function of the Caldeira-Leggett master equation for free Brownian motion. With the help of the relations

$$\gamma t_f - \frac{1}{2}(1 - e^{-2\gamma t_f}) = (\gamma t_f)^2 + \mathcal{O}((\gamma t_f)^3) \quad (3.553)$$

$$\gamma t_f - (1 - e^{-2\gamma t_f}) + \frac{1}{4}(1 - e^{-4\gamma t_f}) = \frac{4}{3}(\gamma t_f)^3 + \mathcal{O}((\gamma t_f)^4), \quad (3.554)$$

one easily shows that in the limit $\gamma t_f \rightarrow 0$ the propagator function approaches

$$J(r_f, q_f, t_f; r_i, q_i, 0) \rightarrow \frac{m}{2\pi\hbar t_f} \exp\left(\frac{im}{\hbar t_f}(r_f - r_i)(q_f - q_i)\right) \quad (3.555)$$

which is recognized as the Green function corresponding to the von Neumann equation for a free Schrödinger particle.

Let us finally consider the so-called recoilless limit of the master equation. This is the limit of a heavy particle which is studied over times which are short in comparison to the relaxation time. It corresponds to the Caldeira-Leggett master equation (3.410) without the friction term $-i\gamma[x, \{p, \rho_S\}]/\hbar$. Thus we set $\Lambda = 2m\gamma k_B T/\hbar^2$ and perform the limit $\gamma t_f \rightarrow 0$, keeping Λ fixed. Making use of eqns (3.553), (3.554) the propagator function is found to be

$$\begin{aligned} J(x_f, x'_f, t_f; x_i, x'_i, 0) &= \frac{m}{2\pi\hbar t_f} \exp\left(\frac{im}{2\hbar t_f} \left\{ (x_f - x_i)^2 - (x'_f - x'_i)^2 \right\} \right. \\ & \quad \left. - \frac{\Lambda t_f}{3} \left\{ (x_f - x'_f)^2 + (x_i - x'_i)^2 + (x_f - x'_f)(x_i - x'_i) \right\} \right). \end{aligned} \quad (3.556)$$

where we have again used the original coordinates.

9.9.6 Caldeira-Leggett Model: Explanation 2

(?!! write about it to the first part!)

Взаимодействие частицы со средой ведет к перенормировке потенциальной энергии частицы $U_0(q) \rightarrow U(q)$, к возникновению силы трения и к появлению случайной силы $f(t)$.

описание модели

Частица массой M находится в потенциале $U_0(q)$ и взаимодействует с внешней средой - термостатом, который представляет собой бесконечный набор $\{\alpha\}$ фононов, т.е. осцилляторов с частотами ω_α .

Гамильтониан среды - энергия осцилляторов:

$$H_{\text{вз}} = \sum_{\alpha} \left(\frac{m\dot{x}_{\alpha}^2}{2} + \frac{m\omega_{\alpha}^2 x_{\alpha}^2}{2} \right)$$

Потенциал взаимодействия частицы со средой, вообще говоря, нелинейный и равен

$$U_{\text{вз}} = \sum_{\alpha} \gamma(q) C_{\alpha} x_{\alpha}$$

где C_{α} - константа взаимодействия.

Спектральная плотность колебаний в среде определена как

$$J(\Omega) = \frac{\pi}{2} \sum_{\alpha} \frac{C_{\alpha}^2}{m\omega_{\alpha}} \delta(\Omega - \omega_{\alpha})$$

поиск уравнения движения с помощью исключения переменных

Предполагая $J(\Omega) = \eta\Omega(\eta > 0)$, исключить переменные среды x_{α} и найти эффективное уравнение движения частицы в среде.

Пишем действие $S = S[q(t), x_{\alpha}(t)]$ для системы "частица и среда":

$$S = \int \left[\frac{M\dot{q}^2}{2} - U_0(q) + \sum_{\alpha} \left(\frac{m\dot{x}_{\alpha}^2}{2} - \frac{m\omega_{\alpha}^2 x_{\alpha}^2}{2} \right) - \gamma(q) \sum_{\alpha} C_{\alpha} x_{\alpha} \right] dt$$

(тут судя по всему мы пишем уравнения Эйлера-Лагранжа, их решаем и получаем уравнения)

Уравнения движения для частицы и фононов имеют вид

$$\begin{aligned} M\ddot{q} + U'_0(q) &= -\gamma'(q) \sum_{\alpha} C_{\alpha} x_{\alpha} \\ m\ddot{x}_{\alpha} + m\omega_{\alpha}^2 x_{\alpha} &= -\gamma(q) C_{\alpha} \end{aligned}$$

Решение линейного уравнения на $x_{\alpha}(t)$ представим в виде суммы вынужденных и свободных колебаний

$$\begin{aligned} x_{\alpha}(t) &= -C_{\alpha} \int_{-\infty}^t \frac{\sin \omega_{\alpha}(t-s)}{m\omega_{\alpha}} \gamma(q_s) ds + x_{\alpha}(0) \cos \omega_{\alpha} t + \frac{\dot{x}_{\alpha}(0)}{\omega_{\alpha}} \sin \omega_{\alpha} t = \\ &= C_{\alpha} \int_{-\infty}^{\infty} K_{\alpha}^R(t-s) \gamma(q_s) ds + x_{\alpha}^{(\text{cs})}(t) \end{aligned}$$

Здесь мы распространили интегрирование по всему возможному интервалу времени и ввели функцию запаздывающего отклика $K_{\alpha}^R(t)$:

$$K_{\alpha}^R(t) = -\vartheta(t) \frac{\sin \omega_{\alpha} t}{m\omega_{\alpha}}$$

функция запаздывающего отклика

Решение модели Клайды-Леггета напрямую зависит от функции запаздывающего отклика, так что проанализируем ее.

Определим для $K_\alpha^R(t)$ фурье-компоненту

$$K_\alpha^R(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} K_\alpha^R(t) e^{i\omega t} dt = -\frac{1}{m [\omega_\alpha^2 - (\omega + i\delta)^2]},$$

имеющую полюса $\omega = \pm\omega_\alpha - i\delta$ только в нижней полуплоскости комплексной переменной ω .

Величины $x_\alpha(0)$ и $\dot{x}_\alpha(0)$ можно трактовать как положение и скорость фонона, которые он имел бы в отсутствие его взаимодействия с частицей в один и тот же момент времени, например, при $t = 0$.

Суммарная сила $F(t)$, действующая на частицу, определяется соотношением

$$F(t) = \gamma'(q) \int_{-\infty}^{\infty} K^R(t-s) \gamma(q_s) ds + f(t)$$

где $f(t) = -\gamma(q) \sum_{\alpha} C_{\alpha} \left(x_{\alpha}(0) \cos \omega_{\alpha} t + \frac{\dot{x}_{\alpha}(0)}{\omega_{\alpha}} \sin \omega_{\alpha} t \right)$.

Суммарная функция отклика $K^R(t)$ здесь равна

$$K^R(t) = -\sum_{\alpha} C_{\alpha}^2 K_{\alpha}^R(t) = \vartheta(t) \sum_{\alpha} C_{\alpha}^2 \frac{\sin \omega_{\alpha} t}{m \omega_{\alpha}}$$

Ее фурье-компонента легко находится и может быть выражена через спектральную плотность $J(\Omega)$

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

уравнение движения

Окончательно, мы получим следующее уравнение движения частицы:

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

Функцию отклика K^R можно разбить на две части,

$$K^R(\omega) = K_0 + K_1^R(\omega),$$

одна из которых, K_0 , частотно-независимая

$$K_0 = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{J(\Omega)}{\Omega} d\Omega = \sum_{\alpha} \frac{C_{\alpha}^2}{m \omega_{\alpha}}$$

а другая ее часть K_1^R зависит от частоты

$$K_1^R(\omega) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{J(\Omega)}{\Omega} \frac{\omega^2}{\Omega^2 - (\omega + i\delta)^2} d\Omega$$

Для $J(\Omega) = \eta\Omega$ имеем $K_1^R(\omega) = i\omega\eta$ и $K^R(\omega) = K_0 + i\omega\eta$.

Выполняя обратное фурье-преобразование, находим временное представление для функции отклика

$$K^R(t) = K_0\delta(t) - \eta\delta'(t)$$

Подставим далее $K^R(t)$ в уравнение движения для частицы и вычислим интегралы

$$\begin{aligned} M\ddot{q} + U'_0(q) &= K_0\gamma'(q_t) \int_{-\infty}^{\infty} \delta(t-s)\gamma(q_s) ds - \\ &- \eta\gamma'(q_t) \int_{-\infty}^{\infty} \delta'(t-s)\gamma(q_s) ds + f(t) = K_0\gamma'(q)\gamma(q) - \eta\gamma'^2(q)\dot{q}(t) + f(t) \end{aligned}$$

Это уравнение мы запишем в форме уравнения Ланжевена с нелинейным коэффициентом трения $\mu(q)$ и силой трения, пропорциональной скорости частицы $\dot{q}$

$$M\ddot{q} + \mu(q)\dot{q} + U'(q) = f(t)$$

где $U(q) = U_0(q) - \frac{1}{2}K_0\gamma^2(q)$ и $\mu(q) = \eta\left(\frac{\partial\gamma(q)}{\partial q}\right)^2$.

Случайная сила и её коррелятор

Теперь перейдем к рассмотрению свойств случайной силы.

Поскольку в состоянии термодинамического равновесия средняя координата гармонического осциллятора (отсчитанная от его центра) и его средняя скорость равны нулю, то есть $\langle x_\alpha \rangle = 0$ и $\langle \dot{x}_\alpha \rangle = 0$, то среднее значение случайной силы будет также равно нулю: $\langle f(t) \rangle = 0$.

Интерес представляет только корреляционная функция случайной силы.

Временная корреляционная функция случайной силы определяется двойной суммой

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

Так как осцилляторы или фононы независимы друг от друга, то среднее от произведения двух величин от разных осцилляторов равно произведению средних, то есть например $\langle x_\alpha(0)x_\beta(0) \rangle = 0$ при $\alpha \neq \beta$, и тогда

$$\begin{aligned} \langle f(t)f(t') \rangle &= \sum_{\alpha} C_\alpha^2 \left[\langle x_\alpha(0)x_\alpha(0) \rangle \cos \omega_\alpha t \cos \omega_\alpha t' + \frac{\langle \dot{x}_\alpha(0)\dot{x}_\alpha(0) \rangle}{\omega_\alpha^2} \sin \omega_\alpha t \sin \omega_\alpha t' + \right. \\ &\quad \left. + \frac{\langle x_\alpha(0)\dot{x}_\alpha(0) \rangle}{\omega_\alpha} \sin \omega_\alpha (t+t') \right] \end{aligned}$$

Теперь заметим, что $\langle x_\alpha(0)\dot{x}_\alpha(0) \rangle = 0$ (как среднее от полной производной по времени), а средний квадрат скорости выражается через средний квадрат координаты: $\langle \dot{x}_\alpha^2(0) \rangle = \omega_\alpha^2 \langle x_\alpha^2(0) \rangle$.

случай гармонического осциллятора

Строже, для гармонического осциллятора

$$\hat{H}_\alpha = \frac{\hat{p}_\alpha^2}{2m} + \frac{m\omega_\alpha^2 \hat{x}_\alpha^2}{2},$$

$$\hat{x}_\alpha = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_\alpha}} (\hat{a}^+ + \hat{a}), \quad \hat{p}_\alpha = i\sqrt{\frac{\hbar m\omega_\alpha}{2}} (\hat{a}^+ - \hat{a}),$$

$$\frac{1}{2} \langle \hat{x}_\alpha \hat{p}_\alpha + \hat{p}_\alpha \hat{x}_\alpha \rangle = i\frac{\hbar}{2} \langle 2\hat{a}^+ \hat{a}^+ - 2\hat{a} \hat{a} \rangle = 0,$$

а также

$$\langle x_\alpha^2(0) \rangle \equiv \langle \hat{x}_\alpha^2 \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega_\alpha} \langle \hat{a}^+ \hat{a} + \hat{a} \hat{a}^+ \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega_\alpha} \left(\frac{\hbar}{e^{\hbar\omega_\alpha/T} - 1} + 1 \right) = \frac{\hbar}{2m\omega_\alpha} \operatorname{cth} \frac{\hbar\omega_\alpha}{2T}.$$

Учитывая это, выражение для спектральной плотности $J(\Omega) = \frac{\pi}{2} \sum_\alpha \frac{C_\alpha^2}{m\omega_\alpha} \delta(\Omega - \omega_\alpha)$ и $J(\Omega) = \eta\Omega$, получим вид временного коррелятора силы:

$$\begin{aligned} \langle f(t)f(t') \rangle &= \sum_\alpha C_\alpha^2 \frac{\hbar}{2m\omega_\alpha} \operatorname{cth} \frac{\hbar\omega_\alpha}{2T} \cos \omega_\alpha(t - t') = \\ &= \frac{\hbar}{\pi} \int_0^{+\infty} J(\Omega) \operatorname{cth} \frac{\hbar\Omega}{2T} \cos \Omega(t - t') d\Omega = \\ &= \frac{\eta}{2\pi} \int_0^{+\infty} \hbar\Omega \operatorname{cth} \frac{\hbar\Omega}{2T} (e^{i\Omega(t-t')} + e^{-i\Omega(t-t')}) d\Omega \equiv \eta \int_{-\infty}^{+\infty} \hbar\Omega \operatorname{cth} \frac{\hbar\Omega}{2T} e^{-i\Omega(t-t')} \frac{d\Omega}{2\pi} \end{aligned}$$

Отсюда можно легко найти фурье-компоненту временного коррелятора силы (его спектральную плотность):

$$\begin{aligned} \langle f(t)f(t') \rangle_\Omega &= \int_{-\infty}^{+\infty} \langle f(t)f(t') \rangle e^{i\Omega(t-t')} dt = \\ &= \eta \hbar\Omega \operatorname{cth} \frac{\hbar\Omega}{2T} = \\ &= \begin{cases} 2\eta T, & \text{классический предел, } \hbar = 0, \\ \eta \hbar |\Omega|, & \text{квантовый предел, } T = 0 \end{cases} \end{aligned}$$

Во временном представлении коррелятор силы $\langle f(t)f(t') \rangle$ в двух предельных случаях равен

$$\langle f(t)f(t') \rangle = \begin{cases} 2\eta T \delta(t - t'), & \text{классический предел, } \hbar = 0, \\ -\frac{\eta \hbar}{\pi(t-t')^2}, & \text{квантовый предел, } T = 0. \end{cases}$$

здесь в квантовом случае использовано равенство $\int_0^{+\infty} x \cos x dx = \lim_{\delta \rightarrow +0} \operatorname{Re} \int_0^{+\infty} x e^{(i-\delta)x} dx = -1$.

Случайная сила оказывается некоррелированной в классическом пределе и коррелированной в квантовом пределе.

соответствие флуктуационно-диссипативной теореме

Отметим, что полученный результат полностью соответствует флуктуационнодиссипативной теореме (ФДТ) в виде

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

где $\alpha(\omega)$ - динамический отклик частицы на внешнюю силу.

Полученное нами уравнение движения частицы имеет вид

$$M\ddot{q} + \eta\dot{q} + U'(q) = f(t),$$

так что если $q(\omega) = \alpha(\omega)f(\omega)$, то очевидно, что $\alpha(\omega) = (-M\omega^2 + M\omega_0^2 - i\eta\omega)^{-1}$

если мы для конкретности, без ограничения общности предположим, что внешний вещественный потенциал $U'(q)$ - также гармонический с собственной частотой ω_0 .

Тогда ясно, что

$$\text{Im}\{\alpha(\omega)\}^{-1} = -\eta\omega,$$

и

$$\langle f(t)f(t') \rangle_\omega = \eta\omega\hbar \text{cth} \frac{\hbar\omega}{2T},$$

в полном соответствии с нашими результатами.

связь коэффициента трения и вершины взаимодействия

Коэффициент трения $\mu(q)$ и вершина взаимодействия $\gamma(q)$ однозначно связаны друг с другом.

выше уже сделано

перенормировка потенциала

Также определить перенормировку потенциала $U_0(q)$ и коэффициент трения $\mu(q)$.

выше уже сделано

9.10 3.7 Non-linear quantum master equations

In classical statistical mechanics the dynamics of a many-particle system may often be approximated in terms of a non-linear kinetic equation for the timedependent distribution function $f(\vec{p}, \vec{x}, t)$ on one-particle phase space (Reichl, 1998). The most prominent example for such a kinetic equation is the Boltzmann equation. For the corresponding approximation of a quantum mechanical many-body system one has to replace the classical distribution $f(\vec{p}, \vec{x}, t)$ by the one-particle density matrix $\rho(t)$. The latter is then expected to satisfy a nonlinear master equation which provides a mean-field type description of the dynamics of the many-body system. Within this framework it is also possible to consider many-body systems interacting with external reservoirs. The coupling to an external reservoir may be performed either on the level of the mean-field approximation or else on the level of the many-particle system. A number of examples for the resulting non-linear master equations, such as the quantum Boltzmann equation, the time-dependent Hartree equation, and the non-linear Schrödinger equation, will be discussed below (Alicki and Messer, 1983).

The general structure of a non-linear quantum master equation may be postulated to be of the following form,

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = \mathcal{L}[\rho(t)]\rho(t), \quad \rho(0) = \rho_0 \quad (3.557)$$

Here, $\mathcal{L}[\sigma]$ is a super-operator which is in Lindblad form for each fixed density matrix σ . Thus, eqn (3.557) is a Lindblad-type quantum master equation whose generator depends parametrically on the density matrix. Under certain conditions eqn (3.557) has a unique solution

$$\rho(t) = V_t(\rho_0), \quad t \geq 0, \quad (3.558)$$

where $\{V_t|t \geq 0\}$ is a one-parameter family of non-linear maps satisfying the semigroup property

$$V_t(V_s(\rho)) = V_{t+s}(\rho), \quad V_0 = I \quad (3.559)$$

Equation (3.557) is therefore said to be in parametric Lindblad form.

9.10.1 3.7.1 Quantum Boltzmann equation

The discrete quantum Boltzmann equation is an example of a non-linear quantum master equation of the form (3.557). In a phenomenological way this equation can be obtained by exploiting the formal analogy to the classical Boltzmann equation for the one-particle density $f(\vec{p}, \vec{x}, t)$,

$$\frac{\partial}{\partial t} f(\vec{p}, \vec{x}, t) = -\{h, f(\vec{p}, \vec{x}, t)\} + C[f](\vec{p}, \vec{x}, t). \quad (3.560)$$

Here, $h = \vec{p}^2/2m$ is the one-particle Hamiltonian of a particle with momentum $\vec{p}$ and mass m , the curly brackets denote the Poisson bracket and $C[f]$ is the

Boltzmann collision operator, which is a bilinear functional of the one-particle density f .

To be specific we consider a system of N identical particles. The internal degrees of freedom of the particles are described by a one-particle Hamiltonian h with a discrete spectrum. The particles interact through collisions during which they may exchange internal energy, whereby the total energy is conserved. An appropriate master equation analogous to the classical Boltzmann equation (3.560) is given by

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = -i[h, \rho(t)] + \mathcal{D}(\rho(t)) \quad (3.561)$$

which may be called the quantum Boltzmann equation. The dissipator $\mathcal{D}(\rho)$ which replaces the collision operator of the classical Boltzmann equation is postulated to be given by the bilinear expression

$$\mathcal{D}(\rho) = \text{tr}_2\{\mathcal{K}(\rho \otimes \rho)\}, \quad (3.562)$$

where $\mathcal{K}$ is a Lindblad generator which acts on the two-particle space $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ as follows,

$$\mathcal{K}(R) = \sum_{\alpha} \left\{ T_{\alpha} R T_{\alpha}^{\dagger} - \frac{1}{2} T_{\alpha}^{\dagger} T_{\alpha} R - \frac{1}{2} R T_{\alpha}^{\dagger} T_{\alpha} \right\}. \quad (3.563)$$

We have further used the symbol tr_2 to denote the partial trace taken over the second Hilbert space $\mathcal{H}_2$.

The operators T_{α} introduced in eqn (3.563) act on the two-particle space $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$. They describe the exchange of energy between the particles during the collisions and have to satisfy certain conditions. First, to guarantee the conservation of energy one demands

$$[T_{\alpha}, h_1 + h_2] = 0. \quad (3.564)$$

Second, micro-reversibility requires that

$$T_{\alpha}^{\dagger} T_{\alpha} = T_{\alpha} T_{\alpha}^{\dagger} \quad (3.565)$$

and, third, the T_{α} are supposed to be invariant under permutations $\pi(1, 2)$ of the particles,

$$[\pi(1, 2), T_{\alpha}] = 0. \quad (3.566)$$

It is easy to show that eqn (3.561) is of parametric Lindblad form (3.557). We note further that the quantum Boltzmann equation, in close analogy to the classical Boltzmann equation, has the following properties. It conserves energy

$$\frac{d}{dt} \text{tr}(h\rho(t)) = 0, \quad (3.567)$$

the H -theorem holds which states that the von Neumann entropy $S(\rho)$ is nondecreasing,

$$\frac{d}{dt} S(\rho(t)) \geq 0 \quad (3.568)$$

and the canonical distribution $\rho_{\text{th}} = \exp(-\beta h) / \text{tr} \exp(-\beta h)$ is a stationary solution, that is $\mathcal{D}(\rho_{\text{th}}) = 0$. These properties can be verified with the help of the conditions (3.564)-(3.566).

9.10.2 3.7.2 Mean field master equations

We consider N identical quantum systems associated with certain sites $j = 1, 2, \dots, N$ of a lattice, a spin lattice for example. The Hilbert space of the j -th particle is denoted by $\mathcal{H}_j$ and its self-Hamiltonian by $h = h_j$ regarded as an operator acting on $\mathcal{H}_j$. The systems at two different sites i and j interact via a two-particle potential $V = V_{ij}$ which is considered to be an operator on $\mathcal{H}_i \otimes \mathcal{H}_j$. The Hamiltonian of the total system thus takes the form

$$H_N = \sum_{j=1}^N h_j + \frac{1}{N} \sum_{i \neq j}^N V_{ij} \quad (3.569)$$

and acts on the Hilbert space

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_N \quad (3.570)$$

of the total system. The interaction is scaled by a factor $1/N$ to ensure that the total Hamiltonian scales with the particle number $\langle H_N \rangle \sim N$.

Let us denote by tr_n the partial trace over the n -th Hilbert space $\mathcal{H}_n$ and let us introduce the shorthand notation

$$\text{tr}_{[n,N]} = \text{tr}_n \text{tr}_{n+1} \dots \text{tr}_N \quad (3.571)$$

for the partial trace taken over the Hilbert spaces labelled by $n, n+1, \dots, N$. Then the following theorem on the mean-field or Hartree approximation holds (Spohn, 1980). Suppose that the initial state of the system is taken to be a product state

$$\rho_N = \rho \otimes \dots \otimes \rho \quad (N \text{ factors}). \quad (3.572)$$

Then one has in the limit of an infinite particle number

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \text{tr}_{[n+1,N]} \{ e^{-iH_N t} \rho_N e^{iH_N t} \} = \rho(t) \otimes \dots \otimes \rho(t) \quad (n \text{ factors}) \quad (3.573)$$

where $\rho(t)$ is the solution of the Hartree equation

$$\frac{d}{dt} \rho(t) = -i[h, \rho(t)] - i \text{tr}_2 [V_{12} + V_{21}, \rho(t) \otimes \rho(t)] \quad (3.574)$$

corresponding to the initial condition $\rho(0) = \rho$. The relation (3.573) holds for all n and the convergence is to be understood as a convergence in the trace norm.

Essentially, the mean-field approximation consists in performing the approximation $\rho_2(t) \approx \rho(t) \otimes \rho(t)$ in the hierarchy of coupled equations of motion for the n -particle density matrices

$$\rho_n(t) = \text{tr}_{[n+1, N]} \rho_N(t), \quad (3.575)$$

where

$$\rho_N(t) = \exp(-iH_N t) \rho_N \exp(+iH_N t) \quad (3.576)$$

represents the exact dynamics of the total system. The above theorem shows that this approximation holds in the limit $N \rightarrow \infty$.

We will not present the detailed proof of eqn (3.573). Let us demonstrate, however, that the Hartree equation (3.574) is obtained as a consequence of (3.573). To this end, we first observe that for $n = 1$ eqn (3.573) yields

$$\rho(t) = \lim_{N \rightarrow \infty} \text{tr}_{[2, N]} \rho_N(t), \quad (3.577)$$

from which we get

$$\frac{d}{dt} \rho(t) = -i \lim_{N \rightarrow \infty} \text{tr}_{[2, N]} \left\{ \sum_j [h_j, \rho_N(t)] + \frac{1}{N} \sum_{i \neq j} [V_{ij}, \rho_N(t)] \right\}. \quad (3.578)$$

The first term on the right-hand side can be written as

$$\begin{aligned} & -i \lim_{N \rightarrow \infty} \text{tr}_{[2, N]} \left\{ [h_1, \rho_N(t)] + \sum_{j=2}^N [h_j, \rho_N(t)] \right\} \\ &= -i \left[h, \lim_{N \rightarrow \infty} \text{tr}_{[2, N]} \rho_N(t) \right] - i \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{j=2}^N \text{tr}_{[2, N]} [h_j, \rho_N(t)] \\ &= -i[h, \rho(t)] \end{aligned} \quad (3.579)$$

where we made use of the fact that the partial trace $\text{tr}_{[2, N]} [h_j, \rho_N(t)]$ vanishes for $j = 2, 3, \dots, N$. Hence, we can write the equation of motion for the density matrix $\rho(t)$ in the form

$$\frac{d}{dt} \rho(t) = -i[h, \rho(t)] - i \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{i \neq j} \text{tr}_{[2, N]} [V_{ij}, \rho_N(t)]. \quad (3.580)$$

Due to the trace over $\mathcal{H}_2 \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_N$ only those terms in the second term on the right-hand side of (3.580) survive for which either $i = 1$ or $j = 1$. The second term in eqn (3.580) is thus equal to

$$-i \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{j=2}^N \text{tr}_{[2, N]} [V_{1j} + V_{j1}, \rho_N(t)].$$

Because of the symmetry of ρ_N and $\rho_N(t)$ all terms of the sum over j are equal to each other. Hence, expression (3.581) can be written as

$$-i \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{N-1}{N} \text{tr}_{[2, N]} [V_{12} + V_{21}, \rho_N(t)] = -i \text{tr}_2 [V_{12} + V_{21}, \rho(t) \otimes \rho(t)], \quad (3.582)$$

where we have used $\text{tr}_{[2, N]} = \text{tr}_2 \text{tr}_{[3, N]}$ and eqn (3.573) for $n = 2$, that is

$$\rho(t) \otimes \rho(t) = \lim_{N \rightarrow \infty} \text{tr}_{[3, N]} \rho_N(t). \quad (3.583)$$

This shows that the Hartree equation (3.574) follows from the mean-field approximation (3.573).

9.10.3 3.7.3 Mean field laser equations

As an example of the application of the Hartree equation with linear dissipation we consider a simple model for the laser, namely the model developed by Haken (1984), Lax (1966), Louisell (1990), and Gordon (1967). To this end, we first derive the mean-field equation governing the atom-laser mode dynamics, and then couple external reservoirs to the system to describe the pumping of the atoms and the field losses.

The atoms are described as two-level systems with transition frequency ω living in the Hilbert space $\mathcal{H}_A \cong \mathbb{C}^2$. The atoms are coupled to a laser mode described by creation and annihilation operators $a^\dagger, a$ acting on the single-mode Fock space $\mathcal{H}_F$. Employing the rotating wave approximation and assuming exact resonance we can write the atom-laser mode Hamiltonian as

$$H = \sum_{j=1}^N \frac{\omega}{2} \sigma_j^3 + \omega a^\dagger a + i\tilde{g} \sum_{j=1}^N (a^\dagger \sigma_j^- - a \sigma_j^+) \equiv H_A + H_F + H_{AF}. \quad (3.584)$$

H_A and H_F are the free Hamiltonians for the atoms and for the laser mode, respectively, and $\sigma_j^3, \sigma_j^+, \sigma_j^-$ are the j -th atom's 3-component of the Pauli matrices and the corresponding raising and lowering operators in the usual notation. The atom-field interaction is given by H_{AF} with coupling constant $\tilde{g}$.

In order to bring the Hamiltonian of the system into the form (3.569) required to apply the mean-field theory we make use of the following trick. We introduce N identical copies a_j of the field mode, satisfying the commutation relations $[a_i, a_j^\dagger] = \delta_{ij}$, and perform the following replacements,

$$a \longrightarrow \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j a_j, \quad a^\dagger a \longrightarrow \sum_j a_j^\dagger a_j. \quad (3.585)$$

If we also scale the coupling constant as

$$\tilde{g} = \frac{g}{\sqrt{N}} \quad (3.586)$$

we can write the atom-laser mode Hamiltonian as

$$H = \sum_{j=1}^N \omega a_j^\dagger a_j + \sum_{j=1}^N \frac{\omega}{2} \sigma_j^3 + \frac{ig}{N} \sum_{i \neq j} (a_i^\dagger \sigma_j^- - a_i \sigma_j^+). \quad (3.587)$$

This representation allows us to exploit the following identification,

$$h_j = \omega a_j^\dagger a_j + \frac{\omega}{2} \sigma_j^3, \quad (3.588)$$

$$V_{ij} = ig (a_i^\dagger \sigma_j^- - a_i \sigma_j^+). \quad (3.589)$$

Hence, the Hartree equation (3.574) becomes

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \rho(t) = & -i \left[\omega a^\dagger a + \frac{\omega}{2} \sigma^3, \rho(t) \right] \\ & + g \left[\text{tr}(\sigma^- \rho(t)) a^\dagger - \text{tr}(\sigma^+ \rho(t)) a, \rho(t) \right] \\ & + g \left[\text{tr}(a^\dagger \rho(t)) \sigma^- - \text{tr}(a \rho(t)) \sigma^+, \rho(t) \right]. \end{aligned} \quad (3.590)$$

This is the mean-field approximation of the atom-laser mode dynamics. The next step is to consider the losses of the radiation field and the pumping of the two-level atoms. To this end, the laser mode and the atoms are coupled to two different reservoirs. These couplings are modelled within the weak-coupling approximation and lead to two Lindblad generators which must be added to the right-hand side of the mean-field equation:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\rho(t) = & -i \left[\omega a^\dagger a + \frac{\omega}{2} \sigma^3, \rho(t) \right] \\ & + g \left[\text{tr}(\sigma^- \rho(t)) a^\dagger - \text{tr}(\sigma^+ \rho(t)) a, \rho(t) \right] \\ & + g \left[\text{tr}(a^\dagger \rho(t)) \sigma^- - \text{tr}(a \rho(t)) \sigma^+, \rho(t) \right] \\ & + 2\kappa \left(a \rho(t) a^\dagger - \frac{1}{2} a^\dagger a \rho(t) - \frac{1}{2} \rho(t) a^\dagger a \right) \\ & + W_{21} \left(\sigma^- \rho(t) \sigma^+ - \frac{1}{2} \sigma^+ \sigma^- \rho(t) - \frac{1}{2} \rho(t) \sigma^+ \sigma^- \right) \\ & + W_{12} \left(\sigma^+ \rho(t) \sigma^- - \frac{1}{2} \sigma^- \sigma^+ \rho(t) - \frac{1}{2} \rho(t) \sigma^- \sigma^+ \right). \end{aligned}$$

The damping of the laser mode through losses and output is described by the Lindblad operator a and by a damping constant 2κ . The reservoir for the atom: leads to the Lindblad operators σ^- and σ^+ , where we have written W_{21} and W_{12} for the rates of downward and upward transitions, respectively. To account for the pumping the reservoir of the atoms is taken to be a reservoir with negative temperature, that is $W_{12} > W_{21}$.

It is now easy to verify that eqn (3.591) leads to the following closed system of equations for the mean values $\langle a(t) \rangle = \text{tr}(a \rho(t))$, $\langle \sigma^-(t) \rangle = \text{tr}(\sigma^- \rho(t))$ and $\langle \sigma^3(t) \rangle = \text{tr}(\sigma^3 \rho(t))$,

$$\frac{d}{dt} \langle a(t) \rangle = (-i\omega - \kappa) \langle a(t) \rangle + g \langle \sigma^-(t) \rangle, \quad (3.592)$$

$$\frac{d}{dt} \langle \sigma^-(t) \rangle = (-i\omega - \gamma) \langle \sigma^-(t) \rangle + g \langle a(t) \rangle \langle \sigma^3(t) \rangle, \quad (3.593)$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \sigma^3(t) \rangle = & -2g (\langle a^\dagger(t) \rangle \langle \sigma^-(t) \rangle + \langle a(t) \rangle \langle \sigma^+(t) \rangle) \\ & - 2\gamma (\langle \sigma^3(t) \rangle - d) \end{aligned} \quad (3.594)$$

Here, we have introduced the abbreviations

$$\gamma \equiv \frac{1}{2} (W_{12} + W_{21}), \quad (3.595)$$

and

$$d \equiv \frac{W_{12} - W_{21}}{W_{12} + W_{21}}. \quad (3.596)$$

Introducing as new variables the negative frequency part of the laser field

$$A(t) = \langle a(t) \rangle \exp(+i\omega t) \quad (3.597)$$

the negative frequency part of the polarization

$$S(t) = \langle \sigma^-(t) \rangle \exp(+i\omega t), \quad (3.598)$$

and the inversion

$$D(t) = \langle \sigma^3(t) \rangle, \quad (3.599)$$

we may write the system of differential equations (3.592)-(3.594) as

$$\frac{d}{dt}A(t) = -\kappa A(t) + gS(t) \quad (3.600)$$

$$\frac{d}{dt}S(t) = -\gamma S(t) + gA(t)D(t) \quad (3.601)$$

$$\frac{d}{dt}D(t) = -2g(A^*(t)S(t) + A(t)S(t)^*) - 2\gamma(D(t) - d) \quad (3.602)$$

These are the mean-field laser equations. With the help of an appropriate transformation of the variables A, S , and D this non-linear system of differential equations can be shown to be equivalent to the famous Lorentz equations of fluid dynamics (Haken, 1975). We note that the non-linear terms are the terms which are proportional to g . These terms stem from the mean-field coupling

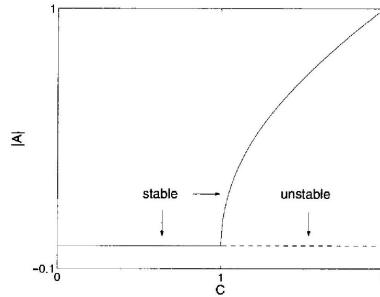


Fig. 3.8. Bifurcation diagram of the non-linear equation (3.604) for the laser field amplitude A .

between the field and the atoms. As is easily seen the system (3.600)-(3.602) has a non-trivial stationary solution $A \neq 0$ corresponding to the emergence of a mean coherent field (lasing action) provided the so-called pump parameter

$$C \equiv \frac{dg^2}{\gamma\kappa} \quad (3.603)$$

satisfies $C > 1$. This is obviously possible only for $g \neq 0$, i.e. lasing action may be viewed as a collective mean-field coupling.

The system (3.600)-(3.602) is determined through the three time constants κ^{-1} , g^{-1} , and γ^{-1} . Since γ^{-1} is the smallest time in the problem we may adiabatically eliminate the fast variables S and D . Setting $\dot{S} = \dot{D} = 0$ we find a differential equation for the field amplitude,

$$\frac{dA}{dt} = -\kappa A \left(1 - \frac{C}{1 + |A|^2/n_0} \right), \quad (3.604)$$

where $n_0 = \gamma^2/2g^2$. From this equation we read off the stationary solutions as well as their stability properties. The stationary solution $A = 0$ is unique and stable for $C < 1$. At $C = 1$ a Hopf bifurcation occurs: For $C > 1$ the state $A = 0$ becomes unstable, while a new one-parameter family of stationary states emerges which is determined by $|A|^2 = n_0(C - 1)$ (see Fig. 3.8).

9.10.4 3.7.4 Non-linear Schrödinger equation

In the previous example of the laser equations we first performed the mean-field approximation and then added linear Lindblad generators to describe the coupling to the reservoirs.

This procedure corresponds to a weak-coupling approximation on the mean-field level. In the following we consider the case in which the weak-coupling approximation is performed first on the level of the N -particle system, and then the mean-field approximation is made. This approximation procedure leads to non-linear dissipative terms in the master equation and gives rise to a non-linear Schrödinger-type equation.

The starting point is again a total Hamiltonian of the form (3.569). The total system of N particles is coupled to some reservoir. In the weak-coupling approximation the interaction with the reservoir is supposed to lead to a Lindblad-type generator in the master equation for the total density matrix $\rho_N(t)$,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\rho_N(t) = & -i \left[\sum_j h_j + \frac{1}{N} \sum_{i \neq j} V_{ij}, \rho_N(t) \right] \\ & + \frac{1}{N} \sum_{\alpha} \left\{ W^{\alpha} \rho_N(t) W^{\alpha\dagger} - \frac{1}{2} W^{\alpha\dagger} W^{\alpha} \rho_N(t) - \frac{1}{2} \rho_N(t) W^{\alpha\dagger} W^{\alpha} \right\} \end{aligned} \quad (3.605)$$

The operators W^{α} in this equation are supposed to be collective Lindblad operators of the form

$$W^{\alpha} = \sum_i V_i^{\alpha}, \quad (3.606)$$

where the V_i^{α} are single-particle operators acting on the Hilbert space of the i -th particle. An example for such a master equation will be given in the next subsection.

The mean-field approximation of the above master equation is obtained in a similar way as in Section 3.7.2. Namely, in the limit of large N one obtains the mean-field master equation

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = -i[h, \rho(t)] - i \operatorname{tr}_2 [V_{12} + V_{21}, \rho(t) \otimes \rho(t)] - i [V_D(\rho(t)), \rho(t)]. \quad (3.607)$$

The first two terms on the right-hand side provide the Hartree approximation, while the third term describes collective dissipative processes through a nonlinear potential given by

$$V_D(\rho) = \frac{i}{2} \sum_{\alpha} \left\{ \operatorname{tr} (V^{\alpha\dagger} \rho) V^{\alpha} - \operatorname{tr} (V^{\alpha} \rho) V^{\alpha\dagger} \right\} \quad (3.608)$$

To demonstrate the emergence of this potential we determine the quantity

$$\begin{aligned} & \lim_{N \rightarrow \infty} \operatorname{tr}_{[2, N]} \frac{1}{N} \sum_{\alpha} \sum_{ij} \left\{ V_i^{\alpha} \rho_N V_j^{\alpha\dagger} - \frac{1}{2} V_j^{\alpha\dagger} V_i^{\alpha} \rho_N - \frac{1}{2} \rho_N V_j^{\alpha\dagger} V_i^{\alpha} \right\} \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{\alpha} \operatorname{tr}_{[2, N]} \left\{ V_2^{\alpha} \rho_N V_1^{\alpha\dagger} - \frac{1}{2} V_1^{\alpha\dagger} V_2^{\alpha} \rho_N - \frac{1}{2} \rho_N V_1^{\alpha\dagger} V_2^{\alpha} \right\} + (1 \leftrightarrow 2). \end{aligned} \quad (3.609)$$

The symbol $(1 \leftrightarrow 2)$ indicates that the terms with indices 1 and 2 interchanged must be added. Invoking the mean-field approximation (3.573) for $n = 2$ we now get

$$\begin{aligned}
& \sum_{\alpha} \text{tr}_2 \left\{ V_2^{\alpha} \rho \otimes \rho V_1^{\alpha\dagger} - \frac{1}{2} V_1^{\alpha\dagger} V_2^{\alpha} \rho \otimes \rho - \frac{1}{2} \rho \otimes \rho V_1^{\alpha\dagger} V_2^{\alpha} \right\} + (1 \leftrightarrow 2) \\
&= \sum_{\alpha} \left\{ \text{tr} (V^{\alpha} \rho) \rho V^{\alpha\dagger} - \frac{1}{2} \text{tr} (V^{\alpha} \rho) V^{\alpha\dagger} \rho - \frac{1}{2} \text{tr} (V^{\alpha} \rho) \rho V^{\alpha\dagger} \right. \\
&\quad \left. + \text{tr} (V^{\alpha\dagger} \rho) V^{\alpha} \rho - \frac{1}{2} \text{tr} (V^{\alpha\dagger} \rho) V^{\alpha} \rho - \frac{1}{2} \text{tr} (V^{\alpha\dagger} \rho) \rho V^{\alpha} \right\} \\
&= \frac{1}{2} \sum_{\alpha} \left\{ \text{tr} (V^{\alpha\dagger} \rho) [V^{\alpha}, \rho] - \text{tr} (V^{\alpha} \rho) [V^{\alpha\dagger}, \rho] \right\} \\
&= -i [V_D(\rho), \rho(t)].
\end{aligned} \tag{3.610}$$

This shows that the master equation (3.605) gives rise to the non-linear potential (3.608) on the mean-field level.

The non-linear mean-field master equation (3.607) has the property that it can be written in the form of a non-linear Schrödinger equation. Namely, if the state vector $\psi(t)$ satisfies the non-linear Schrödinger-type equation

$$\frac{d}{dt} \psi(t) = -i [h + V_H(\psi) + V_D(\psi)] \psi(t) \tag{3.611}$$

then the pure state density matrix

$$\rho(t) = |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)| \tag{3.612}$$

is a solution of eqn (3.607). In eqn (3.611) h is the one-particle Hamiltonian. $V_H(\psi) = \langle\psi|V_{12} + V_{21}|\psi\rangle$ represents the Hartree potential and $V_D(\psi)$ denotes the non-linear potential

$$V_D(\psi) = \frac{i}{2} \sum_{\alpha} \left\{ \langle\psi|V_{\alpha}^{\dagger}|\psi\rangle V_{\alpha} - \langle\psi|V_{\alpha}|\psi\rangle V_{\alpha}^{\dagger} \right\} \tag{3.613}$$

Obviously, the non-linear Schrödinger equation (3.611) preserves the norm of the state vector since $\text{tr} \rho(t) = \|\psi(t)\|^2 = 1$.

9.10.5 3.7.5 Super-radiance

As an example of the non-linear dissipative processes and the non-linear Schrödinger equation (3.611) we study here the phenomenon of super-radiance (Gross and Haroche, 1982). To this end, we consider N identical two-level atoms with transition frequency ω interacting with the vacuum of the electromagnetic field. The

atoms are located at fixed positions $\vec{r}_j, j = 1, 2, \dots, N$. The Pauli matrices associated with the j -th atom are again denoted by $\sigma_j^3, \sigma_j^{\pm}$. The Hamiltonian of the atoms is taken to be

$$H_A = \frac{\omega}{2} \sum_{j=1}^N \sigma_j^3, \tag{3.614}$$

while the interaction of the atoms with the radiation field will be described in the dipole approximation,

$$H_I = - \sum_{j=1}^N \left(\sigma_j^- \vec{d} \cdot \vec{E}(\vec{r}_j) + \sigma_j^+ \vec{d}^* \cdot \vec{E}(\vec{r}_j) \right). \tag{3.615}$$

The vector $\vec{D}_j = \vec{d}(\sigma_j^+ + \sigma_j^-)$ represents the dipole operator of the j -th atom, $\vec{d}$ being the dipole matrix element of the atomic transition. Finally, the Schrödinger picture operator for the electric field at position $\vec{r}$ is (compare eqn (3.180))

$$\vec{E}(\vec{r}) = i \sum_{\vec{k}, \lambda} \sqrt{\frac{2\pi\omega_k}{V}} \vec{e}_\lambda(\vec{k}) \left(b_\lambda(\vec{k}) \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) - b_\lambda^\dagger(\vec{k}) \exp(-i\vec{k} \cdot \vec{r}) \right) \quad (3.616)$$

From the general form (3.143) of the dissipator for the weak-coupling limit we immediately obtain the following master equation for the N -atom system,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \rho_N(t) = & -i\omega \sum_{i=1}^N [\sigma_i^3, \rho_N(t)] \\ & + \sum_{ij} a_{ij} \left\{ \sigma_j^- \rho_N \sigma_i^+ - \frac{1}{2} \sigma_i^+ \sigma_j^- \rho_N - \frac{1}{2} \rho_N \sigma_i^+ \sigma_j^- \right\} \end{aligned} \quad (3.617)$$

The coefficients a_{ij} are given by

$$a_{ij} = \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp(i\omega t) \langle \vec{d}^* \cdot \vec{E}(\vec{r}_i, t) \vec{d} \cdot \vec{E}(\vec{r}_j, 0) \rangle. \quad (3.618)$$

In eqn (3.617) Lamb shift contributions have been neglected and the temperature of the radiation field was supposed to be zero. Thus, the correlation functions in eqn (3.618) are vacuum expectation values.

The Fourier transforms of the reservoir correlation functions can be determined explicitly. Performing the continuum limit of the radiation modes and proceeding as in Section 3.4.1.2 one gets

$$a_{ij} = \frac{\omega^3}{2\pi} \int d\Omega \left(\vec{d}^* \cdot \vec{d} - \frac{(\vec{k} \cdot \vec{d}^*)(\vec{k} \cdot \vec{d})}{|k|^2} \right) \exp(i\vec{k}(\vec{r}_i - \vec{r}_j)) \quad (3.619)$$

The angular integration can be carried out to yield

$$a_{ij} = \frac{4}{3} \omega^3 |\vec{d}|^2 \{ j_0(x_{ij}) + P_2(\cos \theta_{ij}) j_2(x_{ij}) \}, \quad (3.620)$$

where we have introduced the Bessel functions

$$j_0(x) = \frac{\sin x}{x}, \quad j_2(x) = \left(\frac{3}{x^3} - \frac{1}{x} \right) \sin x - \frac{3}{x^2} \cos x, \quad (3.621)$$

and the Legendre polynomial

$$P_2(\cos \theta) = \frac{1}{2} (3 \cos^2 \theta - 1) \quad (3.622)$$

and defined

$$x_{ij} = \omega |\vec{r}_i - \vec{r}_j|, \quad \cos^2 \theta_{ij} = \frac{|\vec{d} \cdot (\vec{r}_i - \vec{r}_j)|^2}{|\vec{d}|^2 \cdot |\vec{r}_i - \vec{r}_j|^2}. \quad (3.623)$$

The eigenvalues of the $N \times N$ matrix a_{ij} determine the relaxation rates of the system. The diagonals of this matrix are equal to the spontaneous emission rate for a single atom,

$$a_{ii} = \frac{4}{3}\omega^3 |\vec{d}|^2 \equiv \gamma_0. \quad (3.624)$$

Let us suppose that all atoms are initially in the excited state which yields the initial state

$$|\Psi_0\rangle = |e, e, \dots, e\rangle \quad (N \text{ factors}) \quad (3.625)$$

for the N -atom system. According to eqns (3.620) the matrix a_{ij} is approximately diagonal provided the mean distance between the atoms is large compared to the wavelength $\bar{\lambda} \equiv 1/\omega$ of the radiation. Hence, in this case we have $a_{ij} \approx \gamma_0 \delta_{ij}$. The atoms therefore radiate essentially independently of each other and the radiated intensity follows an exponential decay law

$$I(t) = \gamma_0 \omega N e^{-\gamma_0 t} \quad (3.626)$$

The radiation emitted by the atoms adds incoherently which leads to a total intensity proportional to N .

We denote by r the linear dimension of the N -atom system. For $r \ll \bar{\lambda}$ the matrix elements are approximately equal to each other, i.e. $a_{ij} \approx \gamma_0$. One then finds a qualitatively different behaviour: After a certain delay time τ_D the emitted radiation occurs in a short burst whose maximal intensity is proportional to N^2 while its width scales with N^{-1} . This phenomenon is called super-radiance (see Fig. 3.9).

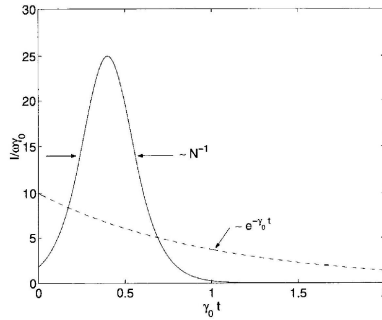


Fig. 3.9. Qualitative picture of the radiation intensity $I(t)$ of a system of N two-level atoms. Dashed line: Independent spontaneous emission processes lead to the exponential decay law (3.626). Solid line: The emission of super-radiance occurs in a short burst with a width proportional to N^{-1} and a height proportional to N^2 . The super-radiance intensity profile was taken from the mean-field result (3.643) with $N = 10$ and $\gamma_0 t_D = 0.4$.

To understand this behaviour qualitatively we first note that due to the condition $r \ll \bar{\lambda}$ the coupling (3.615) is approximately symmetric under exchanges of the atoms. Therefore, we may assume that the wave function $|\Psi(t)\rangle$ of the total system stays symmetric under the time evolution. Identifying the two-level atoms with spin- $\frac{1}{2}$ particles we may introduce the total 'angular momentum' operator

$$\vec{J} = \sum_{j=1}^N \frac{1}{2} \vec{\sigma}_j \quad (3.627)$$

Its 3-component is proportional to the atomic Hamiltonian H_A ,

$$J^3 = \sum_{j=1}^N \frac{1}{2} \sigma_j^3 = \frac{1}{\omega} H_A \quad (3.628)$$

The corresponding raising and lowering operators take the form

$$J^{\pm} = \sum_{j=1}^N \sigma_j^{\pm} \quad (3.629)$$

With the help of these operators the energy eigenstates of H_A may be characterized by the simultaneous eigenstates $|J, M\rangle$ of $\vec{J}^2$ and J^3 , where $J = 0, 1, 2, \dots, N/2$ and $M = -J, \dots, +J$. These states are known as Dicke states (see, e.g. Mandel and Wolf, 1995). As is well known the subspace which is totally symmetric under permutations of the atoms is spanned by the states with maximal angular momentum $J = N/2$. We can thus order the totally symmetric eigenstates of the system with decreasing energy as follows,

$$\begin{aligned} |J, M = J\rangle &= |e, e, \dots, e\rangle \\ |J, M = J - 1\rangle &= \mathcal{S}|g, e, \dots, e\rangle \\ |J, M = J - 2\rangle &= \mathcal{S}|g, g, e, \dots, e\rangle \\ &\dots\dots\dots \\ |J, M = -J\rangle &= |g, \dots, g\rangle, \end{aligned}$$

where $\mathcal{S}$ is the symmetrization operator. In view of this scheme super-radiance can be considered as a cascade emission along a ladder of 'angular momentum' eigenstates. The emission rate $W(M)$ for the transition $|J, M\rangle \rightarrow |J, M - 1\rangle$ is given by the square of a certain Clebsch-Gordan coefficient,

$$W(M) = \gamma_0 |\langle J, M - 1 | J^- | J, M \rangle|^2 = \gamma_0 (J - M + 1)(J + M). \quad (3.630)$$

Thus we see that the emission rate increases from the initial value $W(M = J) = 2\gamma_0 J = \gamma_0 N$ to a maximal value

$$\begin{aligned} W(M = 0, 1) &= \gamma_0 J(J + 1) = \frac{\gamma_0}{4} N(N + 2), \quad \text{for } N \text{ even,} \\ W(M = 1/2) &= \gamma_0 (J + 1/2)^2 = \frac{\gamma_0}{4} (N + 1)^2, \quad \text{for } N \text{ odd,} \end{aligned} \quad (3.632)$$

which scales with the square N^2 of the number of atoms. Finally, the rate decreases again to $W(M = -J) = 0$.

Let us now apply the mean-field theory. For $r \ll \bar{\lambda}$ we get the master equation

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \rho_N(t) &= -i\omega [J^3, \rho_N(t)] \\ &+ \gamma_0 \left(J^- \rho_N(t) J^+ - \frac{1}{2} J^+ J^- \rho_N(t) - \frac{1}{2} \rho_N(t) J^+ J^- \right). \end{aligned} \quad (3.633)$$

This equation is of the form of the mean-field master equation (3.605) with the collective Lindblad operator J^- and we can immediately write down the corresponding non-linear Schrödinger equation (3.611),

$$\frac{d}{dt} \psi(t) = -i\frac{\omega}{2} \sigma^3 \psi(t) - iV_D(\psi(t)) \psi(t) \quad (3.634)$$

where

$$V_D(\psi) = i\frac{N\gamma_0}{2} (\langle \psi | \sigma^+ | \psi \rangle \sigma^- - \langle \psi | \sigma^- | \psi \rangle \sigma^+) \quad (3.635)$$

is the non-linear potential. Introducing the parametrization

$$\psi(t) = \begin{pmatrix} \psi_1(t) \\ \psi_2(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{p(t)} \exp(i\theta(t)) \\ \sqrt{1 - p(t)} \exp(i\phi(t)) \end{pmatrix} \quad (3.636)$$

and using the representations (3.213) and (3.214) of the Pauli matrices one finds the system of differential equations

$$\dot{p} + 2ip\dot{\theta} = -i\omega p - N\gamma_0 p(1-p) \quad (3.637)$$

$$\dot{p} - 2i(1-p)\dot{\phi} = -i\omega(1-p) - N\gamma_0 p(1-p) \quad (3.638)$$

Separating real and imaginary parts we obtain $2\dot{\theta} = -\omega$ and $2\dot{\phi} = +\omega$. The phases θ and ϕ of the mean-field wave function thus evolve according to the free dynamics.

Since $\psi(t)$ represents the mean-field approximation of the N -particle system the quantity $Np(t) = N|\psi_1(t)|^2$ must be interpreted as the mean number of atoms in the excited state. Hence,

$$I(t) = -N\omega \frac{d}{dt} p(t) \quad (3.639)$$

is the mean intensity of the radiation. From the system of differential equations (3.637) and (3.638) we obtain a differential equation for $p(t)$,

$$\dot{p} = -N\gamma_0 p(1-p) \quad (3.640)$$

which has the solution

$$\frac{p(t)}{1-p(t)} = \frac{p_D}{1-p_D} \exp[-\gamma_0 N(t-t_D)] \quad (3.641)$$

We identify t_D with the delay time of the super-radiance and $p(t=t_D) = p_D$ is the mean occupation probability of the excited state $|e\rangle$ at time $t = t_D$, i.e. at the time of maximal intensity. The above interpretation in terms of the cascade process (see eqns (3.631) and (3.632)) yields $p_D \approx 1/2$, such that we finally obtain

$$p(t) = \frac{1}{\exp[\gamma_0 N(t-t_D)] + 1} \quad (3.642)$$

The intensity of the radiation is therefore given by

$$I(t) = \frac{\gamma_0 \omega N^2}{4} \left[\cosh \left(\frac{\gamma_0 N}{2} (t-t_D) \right) \right]^{-2} \quad (3.643)$$

We note that this formula already describes the characteristic features of superradiance (Gross and Haroche, 1982) as shown in Fig. 3.9: The intensity is proportional to N^2 , the maximal intensity is reached after a delay time t_D , and the width of the radiation pulse scales with N^{-1} . It must be noted, however, that the delay time exhibits strong fluctuations which are determined by the quantum fluctuations in the initial phase of the super-radiance process. The simple mean-field description given above cannot account for the statistics of the delay time.

10 Basic models of quantum kinetics

10.1 Kubo's Linear Response

(see Tong's lectures for example)

обзор

(глазков уже про это говорил)

10.2 Green's Function Method for Kinetics

(for now, see cond matter and other notes. later I'll collect it here. I'll write about Keldysh and others. Also now it is written in Kamenev's book, but I am not sure if it is a good theory?)

10.3 Kinetics of Fermi Liquid

Обсудим подробно кинетику ферми-жидкости.

10.3.1 Reminder: What Is Fermi Liquid?

(пока это не так нужно знать)

основы ферми-жидкости

(тут теория на пару страниц, которая пока опущена)

итоговые свойства ферми-жидкости

Большая часть возбуждений в ферми-жидкости - квазичастицы имеет точно такой же спектр и динамику, как и в невзаимодействующей системе.

Кроме того, благодаря взаимодействию могут появиться коллективные моды плазменных или нуль-звуковых колебаний.

Появление коллективных мод и есть основной качественный эффект, к которому приводит взаимодействие.

кинетическое уравнение для ферми-жидкости

(левитов -шитов гл 8. пропишу кст и в статфизе это)

Выражение

$$H \equiv \varepsilon(\mathbf{p}, \delta n) = \varepsilon^{(0)}(\mathbf{p}) + \int f(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \delta n(\mathbf{p}', \mathbf{r}) \frac{d^3 p'}{(2\pi)^3}$$

есть гамильтониан H одной квазичастицы, движущейся в самосогласованном поле других квазичастиц.

Динамика квазичастицы описывается уравнением Гамильтона $\partial n / \partial t = \{H, n\}$, где $\{\dots\} = [\partial / \partial \mathbf{r}, \partial / \partial \mathbf{p}]$ - скобки Пуассона.

Вычисляя скобки Пуассона с этим гамильтонианом, получаем кинетическое уравнение теории ферми-жидкости:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial n}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial \varepsilon}{\partial \mathbf{p}} - \frac{\partial n}{\partial \mathbf{p}} \frac{\partial \varepsilon}{\partial \mathbf{r}} = 0$$

Рассмотрим колебания системы, отвечающие малым отклонениям от равновесия.

Для этого представим функцию распределения в виде $n = n_0 + \delta n$ и линеаризуем кинетическое уравнение по δn .

Получим

$$\frac{\partial \delta n}{\partial t} + \frac{\partial \delta n}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial \varepsilon^{(0)}}{\partial \mathbf{p}} - \frac{\partial \delta \varepsilon}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial n_0}{\partial \mathbf{p}} = 0$$

где $\delta \varepsilon$ - функционал Ландау, по определению имеющий вид $\delta \varepsilon = \int f(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \delta n(\mathbf{p}', \mathbf{r}) \frac{d^3 p'}{(2\pi)^3}$.

Нас интересуют решения, зависящие от времени и координат как $e^{-i\omega t + i\mathbf{k}\mathbf{r}}$.

нормальное смещение ферми-поверхности

Нетрудно показать, что все решения δn имеют δ -функциональную зависимость от $|\mathbf{p}|$ и локализованы на ферми-поверхности $|\mathbf{p}| = p_0$.

Поэтому оказывается удобным использовать в качестве независимой переменной функцию единичного вектора $\mathbf{n}$ на ферми-поверхности:

$$u(\mathbf{n}) = \int \delta n(\mathbf{p}) d|\mathbf{p}|$$

где интеграл берется вдоль луча $\mathbf{p} \parallel \mathbf{n}$.

Величина $u(\mathbf{n})$ имеет смысл нормального смещения ферми-поверхности в точке $p_0 \mathbf{n}$.

Из кинетического уравнения можно получить уравнение для $u(\mathbf{n})$, которое имеет следующий вид:

$$(\omega - \mathbf{k}\mathbf{v})u(\mathbf{n}) = \mathbf{k}\mathbf{v} \int F(\mathbf{n}, \mathbf{n}') u(\mathbf{n}') \frac{d\mathbf{n}'}{4\pi}$$

где $\mathbf{v} = v_F \mathbf{n}$, а функция F связана с функцией f в функционале Ландау (8.2) следующим образом:

$$F(\mathbf{n}, \mathbf{n}') = \nu_0 f(\mathbf{p}, \mathbf{p}')|_{|\mathbf{p}|=|\mathbf{p}'|=p_0},$$

где ν_0 - плотность состояний с одной проекцией спина.

квазичастичные и коллективные решения: обзор

Полученное соотношение

$$(\omega - \mathbf{k}\mathbf{v})u(\mathbf{n}) = \mathbf{k}\mathbf{v} \int F(\mathbf{n}, \mathbf{n}') u(\mathbf{n}') \frac{d\mathbf{n}'}{4\pi}$$

следует рассматривать, как уравнение на собственные значения $\omega(\mathbf{k})$.

Оно имеет решения двух типов: квазичастичные и коллективные.

Для квазичастичных решений связь ω и $\mathbf{k}$ есть $\omega = \mathbf{k}\mathbf{v}$, а соответствующая функция $u(\mathbf{n})$ описывает частицу с определенным направлением скорости $\mathbf{v}$.

Решения другого типа описывают коллективные моды колебаний ферми-жидкости, или так называемый нулевой звук.

квазичастичные решения

Из-за этого функция $u(\mathbf{n})$ на ферми-поверхности имеет сингулярный характер:

$$u(\mathbf{n}') = \delta^{(2)}(\mathbf{n}' - \mathbf{n}) + u_{\text{reg}}(\mathbf{n}')$$

Кроме δ -функции, локализованной в точке $\mathbf{n} = \mathbf{v}/|\mathbf{v}|$ ферми-поверхности, выражение (8.9) содержит $u_{\text{reg}}(\mathbf{n})$ - более плавную функцию, обычно имеющую полюсы при $\mathbf{k}\mathbf{v} = \omega$.

нулевой звук - локальное и изотропное взаимодействие: итоговые свойства и обзор

закон дисперсии нулевого звука оказывается линейным:

$$\omega_0(\mathbf{k}) = s(F_0) v_F |\mathbf{k}|.$$

распространение нуль-звука и динамика отдельных квазичастиц «развязаны», вследствие чего нуль-звуковая мода оказывается незатухающей.

Более точное микроскопическое рассмотрение показывает, что эти результаты справедливы лишь при не слишком больших $\mathbf{k}$. ????

Обычно законы дисперсии коллективных мод в ферми-жидкости имеют точку окончания $k_{\max}$, в которой происходит слияние с квазичастичным спектром.

Коллективные моды в ферми-жидкости могут затрагивать не только распределение плотности частиц, но и поляризацию спина. В этом случае говорят о спиновых волнах.

нулевой звук - локальное и изотропное взаимодействие: вывод

(добавлю потом от ЛЛ т9 теорию)
необходимо решить уравнение

$$(\omega - \mathbf{k}\mathbf{v})u(\mathbf{n}) = \mathbf{k}\mathbf{v} \int F(\mathbf{n}, \mathbf{n}') u(\mathbf{n}') \frac{d\mathbf{n}'}{4\pi}$$

Рассмотрим простейший случай, когда взаимодействие локально и изотропно, т.е. функция F есть просто константа: $F(\mathbf{n}, \mathbf{n}') = F_0$.

Примером системы с функцией Ландау подобного вида является жидкий ^3He .

В этом случае, ввиду симметрии задачи, функция $u(\mathbf{n})$ зависит только от угла θ между векторами $\mathbf{n}$ и $\mathbf{k}$.

Поэтому исходное уравнение принимает вид

$$(s - \cos \theta)u(\theta) = \frac{F_0}{2} \cos \theta \int u(\theta') d\theta',$$

где $s = \frac{\omega}{v_F|\mathbf{k}|}$.

????? Решение этого уравнения есть $u(\mathbf{n}) = A \cos \theta / (s - \cos \theta)$, где A - произвольная константа.

???? тут место, в котором нужно сесть и проделать это!!!!

Подставляя это решение, находим

$$\frac{s}{2} \ln \frac{s+1}{s-1} - 1 = \frac{1}{F_0}$$

При любом взаимодействии отталкивания (т. е. при $F_0 > 0$) это уравнение имеет ровно одно вещественное решение $s > 1$ и, таким образом, определяет функцию $s(F_0)$.

Поэтому закон дисперсии нулевого звука оказывается линейным:

$$\omega_0(\mathbf{k}) = s(F_0) v_F |\mathbf{k}|.$$

Поскольку $s(F_0) > 1$, частота $\omega_0(\mathbf{k})$ при любом $\mathbf{k}$ лежит выше границы квазичастичного спектра: $\omega_0(\mathbf{k}) > v_F |\mathbf{k}|$.

Это означает, что распространение нуль-звука и динамика отдельных квазичастиц «развязаны», вследствие чего нуль-звуковая мода оказывается незатухающей.

плазменные колебания - при дальнотействующим взаимодействиям: обзор

Посмотрим, как видоизменяются коллективные моды в металле, где взаимодействие между частицами кулоновское, т.е. дальнотействующее.

В этом случае вместо нулевого звука возникают так называемые плазменные колебания.

Запишем кинетическое уравнение $\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial n}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial \varepsilon}{\partial \mathbf{p}} - \frac{\partial n}{\partial \mathbf{p}} \frac{\partial \varepsilon}{\partial \mathbf{r}} = 0$ с учетом силы, возникающей благодаря электрическому полю $\mathbf{E} = -\nabla \Phi$, где

$$\Phi(\mathbf{r}) = e \int \left[\int n(\mathbf{p}, \mathbf{r}') \frac{d^3 \mathbf{p}}{(2\pi)^3} - n_0 \right] \frac{d^3 \mathbf{r}'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|},$$

получаем

$$\frac{\partial n}{\partial t} + (\mathbf{v} \nabla_{\mathbf{r}}) n + e (\mathbf{E} \nabla_{\mathbf{p}}) n = 0$$

и n_0 - плотность фонового положительного заряда.

Как и выше, линеаризуем уравнение и перейдем в импульсное представление.

Получающиеся уравнения оказываются точно такими же, как и в случае нулевого звука, с точностью до замены $F_0 \rightarrow 4\pi e^2 \nu / \mathbf{k}^2$, где $\nu = 2\nu_0$ - плотность состояний с учетом спина.

???? Это происходит потому, что полученное кинетическое уравнение, если выразить в нем электрическое поле через плотность частиц, приобретает такую же форму, как кинетическое уравнение ферми-жидкости с нелокальным функционалом Ландау:

$$\delta \varepsilon(\mathbf{r}) = \iint \frac{e^2 \delta n(\mathbf{p}, \mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \frac{d^3 \mathbf{r}' d^3 \mathbf{p}}{(2\pi)^3}$$

Как и в случае изотропного взаимодействия, энергия зависит только от полной плотности частиц.

Поэтому и угловая зависимость смещений ферми-поверхности, и дисперсионное уравнение выглядят точно так же, как для нуль-звука:

$$\frac{\omega}{2v_F |\mathbf{k}|} \ln \frac{\omega + v_F |\mathbf{k}|}{\omega - v_F |\mathbf{k}|} - 1 = \frac{\mathbf{k}^2}{4\pi e^2 \nu}$$

Частота $\omega(\mathbf{k})$, определяемая из уравнения (8.14), остается конечной при малых $\mathbf{k}$: $\omega_0 \equiv \omega(\mathbf{k} \rightarrow 0) = (4\pi n e^2 / m)^{1/2}$, что совпадает с известным классическим результатом для плазменной частоты.

Подробнее закон дисперсии плазменных волн будет рассмотрен в задаче 44.

приближение случайных фаз - квантование динамики ферми-жидкости: обзор

Обсудим теперь, как можно проквантовать динамику ферми-жидкости, используя гамильтонов формализм.

Для этого потребуется ввести операторы электрон-дырочных пар, удовлетворяющие бозонным коммутационным соотношениям.

Гамильтониан ферми-жидкости

$$\hat{\mathcal{H}}_0 = \sum_{\mathbf{p}, \sigma} \xi(\mathbf{p}) a_{\mathbf{p}, \sigma}^+ a_{\mathbf{p}, \sigma}, \quad \hat{\mathcal{H}}_{\text{int}} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}},$$

записанный через такие операторы, содержит квадратичные члены, а также члены более высокого порядка, которыми можно пренебречь, если энергия рассматриваемых возбуждений мала по сравнению с E_F .

Динамику, определяемую этим квадратичным гамильтонианом, можно исследовать точно и установить ее эквивалентность кинетическому уравнению ферми-жидкости.

Возможность описать систему взаимодействующих фермионов с помощью эквивалентного бозонного гамильтониана имеет разнообразные интересные применения.

Одним из них является так называемый метод бозонизации, который мы рассмотрим где-то дальше.

Как и теория ферми-жидкости Ландау, метод бозе-операторов электрон-дырочных пар основывается на предположении, что функция распределения по импульсам имеет такой же вид, как и для свободных частиц, т.е. что ферми-поверхность не разрушается взаимодействием.

Чтобы выяснить, как взаимодействие меняет характер возбудений, мы приведем гамильтониан ферми жидкости к виду, содержащему операторы рождения и уничтожения пар.

При этом будет использовано так называемое приближение случайных фаз Бома и Пайнса, впервые введенное при рассмотрении плазменных колебаний в вырожденном электронном газе.

В рамках этого приближения коммутационные соотношения для операторов пар сильно упрощаются.

С формальной точки зрения, рассматриваемый здесь метод является корректным в пределе высокой плотности, когда взаимодействие можно считать слабым.

приближение случайных фаз: вывод

(тут теории много, и это не нужно пока что)

Для простоты изложения будем считать фермионы бесспиновыми.

При необходимости, восстановить спиновую зависимость в окончательных выражениях можно без особого труда.

Введем бозе-операторы $c_{\mathbf{p},\mathbf{k}}, c_{\mathbf{p},\mathbf{k}}^+$ электрон-дырочных пар следующим образом:

$$c_{\mathbf{p},\mathbf{k}} = a_{\mathbf{p}}^+ a_{\mathbf{p}+\mathbf{k}}, \quad c_{\mathbf{p},\mathbf{k}}^+ = a_{\mathbf{p}+\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{p}}, \quad \text{где } |\mathbf{p}| < p_0, |\mathbf{p} + \mathbf{k}| > p_0$$

Обратим внимание читателя на ограничение, наложенное на импульсы $\mathbf{p}$ и $\mathbf{k}$.

Оно выбрано так, чтобы при действии оператором $c_{\mathbf{p},\mathbf{k}}^+$ на основное состояние невзаимодействующей системы всегда рождалась ровно одна пара частица-дырка, а при действии оператором $c_{\mathbf{p},\mathbf{k}}$ на любое возбужденное состояние число пар всегда уменьшалось.

Условия $|\mathbf{p}| < p_0$ и $|\mathbf{p} + \mathbf{k}| > p_0$, при фиксированном $\mathbf{k}$ определяют подмножество ферми-сферы, имеющее в сечении серповидную форму.

(тут рисунок двух пересекающихся сфер, потом вставляю, если он правда нужен)

Мы будем обозначать эту область R_k и записывать ограничение (8).

15) на $\mathbf{p}$ и $\mathbf{k}$ в виде $\mathbf{p} \in R_k$ Стратегия наша теперь состоит в том, чтобы представить гамильтониан системы в виде выражения, квадратичного по операторам $c_{\mathbf{p},\mathbf{k}}, c_{\mathbf{p},\mathbf{k}}^+$, и показать, что эти операторы подчиняются обычным бозевским коммутационным соотношениям.

При этом интересующая нас задача сведется к задаче о невзаимодействующих осцилляторах.

Хотя такое преобразование, разумеется, является приближенным, выясняется, что неточность допускается только для сильно возбужденных состояний, в то время как состояния с относительно небольшим количеством электрон-дырочных пар описываются совершенно правильно.

Начнем с оператора плотности частиц и рассмотрим приближенное выражение для гармоник плотности:

$$\tilde{\rho}_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{p} \in R_k} (c_{\mathbf{p},\mathbf{k}} + c_{-\mathbf{p},-\mathbf{k}}^+)$$

Заметим, что наложенное условие $\mathbf{p} \in R_k$ не нарушает вещественности оператора плотности $\tilde{\rho}_{\mathbf{k}} = \tilde{\rho}_{-\mathbf{k}}^+$ Смысл приближения (8).

16) состоит в том, что из точного выражения $\rho_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{p}} a_{\mathbf{p}}^+ a_{\mathbf{p}+\mathbf{k}}$ исключены матричные элементы, соответствующие «чересчур многочастичным» процессам.

Говоря более точно, мы отбрасываем все слагаемые $a_{\mathbf{p}}^+ a_{\mathbf{p}+\mathbf{k}}$, дающие нуль при применении к любому состоянию с ровно одной электрон-дырочной парой, а также к основному состоянию невзаимодействующей системы.

Подставим выражение (8.

16) в гамильтониан (8.1). Получающийся при этом приближенный гамильтониан совпадает с исходным гамильтонианом на состояниях, содержащих небольшое количество пар.

Отличие между приближенным и точным гамильтонианами появляется только для достаточно сильно возбужденных состояний.

Чтобы в этом убедиться, рассмотрим коммутационные соотношения получившегося гамильтониана $\widehat{\mathcal{H}}_{\text{int}} = (1/2) \sum_k V_k \tilde{\rho}_k \tilde{\rho}_{-k}$ с операторами рождения и уничтожения пар $c_{\mathbf{p},\mathbf{k}}^+, c_{\mathbf{p},\mathbf{k}}$. Коммутатор $[\widehat{\mathcal{H}}_{\text{int}}, c_{\mathbf{p},\mathbf{k}}]$ описывает динамику флуктуации плотности (8.

16).

Выразим операторы $\tilde{\rho}_k, c_{\mathbf{p},\mathbf{k}}^+$ и $c_{\mathbf{p},\mathbf{k}}$ через фермиевские операторы, согласно (8.15), (8.16), подставим в интересующий нас коммутатор, и вычислим его, пользуясь фермионными коммутационными соотношениями.

Мы не будем выписывать результат явно, а заметим лишь, что поскольку оператор $\widehat{\mathcal{H}}_{\text{int}}$ 4-го порядка по фермиевским операторам а $c_{\mathbf{p},\mathbf{k}}^+$ и $c_{\mathbf{p},\mathbf{k}}$ — 2-го, результат будет содержать члены 2-го и 4-го порядка по a_p, a_p^+

Исключим из коммутатора все члены, содержащие операторы пар с $\mathbf{k}' \neq \mathbf{k}$. Эти члены либо не сохраняют число пар, либо описывают одновременные переходы с участием нескольких пар ⁵. Получающееся приближенное выражение для коммутатора имеет вид

$$[\widehat{\mathcal{H}}_{\text{int}}, c_{\mathbf{p},\mathbf{k}}] = -V_k \tilde{\rho}_k, [\widehat{\mathcal{H}}_{\text{int}}, c_{\mathbf{p},\mathbf{k}}^+] = V_k \tilde{\rho}_k^+$$

Физическим основанием для процедуры, примененной выше к оператору плотности и к коммутаторам $[\widehat{\mathcal{H}}_{\text{int}}, c_{\mathbf{p},\mathbf{k}}]$, является наблюдение, заключающееся в том, что время жизни пары с малой энергией становится очень большим при уменьшении энергии.

Поэтому при рассмотрении коммутаторов законно пренебречь процессами, не сохраняющими число пар и приводящими к превращению одной пары в несколько.

коммутаторы $c_{\mathbf{p},\mathbf{k}}$

Рассмотрим теперь коммутаторы операторов $c_{\mathbf{p},\mathbf{k}}$ и $c_{\mathbf{p}',\mathbf{k}'}^+$. Используя определение (8.15), получаем

$$[c_{\mathbf{p},\mathbf{k}}, c_{\mathbf{p}',\mathbf{k}'}^+] = \delta_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} a_{\mathbf{p}'+\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{p}+\mathbf{k}} + \delta_{\mathbf{p}'+\mathbf{k}', \mathbf{p}+\mathbf{k}} a_{\mathbf{p}}^+ a_{\mathbf{p}'}$$

причем $\mathbf{p} \in R_k, \mathbf{p}' \in R_{k'}$. Применяя приближение случайных фаз, необходимо выделить в правой части (8.

18) члены, не создающие новых пар при действии на основное состояние или на состояние с уже имеющимся небольшим количеством пар.

Это достигается заменой правой части (8.

18) на среднее, взятое по основному состоянию.

В результате коммутатор $[c_{\mathbf{p},\mathbf{k}}, c_{\mathbf{p}',\mathbf{k}'}^+]$ оказывается c -числом:

$$[c_{\mathbf{p},\mathbf{k}}, c_{\mathbf{p}',\mathbf{k}'}^+] = \delta_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}, \quad [c_{\mathbf{p},\mathbf{k}}, c_{\mathbf{p}',\mathbf{k}'}] = 0$$

(Второй коммутатор в (8.

19) получается аналогично.

) Таким образом, мы установили, что операторы рождения пар удовлетворяют бозевским коммутационным соотношениям.

Отметим, что найденные выше коммутаторы (8.

17) могут быть получены непосредственно из (8.

19) и найденного выше выражения $\widehat{\mathcal{H}}_{\text{int}} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{k}} \tilde{\rho}_{\mathbf{k}} \tilde{\rho}_{-\mathbf{k}}$. Таким образом, приближение случайных фаз оказывается самосогласованным.

Займемся теперь оператором кинетической энергии $\widehat{\mathcal{H}}_0 = \sum_{\mathbf{p}} (p^2/2m) a_{\mathbf{p}}^+ a_{\mathbf{p}}$. Его коммутаторы с операторами рождения и уничтожения пар нетрудно вычислить точно:

$$[\widehat{\mathcal{H}}_0, c_{\mathbf{p},\mathbf{k}}^+] = \omega_{\mathbf{p},\mathbf{k}} c_{\mathbf{p},\mathbf{k}}^+, \quad [\widehat{\mathcal{H}}_0, c_{\mathbf{p},\mathbf{k}}] = -\omega_{\mathbf{p},\mathbf{k}} c_{\mathbf{p},\mathbf{k}}$$

где $\omega_{\mathbf{p},\mathbf{k}} = (\mathbf{p} + \mathbf{k})^2/2m - \mathbf{p}^2/2m$. Попытаемся представить оператор кинетической энергии через операторы пар $c_{\mathbf{p},\mathbf{k}}^+$ и $c_{\mathbf{p},\mathbf{k}}$ таким образом, чтобы это представление обеспечивало правильные коммутационные соотношения (8).

20).

Для этого достаточно просто взять сумму по $\mathbf{p}$ и $\mathbf{k}$ от $\omega_{\mathbf{p},\mathbf{k}} c_{\mathbf{p},\mathbf{k}}^+ c_{\mathbf{p},\mathbf{k}}$. Заметим, что условие $\mathbf{p} \in R_k$ обеспечивает положительность $\omega_{\mathbf{p},\mathbf{k}}$.

Вследствие всего сказанного выше, гамильтониан системы можно представить в следующей эквивалентной форме:

$$\widehat{\mathcal{H}}_{\text{RPA}} = \sum_{\mathbf{k}} \left(\sum_{\mathbf{p} \in R_k} \omega_{\mathbf{p},\mathbf{k}} c_{\mathbf{p},\mathbf{k}}^+ c_{\mathbf{p},\mathbf{k}} + \frac{1}{2} V_{\mathbf{k}} \tilde{\rho}_{\mathbf{k}} \tilde{\rho}_{-\mathbf{k}} \right)$$

Это выражение квадратично по бозе-операторам $c_{\mathbf{p},\mathbf{k}}$ и $c_{\mathbf{p},\mathbf{k}}^+$ и поэтому его изучение оказывается весьма простой задачей.

Удобно перейти к каноническим операторам координат и импульсов осцилляторов:

$$\begin{aligned} \varphi_{\mathbf{p},\mathbf{k}} &\equiv \varphi_{-\mathbf{p},-\mathbf{k}}^+ = (2\omega_{\mathbf{p},\mathbf{k}})^{-1/2} (c_{\mathbf{p},\mathbf{k}} + c_{-\mathbf{p},-\mathbf{k}}^+) \\ \pi_{\mathbf{p},\mathbf{k}} &\equiv \pi_{-\mathbf{p},-\mathbf{k}}^+ = i \left(\frac{1}{2} \omega_{\mathbf{p},\mathbf{k}} \right)^{1/2} (c_{\mathbf{p},\mathbf{k}}^+ - c_{-\mathbf{p},-\mathbf{k}}) \end{aligned}$$

В представлении осцилляторов оператор кинетической энергии есть сумма невзаимодействующих осцилляторов ⁶:

$$\widehat{\mathcal{H}}_0 = \sum_{\mathbf{k}; \mathbf{p} \in R_k} \frac{1}{2} (\pi_{\mathbf{p},\mathbf{k}}^+ \pi_{\mathbf{p},\mathbf{k}} + \omega_{\mathbf{p},\mathbf{k}}^2 \varphi_{\mathbf{p},\mathbf{k}}^+ \varphi_{\mathbf{p},\mathbf{k}})$$

Взаимодействие в этом представлении записывается так:

$$\widehat{\mathcal{H}}_{\text{int}} = \sum_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{k}} \left(\sum_{\mathbf{p} \in R_k} \omega_{\mathbf{p},\mathbf{k}}^{1/2} \varphi_{\mathbf{p},\mathbf{k}}^+ \right) \left(\sum_{\mathbf{p}' \in R_k} \omega_{\mathbf{p}',\mathbf{k}}^{1/2} \varphi_{\mathbf{p}',\mathbf{k}} \right)$$

Теперь можно диагонализировать гамильтониан $\widehat{\mathcal{H}}_0 + \widehat{\mathcal{H}}_{\text{int}}$ с помощью канонического преобразования и найти нормальные моды колебаний системы.

Получающийся спектр частот нормальных колебаний состоит из двух компонент (рис. 8.

2).

Первая компонента - непрерывный спектр $\omega = \omega_{\mathbf{p},\mathbf{k}}$, совпадающий со спектром невзаимодействующей системы.

Вторая компонента - коллективная мода с законом дисперсии $\omega(\mathbf{k})$, определяемым из уравнения

$$1 = V_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{p} \in R_k} \frac{2\omega_{\mathbf{p},\mathbf{k}}}{\omega^2 - \omega_{\mathbf{p},\mathbf{k}}^2}$$

Это выражение справедливо для бесспиновых частиц.

В случае частиц со спином $1/2$, суммирование по спинам приводит к дополнительному множителю 2 в правой части (8.

26).

В задаче 44 будет показано, что при малых $|\mathbf{k}| \ll p_0$ выражение (8.

26) тождественно дисперсионному соотношению для коллективных мод, полученному из кинетического уравнения ферми-жидкости (8.

7).

В случае кулоновского взаимодействия, $V_{\mathbf{k}} = 4\pi e^2/\mathbf{k}^2$, коллективные возбуждения представляют собой плазменные волны, имеющие конечную частоту $\omega_0 = (4\pi e^2 n/m)^{1/2}$ при $\mathbf{k} \rightarrow 0$.

Плазменные колебания существуют в конечном интервале $0 \leq |\mathbf{k}| < k_{\max}$, причем их частота выше верхней границы непрерывного спектра.

P_r и $|\mathbf{k}| \geq k_{\max} \geq (4\pi e^2 \nu)^{1/2}$ ветвь плазменных колебаний вливается в непрерывный спектр (см.

задачу 44).

В этой области частота ω , определяемая из дисперсионного уравнения (8.

26), оказывается комплексной, т.

е.

колебания приобретают конечное затухание.

Коллективные возбуждения, полученные в приближении случайных фаз, оказываются такими же, как в теории ферми-жидкости Ландау.

Некоторое отличие имеется только в поведении, предсказываемом в области больших $|\mathbf{k}| > k_{\max}$, где теория ферми-жидкости теряет применимость, поскольку $1/k_{\max}$ - это размер квазичастицы.

Если взаимодействие слабое, то приближение случайных фаз дает правильный ответ даже при $|\mathbf{k}| \geq k_{\max}$.

Однако, приближение случайных фаз, основывающееся на гамильтониане электрон-дырочных пар, неприменимо в случае сильного взаимодействия.

А теория ферми-жидкости, полученная весьма общим феноменологическим образом, имеет смысл и при сильном взаимодействии, и утверждает, что при $|\mathbf{k}| \leq k_{\max}$ можно пользоваться квадратичным гамильтонианом пар $\widehat{\mathcal{H}}_{\text{RPA}}$ с перенормированными константами, которые определяются функцией Ландау.

Таким образом, пертурбативное приближение случайных фаз и феноменологическая теория ферми-жидкости прекрасно дополняют друг друга.

10.3.2 Zero Sound

задача 15 дз, мб Бурмистров, задача 10

ИТОГОВЫЕ УСЛОВИЯ И ВЕЛИЧИНЫ

ВВЕДЕНИЕ

Неравновесные состояния ферми-жидкости описываются функцией распределения квазичастиц, зависящей от координат, импульсов и времени.

При нулевой или достаточно низкой температуре столкновения квазичастиц настолько редки, что ими можно полностью пренебречь.

Пользуясь кинетическим уравнением для функции распределения, определить условие, когда возможно распространение волн бесстолкновительного нуля-звука, и его скорость.

Считать, что функция Ландау для взаимодействия квазичастиц не зависит от импульсов квазичастиц.

В отсутствие столкновений между частицами справедлива теорема Лиувилля о тождественном обращении в нуль полной производной по времени от функции распределения

$$\frac{dn}{dt} = \frac{\partial n}{\partial t} + \{H, n\} = 0$$

условия возникновения нуль-звука

условия возникновения нуль-звука имеют вид:

(??)

действительно.

кинетическое уравнение для ферми жидкости

Стандартный вид кинетического уравнения для ферми жидкости есть уравнение на $\nu(\theta)$:

$$(\omega - \mathbf{k}\mathbf{v})\nu(\theta) = \mathbf{k}\mathbf{v}F_0 \int \nu(\theta') \frac{d\Omega_{\theta'}}{4\pi},$$

где $\nu(\theta)$ есть член в $\delta n(\mathbf{p}) = n'_0(\varepsilon)\nu(\theta)$ Здесь

$$F_0 = \frac{p_F^2}{\pi^2 \hbar^3 v_F} f_0 = \frac{m^* p_F}{\pi^2 \hbar^3} f_0$$

безразмерный параметр Ландау, θ - угол между векторами $\mathbf{v}$ и $\mathbf{k}$, $m^* p_F / \pi^2 \hbar^3$ - плотность состояний и $d\Omega = 2\pi \sin \theta d\theta$ - элемент телесного угла.

Покажем переход к нему из исходного вида уравнения Больцмана.

Рассмотрим малые отклонения функции распределения $\delta n = n - n_0$ от равновесной функции n_0 .

Тогда также изменяется и энергия квазичастиц $H = H(\mathbf{p}, \mathbf{r})$

$$n = n_0(\mathbf{p}) + \delta n(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) \quad \text{и} \quad H = \varepsilon_0(\mathbf{p}) + \delta \varepsilon[n(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)].$$

В линейном приближении по δn и $\delta \varepsilon$ из уравнения Лиувилля найдем

$$\frac{\partial \delta n}{\partial t} + \frac{\partial \delta n}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial \varepsilon_0}{\partial \mathbf{p}} - \frac{\partial n_0}{\partial \mathbf{p}} \frac{\partial \delta \varepsilon}{\partial \mathbf{r}} = 0$$

Скорость квазичастиц равна $\mathbf{v} = \partial \varepsilon_0 / \partial \mathbf{p}$ и производная функции распределения имеет вид $\partial n_0 / \partial \mathbf{p} = \mathbf{v} \partial n_0 / \partial \varepsilon$.

Поэтому уравнение Лиувилля имеет вид:

$$\frac{\partial \delta n}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial \delta n}{\partial \mathbf{r}} - \mathbf{v} \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} \frac{\partial \delta \varepsilon}{\partial \mathbf{r}} = 0$$

Решение ищем в виде бегущей волны

$$\delta n(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = \delta n(\mathbf{p}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r} - i\omega t}$$

где $\mathbf{k}$ - волновой вектор и ω - частота колебаний.

Подставим также изменение энергии квазичастиц через функцию взаимодействия $f(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$, ведь известно, что дается выражением

$$\delta \varepsilon = \int f(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \delta n(\mathbf{p}') e^{i\mathbf{k}\mathbf{r} - i\omega t} d\tau_{p'},$$

где $d\tau_{p'} = 2 \frac{d^3 p'}{(2\pi\hbar)^3}$.

Теперь кинетическое уравнение примет вид:

$$(\omega - \mathbf{k}\mathbf{v})\delta n(\mathbf{p}) = -(\mathbf{k}\mathbf{v})\frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} \int f(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \delta n(\mathbf{p}') d\tau_{p'}$$

Упростим его, положив $f(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = f_0 = \text{const}$ и температуры $T = 0$, тогда

$$(\omega - \mathbf{k}\mathbf{v})\delta n(\mathbf{p}) = -(\mathbf{k}\mathbf{v})\frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} f_0 \int \delta n(\mathbf{p}') d\tau_{p'}$$

(место подумать)

Поскольку $n'_0(\varepsilon) = -\delta(p - p_F)/v_F$, поправка $\delta n(\mathbf{p})$ отлична от нуля только на поверхности Ферми, т.е. при $|\mathbf{p}| = p_F$ и $|\mathbf{v}| = v_F$.

Из вида уравнения можно сказать, что решение имеет форму $\delta n(\mathbf{p}) = n'_0(\varepsilon)\nu(\theta)$, где θ - угол между векторами $\mathbf{v}$ и $\mathbf{k}$, поэтому приходим к уравнению на $\nu(\theta)$:

$$(\omega - \mathbf{k}\mathbf{v})\nu(\theta) = \mathbf{k}\mathbf{v}F_0 \int \nu(\theta') \frac{d\Omega_{\theta'}}{4\pi},$$

Здесь

$$F_0 = \frac{p_F^2}{\pi^2 \hbar^3 v_F} f_0 = \frac{m^* p_F}{\pi^2 \hbar^3} f_0$$

это безразмерный параметр Ландау, $m^* p_F / \pi^2 \hbar^3$ - плотность состояний и $d\Omega = 2\pi \sin \theta d\theta$ - элемент телесного угла.

Далее введем $s = \frac{\omega}{v_F k}$ и запишем

$$\frac{\nu(\theta)}{F_0} = \frac{\cos \theta}{s - \cos \theta} \int \nu(\theta') \frac{d\Omega_{\theta'}}{4\pi}$$

выражение для параметра Ландау

оно имеет вид:

$$\frac{1}{F_0} = \frac{s}{2} \ln \frac{s+1}{s-1} - 1$$

Действительно.

Из условия самосогласования

$$\frac{1}{F_0} \int \nu(\theta) \frac{d\Omega_{\theta}}{4\pi} = \int \frac{\cos \theta}{s - \cos \theta} \frac{d\Omega_{\theta}}{4\pi} \left(\int \nu(\theta') \frac{d\Omega_{\theta'}}{4\pi} \right)$$

находим

$$\frac{1}{F_0} = \int_0^\pi \frac{\cos \theta}{s - \cos \theta} \frac{2\pi \sin \theta d\theta}{4\pi} = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \frac{x dx}{s - x}$$

и получаем

$$\frac{1}{F_0} = \frac{s}{2} \ln \frac{s+1}{s-1} - 1$$

спектр нуль-звука

спектр нуль-звука имеет вид:
???

$$\omega(k) = s(F_0) v_F k$$

находится спектр из анализа дисперсионного уравнения

$$\frac{1}{F_0} = \frac{s}{2} \ln \frac{s+1}{s-1} - 1$$

имеет действительные решения только при $F_0 > 0$, так как правая часть изменяется в пределах $(+\infty, 0)$ при изменении s от 1 до $+\infty$.

Таким образом, при $F_0 > 0$, что отвечает отталкиванию квазичастиц на ферми-поверхности, дисперсионное уравнение имеет одно действительное решение $s = s(F_0)$, которое соответствует незатухающей волне со звуковым спектром

$$\omega(k) = s(F_0) v_F k$$

Такие звуковые волны в ферми-жидкости называются бесстолкновительным звуком или нуль-звуком.

Если $F_0 \rightarrow +0$, то $s \rightarrow 1$.

Для $F_0 \gg 1$, $s \approx \sqrt{F_0/3}$.

Следовательно, незатухающие волновые процессы возможны только при условии, что скорость квазичастиц v_F не превышает фазовую скорость волны ω/k .

В жидком ^3He значение $F_0 = 10,8$ и скорость нуль-звука примерно 197 м/с.

В процессе распространения нуль-звука поверхность Ферми вытягивается в направлении распространения волны и сплющивается в противоположном направлении.

При $F_0 < 0$ действительных решений дисперсионного уравнения нет и моды колебаний ферми-поверхности - затухающие.

11 Basics of Field Theory of Non-Equilibrium Systems by Kamenev

11.1 Introduction

11.1.1 1.1 Closed Time Contour

Consider a quantum many-body system governed by a time-dependent Hamiltonian $\hat{H}(t)$. Let us assume that in the distant past $t = -\infty$ the system was in a state specified by a many-body density matrix $\hat{\rho}(-\infty)$. The precise form of the latter is of no importance. It may be, for example, the equilibrium density matrix associated with the Hamiltonian $\hat{H}(-\infty)$. We shall also assume that the time-dependence of the Hamiltonian is such that at $t = -\infty$ the particles were noninteracting. The interactions are then adiabatically switched on to reach their actual physical strength sometime prior to the observation time. In addition, the Hamiltonian may contain true time dependence through, for example, external fields or boundary conditions. Due to such true time-dependent perturbations the density matrix is driven away from equilibrium.

The density matrix evolves according to the Von Neumann equation

$$\partial_t \hat{\rho}(t) = -i[\hat{H}(t), \hat{\rho}(t)], \quad (1.1)$$

where we set $\hbar = 1$. It is formally solved with the help of the unitary evolution operator as $\hat{\rho}(t) = \hat{\mathcal{U}}_{t,-\infty} \hat{\rho}(-\infty) [\hat{\mathcal{U}}_{t,-\infty}]^\dagger = \hat{\mathcal{U}}_{t,-\infty} \hat{\rho}(-\infty) \hat{\mathcal{U}}_{-\infty,t}$, where the $\dagger$ denotes Hermitian conjugation. The evolution operator obeys

$$\partial_t \hat{\mathcal{U}}_{t,t'} = -i\hat{H}(t)\hat{\mathcal{U}}_{t,t'}; \quad \partial_{t'} \hat{\mathcal{U}}_{t,t'} = i\hat{\mathcal{U}}_{t,t'} \hat{H}(t').$$

Notice that the Hamiltonian operators taken at different moments of time, in general, do not commute with each other. As a result, $\hat{\mathcal{U}}_{t,t'}$ must be understood as an infinite product of incremental evolution operators with instantaneous locally constant Hamiltonians

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{U}}_{t,t'} &= \lim_{N \rightarrow \infty} e^{-i\hat{H}(t-\delta_t)\delta_t} e^{-i\hat{H}(t-2\delta_t)\delta_t} \dots e^{-i\hat{H}(t-N\delta_t)\delta_t} e^{-i\hat{H}(t')\delta_t} \\ &= \mathbb{T} \exp \left(-i \int_{t'}^t \hat{H}(t) dt \right) \end{aligned} \quad (1.2)$$

where an infinitesimal time-step is $\delta_t = (t - t')/N$ and to shorten the notations the infinite product is abbreviated as the time-ordered, or $\mathbb{T}$ -exponent.

One is usually interested to know an expectation value of some observable $\hat{\mathcal{O}}$ (say density or current operator) at a time t .¹ It is defined as

$$\langle \hat{\mathcal{O}} \rangle(t) \equiv \frac{\text{Tr} \{ \hat{\mathcal{O}} \hat{\rho}(t) \}}{\text{Tr} \{ \hat{\rho}(t) \}} = \frac{1}{\text{Tr} \{ \hat{\rho}(t) \}} \text{Tr} \{ \hat{\mathcal{U}}_{-\infty,t} \hat{\mathcal{O}} \hat{\mathcal{U}}_{t,-\infty} \hat{\rho}(-\infty) \}, \quad (1.3)$$

where the trace is performed over many-body Hilbert space and in the last equality we cyclically permuted the $\hat{\mathcal{U}}_{-\infty,t}$ operator under the trace sign. The expression under the last trace describes (read from right to left) evolution from $t = -\infty$, where the initial density matrix is specified, toward t , where the observable is calculated, and then back to $t = -\infty$. Therefore, calculation of an observable implies evolving the initial state both forward and backward.

Such forward-backward evolution is avoided in the equilibrium quantum field theory with a special trick. Let us recall how it works, for example, in the zero-temperature equilibrium formalism [2]. The latter deals with the ground state expectation values of the type $\langle \text{GS} | \hat{\mathcal{O}} | \text{GS} \rangle$, where $|\text{GS}\rangle$ is a ground state of an interacting many-body system. It is obtained from the known and simple ground state of the corresponding noninteracting system $|0\rangle$ by acting on the latter with the evolution operator $|\text{GS}\rangle = \hat{\mathcal{U}}_{t,-\infty} |0\rangle$. Since we are dealing with the equilibrium situation, the only time dependence allowed for the Hamiltonian is an adiabatic switching of the interactions on and off in the distant past and distant future, respectively. The evolution operator therefore describes the evolution of a simple noninteracting ground state $|0\rangle$ toward $|\text{GS}\rangle$ upon adiabatic switching of the interactions and thus $\langle \text{GS} | \hat{\mathcal{O}} | \text{GS} \rangle = \langle 0 | \hat{\mathcal{U}}_{-\infty,t} \hat{\mathcal{O}} \hat{\mathcal{U}}_{t,-\infty} | 0 \rangle$.

Now comes the trick: one argues that

$$\hat{\mathcal{U}}_{+\infty,-\infty} |0\rangle = e^{iL} |0\rangle. \quad (1.4)$$

That is, evolution of the noninteracting ground state upon adiabatic switching of the interactions on and subsequent adiabatic switching them off brings the system back into the state $|0\rangle$, up to a phase factor e^{iL} . This statement is based on the belief that the adiabatic perturbation keeps the system in its (evolving) ground state at all times. If so, in view of normalization $\langle 0 | 0 \rangle = 1$, the only

possible change is the phase of the noninteracting ground state $e^{iL} = \langle 0 | \hat{\mathcal{U}}_{+\infty,-\infty} | 0 \rangle$. Similarly $\langle 0 | \hat{\mathcal{U}}_{+\infty,-\infty} = \langle 0 | e^{iL}$. Accepting this, one proceeds as follows:

⁰¹ We work in the Schrödinger picture, where observables are t -independent operators, while the wavefunctions and the density matrix evolve.

$$\begin{aligned}
\langle \text{GS} | \hat{O} | \text{GS} \rangle &= \langle 0 | \hat{\mathcal{U}}_{-\infty, t} \hat{O} \hat{\mathcal{U}}_{t, -\infty} | 0 \rangle = e^{-iL} \langle 0 | e^{iL} \hat{\mathcal{U}}_{-\infty, t} \hat{O} \hat{\mathcal{U}}_{t, -\infty} | 0 \rangle \\
&= e^{-iL} \langle 0 | \hat{\mathcal{U}}_{+\infty, -\infty} \hat{\mathcal{U}}_{-\infty, t} \hat{O} \hat{\mathcal{U}}_{t, -\infty} | 0 \rangle = \frac{\langle 0 | \hat{\mathcal{U}}_{+\infty, t} \hat{O} \hat{\mathcal{U}}_{t, -\infty} | 0 \rangle}{\langle 0 | \hat{\mathcal{U}}_{+\infty, -\infty} | 0 \rangle} \quad (1.5)
\end{aligned}$$

where in the last equality we used $\hat{\mathcal{U}}_{+\infty, -\infty} \hat{\mathcal{U}}_{-\infty, t} = \hat{\mathcal{U}}_{+\infty, t}$, which is an immediate consequence of Eq. (1.2). The result of this procedure is that one needs to consider only the forward evolution. Indeed, the numerator in the last expression (being read from right to left) calls for evolving the noninteracting ground state $|0\rangle$ from the distant past to the observation time, where the observable operator acts, and then proceeding toward the distant future, where the overlap with the same known state $\langle 0|$ is evaluated.

The similar strategy works in the finite-temperature equilibrium formalism [11, 2, 4]. There, one treats the equilibrium density matrix $e^{-\beta \hat{H}}$, where $\beta = 1/T$ is the inverse temperature, as the evolution operator in the imaginary time τ . The latter is defined on a finite interval $0 \leq \tau < \beta$. The observables (or correlation functions) are also evaluated at imaginary time points $\tau_1, \tau_2, \dots$ and the result must be analytically continued back to the real-time axis. One may argue that, since the adiabatic switching of interactions does not drive the system out of equilibrium, a statement similar to Eq. (1.4) still holds. As a result one is again left to describe only the forward evolution, albeit along the finite time interval in the imaginary direction.

Let us mention that elimination of the backward evolution comes with a price: the normalization denominator in the last expression in Eq. (1.5). It offsets the phase accumulation e^{iL} of the noninteracting ground state $|0\rangle$. In diagrammatic language it amounts to subtracting the so-called disconnected or vacuum loop diagrams. This denominator is a serious liability in the theory of disordered systems. The reason is that the accumulated phase e^{iL} sensitively depends on a specific realization of the disorder (which may be thought of as being absent at $t \rightarrow \pm\infty$ and adiabatically switched on and off in the process of evolution). Therefore, the denominator absolutely must be included in any disorder averaging procedure, which complicates the treatment in a very substantial way.

The much more serious trouble with the outlined procedure is that Eq. (1.4) does not work in a non-equilibrium situation. If the Hamiltonian $\hat{H}(t)$ contains nonadiabatic time-dependent external fields, boundary conditions, and so on, the evolution drives the system away from equilibrium. Even if all such fields are eventually switched off in the distant future, there is no guarantee that the system returns to its ground (or equilibrium) state. Therefore, acting with the operator $\hat{\mathcal{U}}_{+\infty, -\infty}$ on the initial ground (or equilibrium) state results in an unknown superposition of excited states. As a result, the backward evolution, inherent to Eq. (1.3), can't be eliminated.

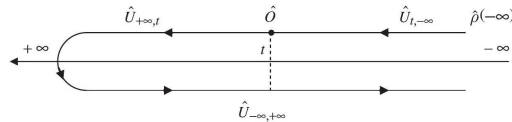


Figure 1.1 Closed time contour $\mathcal{C}$. Evolution along such a contour is described by Eq. (1.6).

Nevertheless, it is still convenient to extend the evolution in Eq. (1.3) toward $t = +\infty$ and then back to t . This is achieved with the help of the trivial identity $\hat{\mathcal{U}}_{t, +\infty} \hat{\mathcal{U}}_{+\infty, t} = \hat{1}$. Inserting it into Eq. (1.3) and using $\hat{\mathcal{U}}_{-\infty, t} \hat{\mathcal{U}}_{t, +\infty} = \hat{\mathcal{U}}_{-\infty, +\infty}$, one finds

$$\langle \hat{O} \rangle(t) = \frac{1}{\text{Tr} \{ \hat{\rho}(-\infty) \}} \text{Tr} \{ \hat{\mathcal{U}}_{-\infty, +\infty} \hat{\mathcal{U}}_{+\infty, t} \hat{O} \hat{\mathcal{U}}_{t, -\infty} \hat{\rho}(-\infty) \}. \quad (1.6)$$

Here we also used the fact that, according to the Von Neumann equation (1.1), the trace of the initial density matrix is unchanged under the unitary evolution. Equation (1.6) describes evolution along the closed time contour $\mathcal{C}$ depicted in Fig. 1.1. The observable $\hat{O}$ is inserted

at time t , somewhere along the forward branch of the contour. Notice that, by inserting the operator $\hat{\mathcal{U}}_{t,+\infty}\hat{\mathcal{U}}_{+\infty,t} = \hat{1}$ to the right of $\hat{\mathcal{O}}$ in Eq. (1.3), one could equally well arrange to have the observable on the backward branch of the contour. As we shall see, the most convenient choice is to take a half sum of these two equivalent representations.

Evolution along the closed time contour $\mathcal{C}$ is the central subject of this book. The fact that the field theory can be constructed with the time ordering along such a contour was first realized by Schwinger [12] and further developed in [25, 26]. About the same time Konstantinov and Perel [13] developed a diagrammatic technique, based on the time contour containing forward and backward branches in the real-time direction along with the imaginary time portion of length β . The formalism was significantly advanced, in particular its utility to derive the kinetic theory, in the seminal book of Kadanoff and Baym [1]. Independently Keldysh [14] (for some of the historic context, see [27]) suggested a formulation that does not rely on imaginary time (and thus on the equilibrium density matrix). He also introduced a convenient choice of variables (Keldysh rotation), which made derivation of the kinetic theory particularly transparent. The time contour without the imaginary time piece, along with the Keldysh variables (which we call "classical" and "quantum"), appear to be by far the most convenient choices for the functional formulation of the theory presented in this book. For this reason we occasionally refer to the construction as the Keldysh technique (this should by no way diminish the credit deserved by the other authors). Reformulation of the theory for the case of fermions, given later by Larkin and Ovchinnikov [28], became universally accepted. In fact, other theories developed about the same time, while not using the time contour explicitly, appear to be close relatives of the Schwinger-Kadanoff-Baym-Keldysh construction. Among them are Feynman and Vernon [29], Wyld's [30] diagrammatic technique for fluid dynamics, and Martin, Siggia, and Rose [31] and DeDominicis' [32] calculus for classical stochastic systems.

The central object of the theory is the evolution operator along the closed contour $\hat{\mathcal{U}}_{\mathcal{C}} = \hat{\mathcal{U}}_{-\infty,+\infty}\hat{\mathcal{U}}_{+\infty,-\infty}$. If the Hamiltonian is the same on the forward and backward branches, then the forward-backward evolution of any state brings it back exactly to the original state. (Not even a phase factor is accumulated; indeed, any phase gained on the forward branch is exactly "unwound" on the backward branch.) As a result $\hat{\mathcal{U}}_{\mathcal{C}} = \hat{1}$ and the partition function, defined as $Z \equiv \text{Tr} \{ \hat{\mathcal{U}}_{\mathcal{C}} \hat{\rho}(-\infty) \} / \text{Tr} \{ \hat{\rho}(-\infty) \}$, is identically equal to unity, $Z = 1$. Nevertheless, the partition function is a convenient object to develop the functional representation, and the normalization identity $Z = 1$ is a useful check of its consistency. For this reason we shall use it widely in what follows.

To insert an observable somewhere along the forward (as prescribed by Eq. (1.6)) or backward branches it is convenient to modify the Hamiltonian $\hat{H}(t)$ by adding the source term $\hat{H}_V^\pm(t) \equiv \hat{H}(t) \pm \hat{\mathcal{O}}V(t)$, where the plus (minus) sign refers to the forward (backward) part of the contour. Now, since the Hamiltonian is different on the two branches, the evolution operator along the contour $\hat{\mathcal{U}}_{\mathcal{C}}[V] \neq \hat{1}$ becomes nontrivial and so does the generating function

$$Z[V] \equiv \frac{\text{Tr} \{ \hat{\mathcal{U}}_{\mathcal{C}}[V] \hat{\rho}(-\infty) \}}{\text{Tr} \{ \hat{\rho}(-\infty) \}} \quad (1.7)$$

The expectation value of the observable $\hat{\mathcal{O}}$, given by Eq. (1.6) (or rather by a half sum of the observable inserted along the forward and backward branches) may be found as $\langle \hat{\mathcal{O}} \rangle(t) = (i/2) \delta Z[V] / \delta V(t)|_{V=0}$. This expression should be compared with the equilibrium technique [2, 4], where the observables are given by variational derivatives of the logarithm of the generating (or partition) function. In our case, since $Z = Z[0] = 1$, the presence of the logarithm is optional.² Knowledge of

⁰² It is worth mentioning that the denominators in Eqs. (1.5) and (1.7) have very different status. In the latter case $\text{Tr} \{ \hat{\rho}(-\infty) \}$ refers entirely to the distant past, when both interactions and disorder are switched

the generating function allows one thus to find observables of interest. Therefore, after developing the functional formalism for the partition function, we extend it to include the generating function as well.

11.1.2 1.2 Brief Outline of the Book

Part I is devoted to systems with one or few degrees of freedom. It is used as a pedagogical device to develop the functional integral treatment of the evolution along the closed time contour, introduced previously. There are several important steps that need to be dealt with within the time-discretized treatment, before the continuous notations turn into a practical theoretical device. We take extra care exposing those steps in Chapter 2 for Von Neumann unitary evolution and then again in Chapter 5 in Lindblad dissipative setting. To illustrate the utility of the developed framework we apply it to a number of quantum mechanical problems, which include treatment of systems in contact with classical or quantum bath. A particular focus is on non-perturbative phenomena, such as tunneling in a time-dependent potential, or quantum activation, where the functional integral treatment is truly indispensable.

Chapter 4 is used to demonstrate that the classical limit of the closed time contour theory yields the Martin-Siggia-Rose-DeDominicis framework for stochastic models. We use this observation as an opportunity to derive Langevin and Fokker-Planck equations, which are widely employed through the rest of the book. Once again, the developed machinery is deployed to treat a number of examples. Those include escape from a metastable state, full counting statistics, reaction models, fluctuation relations, and time-dependent perturbations in stochastic systems. These subjects resurface in subsequent chapters.

Part II extends the machinery to many-body quantum Bose systems as well as classical stochastic models. Chapter 6 serves to adopt the standard arsenal of the quantum field theory to the closed time contour setting. This includes the diagrammatic technique and the Dyson equation. Specifically we focus on the realization that a particular component of the Dyson equation yields the quantum kinetic equation. We present several pedagogical examples of how the kinetic equation is derived from the first principles and is used in practice. In Chapter 7, the classical collisionless plasma is used as a vehicle to expose some useful concepts: collective modes (plasmons), Landau damping, random phase approximation (RPA), Hubbard-Stratonovich transformation, and coupled kinetic equations for collective modes and quasiparticles degrees of freedom.

Chapter 8 employs the machinery to discuss kinetics of the Bose-Einstein condensation. Here we derive the mean-field Gross-Pitaevskii framework as the stationary point of the Keldysh action and Bogoliubov collective modes as its linearized excitations. We then develop the kinetic theory of coupled collective modes and quasiparticles. Chapter 9 is devoted to the dynamics of classical phase transitions. It includes nucleation of critical droplets in first-order transitions as well as dynamics of continuous phase transitions, starting from equilibrium transitions and their Hohenberg-Halperin classification. We then turn to essentially non-equilibrium phase transitions, which include absorbing state transitions in reaction-diffusion models and Kardar-Parisi-Zhang (KPZ) theory of the roughening transition on growing interfaces. The 1 d KPZ

off. It is therefore a simple constant, which may be easily evaluated. In the former case $\langle 0 | \hat{U}_{+\infty, -\infty} | 0 \rangle$ involves evolution of the ground state upon switching on and off the interactions and disorder. It thus depends on both disorder and interactions and requires a separate calculation. The absence of a disorder-dependent denominator makes the closed time contour formalism especially suitable to deal with the averaging over the quenched disorder. The fact that observables do not require the logarithm is another manifestation of the absence of the nontrivial denominator.

equation is used to illustrate concepts of the macroscopic fluctuation theory (MFT), geared toward rare events statistics in stochastic models.

The rest of the book, Parts III and IV, is devoted to fermions. Chapter 10 extends treatment of Chapters 2 and 6 to fermionic systems, using Grassmann functional integrals on the closed time contour. Chapter 11 serves to derive the kinetic equation for interacting fermions and uses it to introduce a hydrodynamic description of the Fermi liquid. Chapter 12 deals with various aspects of the fermionic kinetic theory. Those include treatment of fermions in presence of a Berry curvature, kinetics of periodically driven Floquet systems, stochastic Boltzmann-Langevin terms in the kinetic equation. Finally we discuss the "butterfly effect" with the out-of-time-order correlation functions (OTOC), which requires four-branch time contour.

In Chapter 13 we use fermionic formalism to discuss non-equilibrium quantum transport. In particular we derive the Landauer formula for tunneling conductance, the Lesovik formula for shot-noise, the Levitov's result for the full counting statistics of transmitted charge, the Brouwer formula for adiabatic pumping of charge, and, following Nazarov and Tobiska, the exact fluctuation relation and its consequences. We also deal with the spin transport, deriving the Slonczewski-Berger spin-torque term in the Landau-Lifshitz equation along with the spin-torque noise and associated Gilbert damping.

Part IV of the book addresses fermions in the presence of a quenched disorder. The main technical tool of this part is Keldysh nonlinear sigma-model (NLSM), which is painstakingly developed in Chapter 14 and applied in various settings in this and subsequent chapters. Chapter 14 features weak-localization along with the scaling theory of Anderson localization. Chapter 15 deals with the mesoscopic phenomena ranging from spectral statistics and universal conductance fluctuations (UCF) to full counting statistics in tunneling, diffusive, and quantum chaotic systems.

We then include electron-electron interactions in disordered systems, which lead to singular behavior in the density of states (zero bias anomaly) and conductivity (Altshuler-Aronov corrections). Interactions also yield collision terms to the diffusive quantum kinetic equation. These phenomena are the subject of Chapter 16.

Chapter 17 is devoted to disordered superconductors. We generalize the nonlinear sigma-model to include superconducting correlations. It yields the Usadel equation as its stationary point, which includes equations for the quasiparticle spectrum as well as the quasiparticle kinetic equation for the quasiparticles distribution function. Together with the self-consistency condition they provide a complete framework to study non-equilibrium superconductivity. As examples, we work out the spectrum of the collective (Carlson-Goldman) mode of the superconductor, and derive the time-dependent Ginzburg-Landau theory and fluctuation corrections to the conductivity above the critical temperature. Finally, Chapter 18 deals with electron-phonon interactions in disordered normal metals and superconductors. We derive coupled kinetic equations for electron and phonon degrees of freedom and use them to analyze electron relaxation as well as ultrasound attenuation.

All chapters are equipped with several problems. They are structured as compact guided research projects, which may be suggested to students for an independent exploration. Most of them carry useful supplemental information, which has not yet found its way to textbooks.

11.1.3 How Field Theory is Used in Kinetics?

(I'll write explicitly answer to this question)

11.2 Bosons

The aim of this chapter is to develop a functional integral representation for the evolution operator along the closed time contour. To this end we use an example of a single quantized level populated by bosonic particles. Notations and structures introduced in this chapter are used throughout the rest of the book.

11.2.1 2.1 Bosonic Coherent States

We start by considering a single quantum level occupied by bosonic particles. A many-body state with n bosons is denoted by $|n\rangle$. Such pure number states form a complete orthonormal basis, meaning $\langle n | n' \rangle = \delta_{nn'}$ and $\sum_n |n\rangle\langle n| = \hat{1}$. It is convenient to introduce bosonic annihilation and creation operators, $\hat{b}$ and $\hat{b}^\dagger$, which operate in the many-body Hilbert space of the system according to the following rules:

$$\hat{b}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle; \quad \hat{b}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle. \quad (2.1)$$

By acting on an arbitrary basis state, one may check the following relations:

$$\hat{b}^\dagger \hat{b}|n\rangle = n|n\rangle; \quad \hat{b} \hat{b}^\dagger|n\rangle = (n+1)|n\rangle; \quad [\hat{b}, \hat{b}^\dagger] = \hat{1} \quad (2.2)$$

An extremely useful tool for our purposes is the algebra of bosonic coherent states, which we summarize briefly in this section. A coherent state, parametrized by a complex number ϕ , is defined as a right eigenstate of the annihilation operator with the eigenvalue ϕ :

$$\hat{b}|\phi\rangle = \phi|\phi\rangle; \quad \langle\phi|\hat{b}^\dagger = \bar{\phi}\langle\phi|, \quad (2.3)$$

where the bar denotes complex conjugation. As a result, the matrix elements in the coherent state basis of any normally ordered operator $\hat{H}(\hat{b}^\dagger, \hat{b})$ (i.e. such that all the creation operators are to the left of all the annihilation operators) are given by

$$\langle\phi|\hat{H}(\hat{b}^\dagger, \hat{b})|\phi'\rangle = H(\bar{\phi}, \phi') \langle\phi|\phi'\rangle. \quad (2.4)$$

One may check by direct substitution using Eq. (2.1) that the following linear superposition of the pure number states is indeed the required right eigenstate of the operator $\hat{b}$:

$$|\phi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\phi^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\phi^n}{n!} (\hat{b}^\dagger)^n |0\rangle = e^{\phi \hat{b}^\dagger} |0\rangle, \quad (2.5)$$

where $|0\rangle$ is the vacuum state, $\hat{b}|0\rangle = 0$. Upon Hermitian conjugation, one finds $\langle\phi| = \langle 0|e^{\bar{\phi}\hat{b}} = \sum_n \langle n|\bar{\phi}^n/\sqrt{n!}$. The coherent states are not mutually orthogonal and they form an over-complete basis. The overlap of two coherent states is given by

$$\langle\phi|\phi'\rangle = \sum_{n,n'=0}^{\infty} \frac{\bar{\phi}^n \phi'^{n'}}{\sqrt{n!n'!}} \langle n|n'\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\bar{\phi}\phi')^n}{n!} = e^{\bar{\phi}\phi'}, \quad (2.6)$$

where we employed the orthonormality of the pure number states.

One may express resolution of unity in the coherent states basis. It takes the following form:

$$\hat{1} = \int d[\bar{\phi}, \phi] e^{-|\phi|^2} |\phi\rangle\langle\phi|, \quad (2.7)$$

where $d[\bar{\phi}, \phi] \equiv d(\text{Re } \phi)d(\text{Im } \phi)/\pi$. To prove this relation one may employ the Gaussian integral

$$Z[\bar{J}, J] = \int d[\bar{\phi}, \phi] e^{-\bar{\phi}\phi + \bar{\phi}J + \bar{J}\phi} = e^{\bar{J}J} \quad (2.8)$$

where J is an arbitrary complex number. As its consequence one obtains

$$\int d[\bar{\phi}, \phi] e^{-|\phi|^2} \bar{\phi}^n \phi^{n'} = \frac{\partial^{n+n'}}{\partial J^n \partial \bar{J}^{n'}} Z[\bar{J}, J] \Big|_{\bar{J}=J=0} = n! \delta_{n,n'} \quad (2.9)$$

Substituting Eq. (2.5) and its conjugate into the right-hand side of Eq. (2.7) and employing Eq. (2.9) along with the resolution of unity in the number state basis $\hat{1} = \sum_n |n\rangle \langle n|$, one proves the identity (2.7).

The trace of an arbitrary operator $\hat{\mathcal{O}}$, acting in the space of the occupation numbers, is evaluated as

$$\begin{aligned} \text{Tr}\{\hat{\mathcal{O}}\} &\equiv \sum_{n=0}^{\infty} \langle n | \hat{\mathcal{O}} | n \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \int d[\bar{\phi}, \phi] e^{-|\phi|^2} \langle n | \hat{\mathcal{O}} | \phi \rangle \langle \phi | n \rangle \\ &= \int d[\bar{\phi}, \phi] e^{-|\phi|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \langle \phi | n \rangle \langle n | \hat{\mathcal{O}} | \phi \rangle = \int d[\bar{\phi}, \phi] e^{-|\phi|^2} \langle \phi | \hat{\mathcal{O}} | \phi \rangle \end{aligned} \quad (2.10)$$

where we have employed resolution of unity first in the coherent state basis and second in the number state basis.

Another useful identity is

$$f(\rho) \equiv \langle \phi | \rho^{\hat{b}^\dagger \hat{b}} | \phi' \rangle = e^{\bar{\phi}\phi' \rho} \quad (2.11)$$

The proof is based on the following operator relation: $g(\hat{b}^\dagger \hat{b}) \hat{b} = \hat{b} g(\hat{b}^\dagger \hat{b} - 1)$ valid for an arbitrary function $g(\hat{b}^\dagger \hat{b})$, which is verified by acting on an arbitrary basis vector $|n\rangle$. As a result,

$$\partial_\rho f(\rho) = \langle \phi | \hat{b}^\dagger \hat{b} \rho^{\hat{b}^\dagger \hat{b}-1} | \phi' \rangle = \langle \phi | \hat{b}^\dagger \rho^{\hat{b}^\dagger \hat{b}} \hat{b} | \phi' \rangle = \bar{\phi}\phi' f(\rho)$$

Integrating this differential equation with the initial condition $f(1) = e^{\bar{\phi}\phi'}$, which follows from Eq. (2.6), one proves the identity (2.11).

11.2.2 2.2 Partition Function

Let us consider the simplest many-body system: bosonic particles occupying a single quantum state with the energy ω_0 . Its secondary quantized Hamiltonian has the form

$$\hat{H}(\hat{b}^\dagger, \hat{b}) = \omega_0 \hat{b}^\dagger \hat{b} \quad (2.12)$$

where $\hat{b}^\dagger$ and $\hat{b}$ are bosonic creation and annihilation operators with the commutation relation $[\hat{b}, \hat{b}^\dagger] = \hat{1}$. Let us define the partition function as

$$Z = \frac{\text{Tr}\{\hat{\mathcal{U}}_C \hat{\rho}\}}{\text{Tr}\{\hat{\rho}\}} \quad (2.13)$$

If one assumes that all external fields are exactly the same on the forward and backward branches of the contour, then $\hat{\mathcal{U}}_C = \hat{1}$ and therefore $Z = 1$. The initial density matrix $\hat{\rho} = \hat{\rho}(\hat{H})$ is some operator-valued function of the Hamiltonian. To simplify the derivations one may choose it to be the equilibrium density matrix, $\hat{\rho}_0 = \exp\{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})\} = \exp\{-\beta(\omega_0 - \mu)\hat{b}^\dagger \hat{b}\}$, where

$\beta = 1/T$ is the inverse temperature and μ is the chemical potential. Since arbitrary external perturbations may be switched on (and off) at a later time, the choice of the equilibrium initial density matrix does not prevent one from treating non-equilibrium dynamics. For the equilibrium initial density matrix one finds

$$\text{Tr} \{ \hat{\rho}_0 \} = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta(\omega_0 - \mu)n} = [1 - \rho(\omega_0)]^{-1} \quad (2.14)$$

where $\rho(\omega_0) = e^{-\beta(\omega_0 - \mu)}$. An important observation is that, in general, $\text{Tr}\{\hat{\rho}\}$ is an interaction- and disorder-independent constant. Indeed, both interactions and disorder are switched on (and off) on the forward (backward) parts of the contour sometime after (before) $t = -\infty$. This constant is therefore frequently omitted without causing confusion.

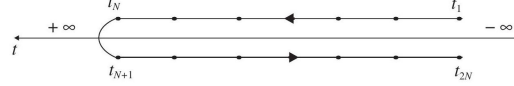


Figure 2.1 The closed time contour $\mathcal{C}$. Dots on the forward and backward branches of the contour denote discrete time points.

The next step is to divide the $\mathcal{C}$ contour into $(2N - 2)$ time intervals of length δ_t , such that $t_1 = t_{2N} = -\infty$ and $t_N = t_{N+1} = +\infty$, as shown in Fig. 2.1. One then inserts the resolution of unity in the over-complete coherent state basis, Eq. (2.7),

$$\hat{1} = \int d[\bar{\phi}_j, \phi_j] e^{-|\phi_j|^2} |\phi_j\rangle \langle \phi_j| \quad (2.15)$$

at each point $j = 1, 2, \dots, 2N$ along the contour. For example, for $N = 3$ one obtains the following sequence in the expression for $\text{Tr} \{ \hat{\mathcal{U}}_C \hat{\rho}_0 \}$, Eq. (2.10) (read from right to left):

$$\langle \phi_6 | \hat{\mathcal{U}}_{-\delta_t} | \phi_5 \rangle \langle \phi_5 | \hat{\mathcal{U}}_{-\delta_t} | \phi_4 \rangle \langle \phi_4 | \hat{1} | \phi_3 \rangle \langle \phi_3 | \hat{\mathcal{U}}_{+\delta_t} | \phi_2 \rangle \langle \phi_2 | \hat{\mathcal{U}}_{+\delta_t} | \phi_1 \rangle \langle \phi_1 | \hat{\rho}_0 | \phi_6 \rangle, \quad (2.16)$$

where $\hat{\mathcal{U}}_{\pm\delta_t}$ is the evolution operator (1.1) during the time interval δ_t in the positive (negative) time direction. Its matrix elements are given by

$$\begin{aligned} \langle \phi_j | \hat{\mathcal{U}}_{\pm\delta_t} | \phi_{j-1} \rangle &\equiv \langle \phi_j | e^{z\hat{H}(b^\dagger, b)\delta_t} | \phi_{j-1} \rangle \approx \langle \phi_j | (1 \mp i\hat{H}(b^\dagger, b)\delta_t) | \phi_{j-1} \rangle \\ &= \langle \phi_j | \phi_{j-1} \rangle (1 \mp iH(\bar{\phi}_j, \phi_{j-1})\delta_t) \approx e^{\bar{\phi}_j\phi_{j-1}} e^{\mp iH(\bar{\phi}_j, \phi_{j-1})\delta_t}, \end{aligned} \quad (2.17)$$

where the approximate equalities are valid up to the linear order in δ_t . Here we have employed expression (2.4) for the matrix elements of a normally ordered operator along with Eq. (2.6) for the overlap of the coherent states. For the toy example (2.12) one finds $H(\bar{\phi}_j, \phi_{j-1}) = \omega_0 \bar{\phi}_j \phi_{j-1}$. However, Eq. (2.17) is not restricted to it, but holds for any normally ordered Hamiltonian. Notice that there is no evolution operator inserted between t_N and t_{N+1} . Indeed, these two points are physically indistinguishable and thus the system does not evolve during this time interval.

Employing the following property of the coherent states (see Eq. (2.11)): $\langle \phi_1 | e^{-\beta(\omega_0 - \mu)b^\dagger b} | \phi_{2N} \rangle = \exp \{ \bar{\phi}_1 \phi_{2N} \rho(\omega_0) \}$ and collecting all the exponential factors along the contour, one finds for the partition function, Eq. (2.13),

$$Z = \frac{1}{\text{Tr} \{ \hat{\rho}_0 \}} \int \prod_{j=1}^{2N} d[\bar{\phi}_j, \phi_j] \exp \left(i \sum_{j,j'=1}^{2N} \bar{\phi}_j G_{jj'}^{-1} \phi_{j'} \right) \quad (2.18)$$

For $N = 3$ (see Eq. (2.16)), the $2N \times 2N$ matrix $iG_{jj'}^{-1}$ takes the form

$$iG_{jj'}^{-1} \equiv \left[\begin{array}{ccc|ccc} -1 & & & & & \\ h_- & -1 & & & & \\ & h_- & -1 & & & \\ \hline & & 1 & -1 & & \\ & & & h_+ & -1 & \\ & & & & h_+ & -1 \end{array} \right] \rho(\omega_0) \quad (2.19)$$

where $h_{\mp} \equiv 1 \mp i\omega_0\delta_t$. The main diagonal of this matrix originates from the resolution of unity, Eq. (2.15), while the lower sub-diagonal comes from the matrix elements (2.17). Finally, the upper-right element comes from $\langle \phi_1 | \hat{\rho}_0 | \phi_{2N} \rangle$ in Eq. (2.16). This structure of the $i\hat{G}^{-1}$ matrix is straightforwardly generalized to arbitrary N .

To proceed with the multiple integrals appearing in Eq. (2.18), we remind the reader of some properties of the Gaussian integrals.

11.2.3 2.3 Bosonic Gaussian Integrals

For any complex $N \times N$ matrix $\hat{A}_{ij}$, where $i, j = 1, \dots, N$, such that all its eigenvalues, λ_i , have nonnegative real parts, $\text{Re } \lambda_i \geq 0$, the following statement holds:

$$Z[\bar{J}, J] = \int \prod_{j=1}^N d[\bar{z}_j, z_j] e^{-\sum_{ij} \bar{z}_i \hat{A}_{ij} z_j + \sum_j [\bar{z}_j J_j + \bar{J}_j z_j]} = \frac{e^{\sum_{ij} \bar{J}_i (\hat{A}^{-1})_{ij} J_j}}{\det \hat{A}} \quad (2.20)$$

where J_j is an arbitrary complex vector and $d[\bar{z}_j, z_j] = d(\text{Re } z_j) d(\text{Im } z_j) / \pi$. This equality is a generalization of the Gaussian integral (2.8). To prove it, one starts from a Hermitian matrix $\hat{A}$, which may be diagonalized by a unitary transformation $\hat{A} = \hat{U}^\dagger \hat{\Lambda} \hat{U}$, where $\hat{\Lambda} = \text{diag}\{\lambda_j\}$. The identity is then proven by a change of variables with a unit Jacobian to $w_i = \sum_j \hat{U}_{ij} z_j$, which leads to

$$Z[\bar{J}, J] = \prod_{j=1}^N \int d[\bar{w}_j, w_j] e^{-\bar{w}_j \lambda_j w_j + \bar{w}_j I_j + \bar{I}_j w_j} = \prod_{j=1}^N \frac{e^{\bar{I}_j \lambda_j^{-1} I_j}}{\lambda_j}$$

where $I_i = \sum_j \hat{U}_{ij} J_j$. Using $\sum_j \bar{I}_j \lambda_j^{-1} I_j = \vec{\bar{I}}^T \hat{U}^\dagger \hat{\Lambda}^{-1} \hat{U} \vec{J} = \vec{\bar{I}}^T \hat{A}^{-1} \vec{J}$, along with $\det \hat{A} = \prod_j \lambda_j$, one obtains the right-hand side of Eq. (2.20). Finally, one notices that the right-hand side of Eq. (2.20) is an analytic function of both $\text{Re } A_{ij}$ and $\text{Im } A_{ij}$. Therefore, one may continue them analytically to the complex plane to reach an arbitrary complex matrix $\hat{A}_{ij}$. The identity (2.20) is thus valid as long as the integral is well defined, that is, all the eigenvalues of $\hat{A}$ have nonnegative real parts.

The Wick theorem deals with the average value of $z_{a_1} \dots z_{a_k} \bar{z}_{b_1} \dots \bar{z}_{b_k}$ weighted with the factor $\exp(-\sum_{ij} \bar{z}_i \hat{A}_{ij} z_j)$. The theorem states that this average is given by the sum of all possible products of pair-wise averages. For example, with the help of Eq. (2.20) one finds

$$\begin{aligned} \langle z_a \bar{z}_b \rangle &\equiv \frac{1}{Z[0,0]} \frac{\delta^2 Z[\bar{J}, J]}{\delta \bar{J}_a \delta J_b} \Big|_{J=0} = \hat{A}_{ab}^{-1} \\ \langle z_a z_b \bar{z}_c \bar{z}_d \rangle &\equiv \frac{1}{Z[0,0]} \frac{\delta^4 Z[\bar{J}, J]}{\delta \bar{J}_a \delta \bar{J}_b \delta J_c \delta J_d} \Big|_{J=0} = \hat{A}_{ac}^{-1} \hat{A}_{bd}^{-1} + \hat{A}_{ad}^{-1} \hat{A}_{bc}^{-1} \end{aligned} \quad (2.21)$$

and so on.

The Gaussian identity for integration over real variables has the form

$$Z[J] = \int \prod_{j=1}^N \left(\frac{dx_j}{\sqrt{2\pi}} \right) e^{-\frac{1}{2} \sum_{ij} x_i \hat{A}_{ij} x_j + \sum_j x_j J_j} = \frac{e^{\frac{1}{2} \sum_{ij} J_i (\hat{A}^{-1})_{ij} J_j}}{\sqrt{\det \hat{A}}} \quad (2.22)$$

where $\hat{A}$ is a symmetric complex matrix with all its eigenvalues having nonnegative real parts. The proof is similar to that in the case of complex variables: one starts from a real symmetric matrix, which may be diagonalized by an orthogonal transformation. The identity (2.22) is then easily proven by a change of variables. Finally, one may analytically continue the right-hand side (as long as the integral is well defined) from a real symmetric matrix $\hat{A}_{ij}$ to a complex symmetric one.

The corresponding Wick theorem for the average value of $x_{a_1} \dots x_{a_{2k}}$ weighted with the factor $\exp\left(-\frac{1}{2} \sum_{ij} x_i \hat{A}_{ij} x_j\right)$ takes the form

$$\begin{aligned} \langle x_a x_b \rangle &\equiv \frac{1}{Z[0]} \frac{\delta^2 Z[J]}{\delta J_a \delta J_b} \Big|_{J=0} = \hat{A}_{ab}^{-1} \\ \langle x_a x_b x_c x_d \rangle &\equiv \frac{1}{Z[0]} \frac{\delta^4 Z[J]}{\delta J_a \delta J_b \delta J_c \delta J_d} \Big|_{J=0} = \hat{A}_{ab}^{-1} \hat{A}_{cd}^{-1} + \hat{A}_{ac}^{-1} \hat{A}_{bd}^{-1} + \hat{A}_{ad}^{-1} \hat{A}_{bc}^{-1} \end{aligned} \quad (2.23)$$

and so on. Notice the additional term in the second line in comparison with the corresponding complex result (2.21). The symmetry of $\hat{A}$ (and thus of $\hat{A}^{-1}$) is necessary to satisfy the obvious relation $\langle x_a x_b \rangle = \langle x_b x_a \rangle$.

11.2.4 2.4 Normalization and Continuum Notation

Having established the Gaussian identity (2.20), one can apply it to Eq. (2.18) to check the normalization factor. In this case $\hat{A} = -i\hat{G}^{-1}$ and it is straightforward to evaluate the corresponding determinant employing Eq. (2.19):

$$\begin{aligned} \det[-i\hat{G}^{-1}] &= 1 - \rho(\omega_0) (h_- h_+)^{N-1} = 1 - \rho(\omega_0) (1 + \omega_0^2 \delta_t^2)^{N-1} \\ &\approx 1 - \rho(\omega_0) e^{\omega_0^2 \delta_t^2 (N-1)} \xrightarrow{N \rightarrow \infty} 1 - \rho(\omega_0) \end{aligned} \quad (2.24)$$

where one used that $\delta_t^2 N \rightarrow 0$ if $N \rightarrow \infty$. Indeed, we divide the contour in a way to keep $\delta_t N = \text{const}$ (given by a full extent of the time axis) and as a result $\delta_t^2 \sim N^{-2}$. Employing the fact that the Gaussian integral in Eq. (2.18) is equal to the inverse determinant of the $-i\hat{G}^{-1}$ matrix, Eq. (2.20), along with Eq. (2.14), one finds

$$Z = \frac{1}{\text{Tr}\{\hat{\rho}_0\}} \frac{1}{\det[-i\hat{G}^{-1}]} = 1 \quad (2.25)$$

as it should be, of course. Notice that keeping the upper-right element of the discrete matrix, Eq. (2.19), is crucial to maintain this normalization identity.

One may now take the limit $N \rightarrow \infty$ and formally write the partition function (2.18) in the continuum notation, $\phi_j \rightarrow \phi(t)$, as

$$Z = \int \mathbf{D}[\bar{\phi}(t), \phi(t)] e^{iS[\bar{\phi}, \phi]} \quad (2.26)$$

where the integration measure is the shorthand notation for $\mathbf{D}[\bar{\phi}(t), \phi(t)] = \prod_{j=1}^{2N} d[\bar{\phi}_j, \phi_j] / \text{Tr}\{\hat{\rho}_0\}$. According to Eqs. (2.18) and (2.19), the action is given by

$$S[\bar{\phi}, \phi] = \sum_{j=2}^{2N} \delta t_j \left[i \bar{\phi}_j \frac{\phi_j - \phi_{j-1}}{\delta t_j} - \omega_0 \bar{\phi}_j \phi_{j-1} \right] + i \bar{\phi}_1 [\phi_1 - i \rho(\omega_0) \phi_{2N}] \quad (2.27)$$

where $\delta t_j \equiv t_j - t_{j-1} = \pm \delta t$ on the forward and backward branches, correspondingly. In continuum notation, $\phi_j \rightarrow \phi(t)$, the action acquires the form

$$S[\bar{\phi}, \phi] = \int_{\mathcal{C}} dt \bar{\phi}(t) \hat{G}^{-1} \phi(t) \quad (2.28)$$

where the continuum form of the operator $\hat{G}^{-1}$ is (see the first square bracket on the right-hand side of Eq. (2.27))

$$\hat{G}^{-1} = i \partial_t - \omega_0 \quad (2.29)$$

It is extremely important to remember that this continuum notation is only an abbreviation that represents the large discrete matrix, Eq. (2.19). In particular, the upper-right element of the matrix (the last term in Eq. (2.27)), which contains the information about the distribution function, is seemingly absent in the continuum notation, Eq. (2.29). The necessity of keeping the boundary terms originates from the fact that the continuum operator (2.29) possesses the zero mode $e^{-i\omega_0 t}$. Its inverse operator $\hat{G}$ is therefore not uniquely defined, unless the boundary terms are included.

To avoid integration along the closed time contour, it is convenient to split the bosonic field $\phi(t)$ into the two components $\phi^+(t)$ and $\phi^-(t)$, which reside on the forward and backward parts of the time contour, respectively. The continuum action then may be rewritten as

$$S[\bar{\phi}, \phi] = \int_{-\infty}^{+\infty} dt [\bar{\phi}^+(t) (i \partial_t - \omega_0) \phi^+(t) - \bar{\phi}^-(t) (i \partial_t - \omega_0) \phi^-(t)] \quad (2.30)$$

where the relative minus sign comes from the reversed direction of the time integration on the backward part of the contour. Once again, the continuum notation is somewhat misleading. Indeed, it creates an undue impression that the $\phi^+(t)$ and $\phi^-(t)$ fields are completely uncorrelated. In fact, they are connected due to the presence of the nonzero off-diagonal blocks in the discrete matrix, Eq. (2.19). It is therefore desirable to develop a continuum representation that automatically takes into account the proper regularization and mutual correlations. We shall achieve this in the following sections. First, the Green functions should be discussed.

11.2.5 2.5 Green Functions

According to the basic properties of the Gaussian integrals (see Section 2.3), the correlator of the two complex bosonic fields is given by

$$\langle \phi_j \bar{\phi}_{j'} \rangle \equiv \int \mathbf{D}[\bar{\phi}, \phi] \phi_j \bar{\phi}_{j'} \exp \left(i \sum_{k,k'=1}^{2N} \bar{\phi}_k G_{kk'}^{-1} \phi_{k'} \right) = i G_{jj'} \quad (2.31)$$

Notice the absence of the factor Z^{-1} in comparison with the analogous definition in the equilibrium theory [6]. Indeed, in the present construction $Z = 1$. This seemingly minor difference turns out to be the major issue in the theory of disordered systems. (See further discussion in Chapter 14, devoted to fermions with quenched disorder.) Inverting the $2N \times 2N$ matrix (2.19) with $N = 3$, one finds

$$iG_{jj'} = \frac{1}{\det[-i\hat{G}^{-1}]} \left[\begin{array}{ccc|ccc} 1 & \rho h_+^2 h_- & \rho h_+^2 & \rho h_+^2 & \rho h_+ & \rho \\ h_- & 1 & \rho h_+^2 h_- & \rho h_+^2 h_- & \rho h_+ h_- & \rho h_- \\ h_-^2 & h_- & 1 & \rho h_+^2 h_-^2 & \rho h_+ h_-^2 & \rho h_-^2 \\ \hline h_-^2 & h_- & 1 & 1 & \rho h_-^2 h_+ & \rho h_-^2 \\ h_-^2 h_+ & h_- h_+ & h_+ & h_+ & 1 & \rho h_-^2 h_+ \\ h_-^2 h_+^2 & h_- h_+^2 & h_+^2 & h_+^2 & h_+ & 1 \end{array} \right], \quad (2.32)$$

where $\rho \equiv \rho(\omega_0)$. Generalization of the $N = 3$ example to an arbitrary N is again straightforward. We switch now to the fields $\phi_j^\pm$ residing on the forward (backward) branches of the contour. Hereafter $j = 1, \dots, N$ and thus the $2N \times 2N$ matrix we have just written is indexed as $1, 2, \dots, N, N, \dots, 2, 1$. Then the following correlations may be read out of the matrix (2.32):

$$\langle \phi_j^+ \bar{\phi}_{j'}^- \rangle \equiv iG_{jj'}^< = \frac{\rho h_+^{j'-1} h_-^{j-1}}{\det[-i\hat{G}^{-1}]}, \quad (2.33a)$$

$$\langle \phi_j^- \bar{\phi}_{j'}^+ \rangle \equiv iG_{jj'}^> = \frac{h_+^{N-j} h_-^{N-j'}}{\det[-i\hat{G}^{-1}]} = \frac{(h_+ h_-)^{N-1} h_+^{1-j} h_-^{1-j'}}{\det[-i\hat{G}^{-1}]}, \quad (2.33b)$$

$$\langle \phi_j^+ \bar{\phi}_{j'}^+ \rangle \equiv iG_{jj'}^\mathbb{T} = \frac{h_-^{j-j'}}{\det[-i\hat{G}^{-1}]} \times \begin{cases} 1, & j \geq j' \\ \rho (h_+ h_-)^{N-1}, & j < j' \end{cases}, \quad (2.33c)$$

$$\langle \phi_j^- \bar{\phi}_{j'}^- \rangle \equiv iG_{jj'}^{\tilde{\mathbb{T}}} = \frac{h_+^{j'-j}}{\det[-i\hat{G}^{-1}]} \times \begin{cases} \rho (h_+ h_-)^{N-1}, & j > j' \\ 1, & j \leq j' \end{cases} \quad (2.33d)$$

Here the symbols $\mathbb{T}$ and $\tilde{\mathbb{T}}$ stand for time ordering and anti-ordering correspondingly, while $< (>)$ is a convenient notation indicating that the first time argument is taken before (after) the second one on the Keldysh contour. Since $h_+^* = h_-$, one notices that

$$[G^{<(>)}]^\dagger = -G^{<(>)}; \quad [G^\mathbb{T}]^\dagger = -G^{\tilde{\mathbb{T}}} \quad (2.34)$$

where the Hermitian conjugation involves interchange of the two time arguments along with complex conjugation.

Recalling that $h_\mp = 1 \mp i\omega_0 \delta_t$, one can take the $N \rightarrow \infty$ limit, keeping $N\delta_t$ a constant. To this end notice that $(h_+ h_-)^N = (1 + \omega_0^2 \delta_t^2)^N \xrightarrow{N \rightarrow \infty} 1$, while $h_\mp^j \xrightarrow{N \rightarrow \infty} e^{\mp i\omega_0 \delta_t j} = e^{\mp i\omega_0 t}$, where we denoted $t = \delta_t j$ and correspondingly $t' = \delta_t j'$. Employing also the evaluation of the determinant given by Eq. (2.24), one obtains for the correlation functions in the continuum limit

$$\langle \phi^+(t) \bar{\phi}^-(t') \rangle = iG^<(t, t') = n_B e^{-i\omega_0(t-t')} \quad (2.35a)$$

$$\langle \phi^-(t) \bar{\phi}^+(t') \rangle = iG^>(t, t') = (n_B + 1) e^{-i\omega_0(t-t')} \quad (2.35b)$$

$$\langle \phi^+(t) \bar{\phi}^+(t') \rangle = iG^q(t, t') = \theta(t - t') iG^>(t, t') + \theta(t' - t) iG^<(t, t') \quad (2.35c)$$

$$\langle \phi^-(t) \bar{\phi}^-(t') \rangle = iG^{\tilde{q}}(t, t') = \theta(t' - t) iG^>(t, t') + \theta(t - t') iG^<(t, t') \quad (2.35d)$$

where we introduced the bosonic occupation number n_B as

$$n_B(\omega_0) = \frac{\rho(\omega_0)}{1 - \rho(\omega_0)} \quad (2.36)$$

Indeed, to calculate the number of bosons at a certain point in time one needs to insert the operator $\hat{b}^\dagger \hat{b}$ into the corresponding point along the forward or backward branches of the contour. This leads to the correlation function $\langle \phi_{j-1} \bar{\phi}_j \rangle$, or in terms of $\phi^\pm$ fields to either $\langle \phi_{j-1}^+ \bar{\phi}_j^+ \rangle$ or $\langle \phi_j^- \bar{\phi}_{j-1}^- \rangle$ (notice the reversed indexing along the backward branch). According to Eqs. (2.33c, d), in the $N \rightarrow \infty$ limit both of them equal n_B .

The step function $\theta(t)$ in Eqs. (2.35c, d) is defined as $\theta(t - t') = 1$ if $t > t'$ and $\theta(t - t') = 0$ if $t < t'$. There is an ambiguity about equal times. Consulting with the discrete version of the correlation functions, Eqs. (2.33a-d), one notices that in both Eqs. (2.35c) and (2.35d) the first step function should be understood as having $\theta(0) = 1$, and the second as having $\theta(0) = 0$. Although slightly inconvenient, this ambiguity will disappear in the formalism that follows.

By analogy with the definition of the discrete correlation functions as a $2N$ fold integral, Eq. (2.31), it is convenient to write their continuum limit, Eq. (2.35), formally as a functional integral,

$$\langle \phi^\pm(t) \bar{\phi}^\pm(t') \rangle = \int \mathbf{D}[\bar{\phi}, \phi] \phi^\pm(t) \bar{\phi}^\pm(t') e^{iS[\bar{\phi}, \phi]} \quad (2.37)$$

where the action $S[\bar{\phi}, \phi]$ is given by Eq. (2.30). Notice that, despite the impression that the integrals over $\phi^+(t)$ and $\phi^-(t)$ may be split from each other and performed separately, there are nonvanishing cross-correlations between these fields, Eqs. (2.35a,b). The reason, of course, is that the continuum notation (2.37) is nothing but a shorthand abbreviation for the $N \rightarrow \infty$ limit of the discrete integral (2.31). The latter contains the matrix (2.19) with nonzero off-diagonal blocks, which are the sole reason for the existence of the cross-correlations. It is highly desirable to develop a continuum formalism, which automatically accounts for the proper cross-correlations without the need to resort to the discrete notations.

This task is facilitated by the observation that not all four Green functions we have defined are independent. Indeed, direct inspection shows that

$$G^\Psi(t, t') + G^{\tilde{\Psi}}(t, t') - G^>(t, t') - G^<(t, t') = 0. \quad (2.38)$$

This suggests that one may benefit explicitly from this relation by performing a linear transformation. The Keldysh rotation achieves just that. Notice that, due to the regularization of $\theta(0)$ discussed above Eq. (2.37), the identity does not hold for $t = t'$. Indeed at $t = t'$ the left-hand side of Eq. (2.38) is one rather than zero. However, since the $t = t'$ line is a manifold of measure zero, the violation of Eq. (2.38) for most purposes is inconsequential. (Notice that the left-hand side of Eq. (2.38) is not a delta-function $\delta(t - t')$. It is rather a Kronecker delta $\delta_{jj'}$ in the discrete version, which disappears in the continuum limit.)

11.2.6 2.6 Keldysh Rotation

Let us introduce a new pair of fields according to

$$\phi^{\text{cl}}(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi^+(t) + \phi^-(t)), \quad \phi^{\text{q}}(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi^+(t) - \phi^-(t)), \quad (2.39)$$

with the analogous transformation for the conjugated fields. The superscripts "cl" and "q" stand for the classical and the quantum components of the fields, respectively. The rationale for this notation will become clear shortly. First, a simple algebraic manipulation with Eqs. (2.33a)-(2.33d) shows that

$$\langle \phi^\alpha(t) \bar{\phi}^\beta(t') \rangle \equiv iG^{\alpha\beta}(t, t') = \begin{pmatrix} iG^K(t, t') & iG^R(t, t') \\ iG^A(t, t') & 0 \end{pmatrix} \quad (2.40)$$

where hereafter $\alpha, \beta = (\text{cl}, \text{q})$. The fact that the (q, q) element of this matrix is zero is a manifestation of the identity (2.38). Superscripts R, A, and K stand for the retarded, advanced, and Keldysh components of the Green function, respectively. These three Green functions are the fundamental objects of the Keldysh technique. They are defined as

$$G^{\text{R}}(t, t') = G^{\text{cl}, \text{q}}(t, t') = \frac{1}{2} (G^{\text{T}} - G^{\text{T}} + G^> - G^<) = \theta(t - t') (G^> - G^<) \quad (2.41\text{a})$$

$$G^{\text{A}}(t, t') = G^{\text{q}, \text{cl}}(t, t') = \frac{1}{2} (G^{\text{T}} - G^{\text{T}} - G^> + G^<) = \theta(t' - t) (G^< - G^>) \quad (2.41\text{b})$$

$$G^{\text{K}}(t, t') = G^{\text{cl}, \text{cl}}(t, t') = \frac{1}{2} (G^{\text{T}} + G^{\text{T}} + G^> + G^<) = G^> + G^< \quad (2.41\text{c})$$

As mentioned after Eq. (2.38), the last equality in each line here holds for $t \neq t'$ only, while the diagonal $t = t'$ is discussed in what follows. Employing Eq. (2.34), one notices that

$$G^{\text{A}} = [G^{\text{R}}]^{\dagger}, \quad G^{\text{K}} = -[G^{\text{K}}]^{\dagger} \quad (2.42)$$

where the Green functions are understood as matrices in the time domain. Hermitian conjugation therefore includes complex conjugation along with interchanging of the two time arguments.

The retarded (advanced) Green function is a lower (upper) triangular matrix in the time domain. Since a product of any number of triangular matrices is again a triangular matrix, one obtains the simple rule that the convolution of any number of retarded (advanced) Green functions is also a retarded (advanced) Green function:

$$G_1^{\text{R}} \circ G_2^{\text{R}} \circ \dots \circ G_l^{\text{R}} = G^{\text{R}}, \quad (2.43\text{a})$$

$$G_1^{\text{A}} \circ G_2^{\text{A}} \circ \dots \circ G_l^{\text{A}} = G^{\text{A}}, \quad (2.43\text{b})$$

where the circular multiplication sign stands for the convolution operation, that is, multiplication of matrices in the time domain, and subscripts denote all other indices apart from the time.

Both retarded and advanced matrices have nonzero main diagonals, that is, $t = t'$. The important observation, however, is that

$$G^{\text{R}}(t, t) + G^{\text{A}}(t, t) = 0 \quad (2.44)$$

see Eqs. (2.35c, d) and the discussion of $\theta(0)$ regularization below them. It may be traced back to the fact that $G^{\text{R}} + G^{\text{A}} = G^{\text{T}} - G^{\text{T}}$, and since at the coinciding times the time ordering and anti-ordering are equivalent, the result is zero. This consideration shows that Eq. (2.44) is not restricted to our toy model, but is completely general. In the energy representation Eq. (2.44) takes the form

$$\int \frac{d\epsilon}{2\pi} [G^{\text{R}}(\epsilon) + G^{\text{A}}(\epsilon)] = 0 \quad (2.45)$$

and it is tempting to attribute it to the fact that energy integral of a function analytic in the upper (lower) complex half-plane is zero. One should be aware, however, that, according to Eqs. (2.41a,b) and (2.35a,b),

$$G^{\text{R}}(t, t) - G^{\text{A}}(t, t) = -i. \quad (2.46)$$

Once again this expression is not restricted to the toy model, but is very general. Indeed, $G^R - G^A = G^> - G^< = -i \langle (bb^\dagger - b^\dagger b) \rangle = -i$ since the commutation relation (2.2) at the coinciding times is a generic property of any bosonic system. As a result, $\int d\epsilon [G^R(\epsilon) - G^A(\epsilon)] = -2\pi i$ and therefore $\int d\epsilon G^{R(A)}(\epsilon) = \mp \pi i$, which is coming from the integration along the large semi-circle closing the integration contour in the upper (lower) complex half-plane. In practical calculations the difference $G^R - G^A$ always comes with the distribution function (see what follows). The latter usually exhibits poles or branch cuts in both upper and lower energy half-planes and therefore the contour integration is not helpful anyway. Wherever G^R or G^A show up without the distribution function, they always appear in the combination $G^R + G^A$, calling for the contour integration (2.45). We shall thus frequently quote (as a rule of thumb) that $\int d\epsilon G^{R(A)}(\epsilon) = 0$, or equivalently $G^{R(A)}(t, t) = 0$, understanding that it is always the sum of the two that matters. This never leads to confusion and therefore there is no danger in extending Eqs. (2.41a,b) to the diagonal $t = t'$ (with the understanding $\theta(0) = 0$) in the continuum formalism.

It is useful to introduce graphic representations for the three Green functions. To this end, let us denote the classical component of the field by a full line and the quantum component by a dashed line. Then the retarded Green function is represented by a full arrow and dashed line, the advanced by a dashed arrow and full line, and the Keldysh by a full arrow and full line; see Fig. 2.2. Notice that the dashed arrow and dashed line that would represent the $\langle \phi^q \bar{\phi}^q \rangle$ Green function is absent. The arrow shows the direction from ϕ^α toward $\bar{\phi}^\beta$.

Employing Eqs. (2.35a-d), one finds for our toy example of the single boson level

$$G^R = -i\theta(t - t') e^{-i\omega_0(t-t')} \xrightarrow{\text{FT}} (\epsilon - \omega_0 + i0)^{-1}, \quad (2.47a)$$

$$G^A = i\theta(t' - t) e^{-i\omega_0(t-t')} \xrightarrow{\text{FT}} (\epsilon - \omega_0 - i0)^{-1}, \quad (2.47b)$$

$$G^K = -i[2n_B(\omega_0) + 1] e^{-i\omega_0(t-t')} \xrightarrow{\text{FT}} -2\pi i[2n_B(\epsilon) + 1] \delta(\epsilon - \omega_0). \quad (2.47c)$$

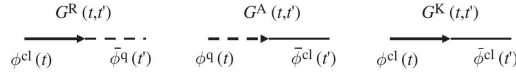


Figure 2.2 Graphic representation of G^R , G^A , and G^K . The full line represents the classical field component ϕ^{cl} , while the dashed line represents the quantum component ϕ^q . The arrows are directed from the annihilation operator toward the creation one, that is, from ϕ^α to $\bar{\phi}^\beta$.

The Fourier transforms (FT) with respect to $t - t'$ are given for each of the three Green functions. Notice that the retarded and advanced components contain information only about the spectrum and are independent of the occupation number, whereas the Keldysh component depends on it. In thermal equilibrium $\rho = e^{-(\omega_0 - \mu)/T}$, while $n_B = (e^{(\omega_0 - \mu)/T} - 1)^{-1}$ and therefore

$$G^K(\epsilon) = \coth \frac{\epsilon - \mu}{2T} [G^R(\epsilon) - G^A(\epsilon)], \quad (2.48)$$

where $T = \beta^{-1}$ is the system's temperature, expressed in units of energy.

The previous equation constitutes the statement of the fluctuation-dissipation theorem (FDT). As we shall see, the FDT is a general property of thermal equilibrium that is not restricted to the toy example considered here. It implies a rigid relation between the response functions and the correlation functions in equilibrium.

In general, it is convenient to parametrize the anti-Hermitian Keldysh Green function, Eq. (2.42), with the help of a Hermitian matrix $F = F^\dagger$, as follows:

$$G^K = G^R \circ F - F \circ G^A, \quad (2.49)$$

where $F = F(t, t')$. The Wigner transform (see Section 6.6), $F(t, \epsilon)$, of the matrix F is referred to as the distribution function. In thermal equilibrium $F(\epsilon) = \coth((\epsilon - \mu)/2T)$, Eq. (2.48).

11.2.7 2.7 Keldysh Action and Its Structure

One would like to have a continuum action, written in terms of $\phi^{\text{cl}}, \phi^{\text{q}}$, that properly reproduces the correlators Eqs. (2.40) and (2.47), namely

$$\langle \phi^\alpha(t) \bar{\phi}^\beta(t') \rangle = iG^{\alpha\beta}(t, t') = \int \mathbf{D}[\phi^{\text{cl}}, \phi^{\text{q}}] \phi^\alpha(t) \bar{\phi}^\beta(t') e^{iS[\phi^{\text{cl}}, \phi^{\text{q}}]} \quad (2.50)$$

where the conjugated fields are not listed in the action arguments or the integration measure for brevity. According to the basic properties of Gaussian integrals, Section 2.3, the action should be taken as a quadratic form of the fields with the matrix that is an inverse of the correlator $G^{\alpha\beta}(t, t')$. Inverting the matrix (2.40), one thus finds the proper action:

$$S[\phi^{\text{cl}}, \phi^{\text{q}}] = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_t dt t' (\bar{\phi}^{\text{cl}}, \bar{\phi}^{\text{q}})_t \begin{pmatrix} 0 & [G^{-1}]^{\text{A}} \\ [G^{-1}]^{\text{R}} & [G^{-1}]^{\text{K}} \end{pmatrix}_{t, t'} \begin{pmatrix} \phi^{\text{cl}} \\ \phi^{\text{q}} \end{pmatrix}_{t'} \quad (2.51)$$

The off-diagonal elements are found from the condition $[G^{-1}]^{\text{R}} \circ G^{\text{R}} = 1$ and the similar one for the advanced component. The right-hand side here is the unit matrix, which in the continuum time representation is $\delta(t - t')$. As a result, the offdiagonal components are obtained by the matrix inversion of the corresponding components of the Green functions $[G^{-1}]^{\text{R(A)}} = [G^{\text{R(A)}}]^{-1}$. Such an inversion is most convenient in the energy representation

$$[G^{-1}]^{\text{R(A)}} = \epsilon - \omega_0 \pm i0 \rightarrow \delta(t - t') (i\partial_t - \omega_0 \pm i0) \quad (2.52a)$$

where in the last step we performed the inverse Fourier transform back to the time representation, employing the fact that the Fourier transform of ϵ is $\delta(t - t')$.

Although in the continuum limit these matrices look diagonal, it is important to remember that in the discrete regularization $[G^{\text{R(A)}}]^{-1}$ contains $\mp i$ along the main diagonal and $\pm i - \omega_0 \delta_t$ along the lower (upper) sub-diagonal. The determinants of the corresponding matrices are given by the product of all diagonal elements, $\det[G^{-1}]^{\text{R}} \det[G^{-1}]^{\text{A}} = \prod_{j=1}^N i(-i) = 1$. To obtain this statement without resorting to discretization, one notices that in the energy representation the Green functions are diagonal and therefore $\det[G^{-1}]^{\text{R}} [G^{-1}]^{\text{A}} = \prod_{\epsilon} [G^{\text{R}}(\epsilon) G^{\text{A}}(\epsilon)]^{-1} = \exp\left\{-\int \frac{d\epsilon}{2\pi} [\ln G^{\text{R}} + \ln G^{\text{A}}]\right\} = 1$. Here we used the fact that Eq. (2.45) holds not only for the Green functions themselves but, thanks to Eqs. (2.43), also for any function of them. This property is important for maintaining the normalization identity $Z = \int \mathbf{D}[\phi^{\text{cl}}, \phi^{\text{q}}] e^{iS} = 1$. Indeed, the integral is equal to minus (due to the factor of i in the exponent) the determinant of the quadratic form, while the latter is (-1) times the product of the determinants of the off-diagonal elements in the quadratic form (2.51).

The diagonal Keldysh component, $[G^{-1}]^{\text{K}}$, of the quadratic form (2.51) is found from the condition $G^{\text{K}} \circ [G^{\text{A}}]^{-1} + G^{\text{R}} \circ [G^{-1}]^{\text{K}} = 0$. Employing the parametrization (2.49), one finds

$$[G^{-1}]^{\text{K}} = -[G^{\text{R}}]^{-1} \circ G^{\text{K}} \circ [G^{\text{A}}]^{-1} = [G^{\text{R}}]^{-1} \circ F - F \circ [G^{\text{A}}]^{-1}. \quad (2.52b)$$

The action (2.51) should be viewed as a construction devised to reproduce the proper continuum limit of the correlation functions according to the rules of Gaussian integration. It is fully self-consistent in the following senses: (i) it does not need to appeal to the discrete representation for regularization and (ii) its general structure is intact upon renormalization or "dressing" of its components by the interaction corrections (see Chapter 6).

Here we summarize the main features of the action (2.51), which, for lack of better terminology, we call the causality structure.

- The cl – cl component of the quadratic form is zero. It reflects the fact that for a pure classical field configuration ($\phi^a = 0$) the action is zero. Indeed, in this case $\phi^+ = \phi^-$ and the action on the forward part of the contour is canceled by that on the backward part (except for the boundary terms, which are implicit in the continuum limit). The very general statement is, therefore, that

$$S[\phi^{\text{cl}}, 0] = 0 \quad (2.53)$$

Obviously this statement is not restricted to the Gaussian action of the form given by Eq. (2.51), but holds for any generic action (see Section 2.8 and Chapter 6).

- The cl – q and q – cl components are mutually Hermitian conjugated upper and lower (advanced and retarded) triangular matrices in the time domain. This property is responsible for the causality of the response functions as well as for protecting the cl – cl component from a perturbative renormalization (see Section 2.8). Relations (2.44) and (2.45) are crucial for this last purpose and necessary for the consistency of the theory.
- The q – q component is an anti-Hermitian matrix [see Eq. (2.42)]. It is responsible for the convergence of the functional integral and keeps information about the distribution function. In our simple example $[G^K]^{-1} = 2i0F$, where F is a Hermitian matrix. The fact that it is infinitesimally small is a peculiarity of the noninteracting model. We shall see in the following chapters that it acquires a finite value, once interactions with other degrees of freedom are included.

11.2.8 2.8 Nonlinear Interactions

The discussion so far is mostly content with the linear harmonic system. Let us discuss now how nonlinear interactions enter the theory. In fact, this is exactly the subject of the rest of the book. It is worth the time, however, to have a brief preliminary exposition already at this juncture.

To this end consider a normally ordered bosonic Hamiltonian of the form

$$\hat{H}(\hat{b}^\dagger, \hat{b}) = \omega_0 \hat{b}^\dagger \hat{b} + \frac{g}{2} \hat{b}^\dagger \hat{b}^\dagger \hat{b} \hat{b} \quad (2.54)$$

where g is the two-particle interaction energy.¹ We now proceed to writing the partition function (2.13), where $\hat{\mathcal{U}}_C$ is the closed time contour evolution operator

for the Hamiltonian (2.54). To this end we discretize the time contour and insert coherent state resolutions of identity. As mentioned after Eq. (2.17), calculation of the corresponding matrix elements are applicable for any normally ordered Hamiltonian. As a result, we arrive at a generalization of the continuum action (2.30), written as

$$S[\bar{\phi}, \phi] = \int_{-\infty}^{+\infty} dt [\bar{\phi}^+ i \partial_t \phi^+ - H(\bar{\phi}^+, \phi^+) - \bar{\phi}^- i \partial_t \phi^- + H(\bar{\phi}^-, \phi^-)] \quad (2.55)$$

As a next step we perform the Keldysh rotation (2.39) and rewrite the action in terms of classical and quantum field components. The harmonic part of the Hamiltonian, $\omega_0 \hat{b}^\dagger \hat{b}$, brings

⁰¹ Since $\hat{b}^\dagger \hat{b}^\dagger \hat{b} \hat{b} = (\hat{b}^\dagger \hat{b})^2 - \hat{b}^\dagger \hat{b}$, the eigenfunctions of the Hamiltonian (2.54) are those of the harmonic oscillator, $|n\rangle$, while the corresponding energies are $E_n = \omega_0 n + (g/2)(n^2 - n)$.

the already familiar quadratic action (2.51), which is discussed in detail in Section 2.7. Here we focus on the interaction part of the action, which after a simple algebra acquires the form

$$S_{\text{int}} = -\frac{g}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} dt [\bar{\phi}^{\text{cl}} \bar{\phi}^{\text{q}} \phi^{\text{cl}} \phi^{\text{cl}} + \bar{\phi}^{\text{cl}} \bar{\phi}^{\text{q}} \phi^{\text{q}} \phi^{\text{q}} + \bar{\phi}^{\text{cl}} \bar{\phi}^{\text{cl}} \phi^{\text{cl}} \phi^{\text{q}} + \bar{\phi}^{\text{q}} \bar{\phi}^{\text{q}} \phi^{\text{cl}} \phi^{\text{q}}] \quad (2.56)$$

The corresponding vertices are represented diagrammatically in Fig. 2.3. One immediately notices that all vertices contain at least one dashed line (i.e. quantum field). This assures that Eq. (2.53) is indeed satisfied. One can now expand e^{iS} in (2.50) in powers of S_{int} and employ the Wick theorem (2.21) to calculate perturbative interaction corrections to the Green functions. One can also evaluate such corrections to the partition function. For the consistency of the theory it is important that the partition function remains to be normalized, $Z = 1$ (i.e. it does not acquire any interaction corrections), while the Green functions retain their causality structure. This is indeed the case; see Problem 2.10.3 and Section 6.2.

One may also investigate stationary configurations of the functional integral (2.50), given by the variations $\delta S/\delta \bar{\phi}^{\text{q}} = \delta S/\delta \phi^{\text{cl}} = 0$ and their complex conjugates. This way, one arrives at the equations of motion:

$$i\partial_t \phi^{\text{cl}} = \omega_0 \phi^{\text{cl}} + \frac{g}{2} [\bar{\phi}^{\text{cl}} \phi^{\text{cl}} \phi^{\text{cl}} + \bar{\phi}^{\text{cl}} \phi^{\text{q}} \phi^{\text{q}} + 2\bar{\phi}^{\text{q}} \phi^{\text{q}} \phi^{\text{cl}}] \quad (2.57a)$$

$$i\partial_t \phi^{\text{q}} = \omega_0 \phi^{\text{q}} + \frac{g}{2} [\bar{\phi}^{\text{q}} \phi^{\text{cl}} \phi^{\text{cl}} + \bar{\phi}^{\text{q}} \phi^{\text{q}} \phi^{\text{q}} + 2\bar{\phi}^{\text{cl}} \phi^{\text{cl}} \phi^{\text{q}}] \quad (2.57b)$$

and their conjugated counterparts. In view of the causality constraint (2.53), the second of such equations, $\delta S/\delta \bar{\phi}^{\text{cl}} = 0$, can always be solved by a particular solution $\phi^{\text{q}} = 0$.

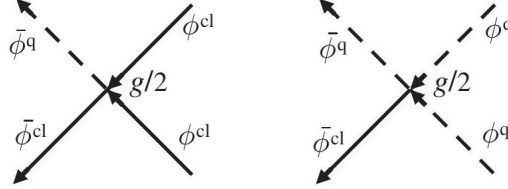


Figure 2.3 Interaction vertices for the Hamiltonian (2.54). There are also two complex conjugated vertices with a reversed direction of all arrows.

In our example this leaves us with the two equations for the classical anharmonic oscillator:

$$i\partial_t \phi = \omega_0 \phi + \frac{g}{2} |\phi|^2 \phi; \quad i\partial_t \bar{\phi} = -\omega_0 \bar{\phi} - \frac{g}{2} |\phi|^2 \bar{\phi} \quad (2.58)$$

where the superscript cl is suppressed for brevity. These equations are solved by harmonic functions (cf. footnote 1) $\phi(t) = \phi_n e^{-i\omega_n t}$, where $\omega_n = \omega_0 + g |\phi_n|^2 / 2$. This should be compared with the transition frequencies $\omega_n = E_{n+1} - E_n = \omega_0 + gn$, calling for the identification $|\phi_n|^2 = 2n$, that is, twice the number of particles (the unfortunate factor of 2 is a result of our definition of the classical field as $\phi^{\text{cl}} = (\phi^+ + \phi^-) / \sqrt{2}$). Generalization of Eq. (2.58) appears in the theory of Bose condensation as the Gross-Pitaevskii equation, Section 8.1.

11.2.9 2.9 External Sources

So far we have been content with the representation of the partition function. The latter does not carry any information in the Keldysh technique, since $Z = 1$. To make the entire construction meaningful one should introduce source fields, which enable one to compute various observables. As an example, let us introduce an external time-dependent potential $V(t)$. It interacts with the bosons through the Hamiltonian $\hat{H}_V = V(t) \hat{b}^\dagger \hat{b}$. One can now introduce the generating

function $Z[V]$ defined similarly to the partition function (2.13), $Z[V] = \text{Tr} \{ \hat{\mathcal{U}}_c[V] \hat{\rho} \} / \text{Tr} \{ \hat{\rho} \}$, where the evolution operator $\hat{\mathcal{U}}_c[V]$ includes the source Hamiltonian $\hat{H}_V$ along with the bare one, Eq. (2.12). While any classical external field is the same on both branches of the contour, it is convenient to allow $V^+(t)$ and $V^-(t)$ to be distinct and put them equal only at the very end. Repeating the construction of the coherent state functional integral of Section 2.2, one obtains for the generating function

$$Z_d[V] = \frac{1}{\text{Tr} \{ \hat{\rho}_0 \}} \int \prod_{j=1}^{2N} d[\bar{\phi}_j, \phi_j] \exp \left(i \sum_{j,j'=1}^{2N} \bar{\phi}_j G_{jj'}^{-1}[V] \phi_{j'} \right) \quad (2.59)$$

where the subscript d stands for the discrete representation. The $2N \times 2N$ matrix $iG_{jj'}^{-1}[V]$ is similar to Eq. (2.19) with $h_{\mp} \rightarrow h_{\mp}[V] = 1 \mp i(\omega_0 + V_j) \delta_t$, where $V_j = V(t_j)$. According to Eq. (2.20) the generating function is proportional to the inverse determinant of the $-iG_{jj'}^{-1}[V]$ matrix. The latter is calculated in a way very similar to Eq. (2.24), leading to

$$Z_d[V] = \frac{1}{\text{Tr} \{ \hat{\rho}_0 \}} \frac{1}{\det [-i\hat{G}^{-1}[V]]} = \frac{1 - \rho(\omega_0)}{1 - \rho(\omega_0) e^{-i \int_C dt V(t)}} \quad (2.60)$$

It is convenient to introduce classical and quantum components of the source potential $V(t)$ as

$$V^{\text{cl}}(t) = \frac{1}{2} [V^+(t) + V^-(t)]; \quad V^{\text{q}}(t) = \frac{1}{2} [V^+(t) - V^-(t)] \quad (2.61)$$

where $V^{\pm}(t)$ is the source potential on the forward (backward) branch of the contour. With this notation along with Eq. (2.36) the generating function takes the form

$$Z_d[V^{\text{cl}}, V^{\text{q}}] = \left[1 - n_B(\omega_0) \left(e^{-2i \int dt V^{\text{q}}(t)} - 1 \right) \right]^{-1} \quad (2.62)$$

The fact that the generating function depends only on the integral of the quantum component of the source and does not depend on its classical component is a peculiarity of our toy model. (Indeed, since $[\hat{H}, b^\dagger b] = 0$, the number of particles is conserved, making the generating function independent of the classical external potential V^{cl}). The very general statement, though, is

$$Z[V^{\text{cl}}, 0] = 1 \quad (2.63)$$

Indeed, if $V^{\text{q}} = 0$ the source potential is the same on the two branches, $V^+(t) = V^-(t)$, and thus the evolution operator brings the system exactly to its initial state, namely $\hat{\mathcal{U}}_c[V^{\text{cl}}] = \hat{1}$. One crucially needs therefore a fictitious potential $V^{\text{q}}(t)$ to generate observables.

Since the source potential is coupled to the number of particles operator $\hat{n} = \hat{b}^\dagger \hat{b}$, differentiation over $V^{\text{q}}(t)$ generates an expectation value of $-2i\langle \hat{n}(t) \rangle$ (the factor of two here is due to the fact that we insert $\hat{b}^\dagger(t)\hat{b}(t)$ on both branches): $\langle \hat{n}(t) \rangle = (i/2) \delta Z_d[V^{\text{q}}] / \delta V^{\text{q}}(t)|_{V^{\text{q}}=0} = n_B(\omega_0)$, as was established in Section 2.5. The higher-order correlation functions may be obtained by repetitive differentiation of the generating function. To generate irreducible correlators (i.e. cumulants) $\langle \langle \hat{n}^k(t) \rangle \rangle \equiv \langle (\hat{n}(t) - n_B)^k \rangle$ one needs to differentiate the logarithm of the generating function, Eq. (2.62), for example,

$$\begin{aligned}
\langle\langle\hat{n}^2(t)\rangle\rangle &= \left(\frac{i}{2}\right)^2 \frac{\delta^2 \ln Z_d}{\delta [V^q(t)]^2} \Big|_{V=0} = n_B^2 + n_B \\
\langle\langle\hat{n}^3(t)\rangle\rangle &= \left(\frac{i}{2}\right)^3 \frac{\delta^3 \ln Z_d}{\delta [V^q(t)]^3} \Big|_{V=0} = 2n_B^3 + 3n_B^2 + n_B \\
\langle\langle\hat{n}^4(t)\rangle\rangle &= \left(\frac{i}{2}\right)^4 \frac{\delta^4 \ln Z_d}{\delta [V^q(t)]^4} \Big|_{V=0} = 6n_B^4 + 12n_B^3 + 7n_B^2 + n_B
\end{aligned} \tag{2.64}$$

and so on.

Let us see now how these results can be reproduced in the continuum technique, without resorting to discretization. The continuum generating function is defined as

$$Z_c[V] = \int \mathbf{D}[\bar{\phi}, \phi] e^{iS[\bar{\phi}, \phi] + iS_V[\bar{\phi}, \phi]} \tag{2.65}$$

where the bare action $S[\bar{\phi}, \phi]$ is given by Eq. (2.30) and

$$\begin{aligned}
S_V[\bar{\phi}, \phi] &= - \int_C dt V(t) \bar{\phi}(t) \phi(t) = - \int_{-\infty}^{+\infty} dt [V^+ \bar{\phi}^+ \phi^+ - V^- \bar{\phi}^- \phi^-] \\
&= - \int_{-\infty}^{+\infty} dt [V^{\text{cl}} (\bar{\phi}^+ \phi^+ - \bar{\phi}^- \phi^-) + V^q (\bar{\phi}^+ \phi^+ + \bar{\phi}^- \phi^-)] = - \int_{-\infty}^{+\infty} dt \vec{\phi}^T \hat{V} \vec{\phi}
\end{aligned} \tag{2.66}$$

where $\vec{\phi} = (\phi^{\text{cl}}, \phi^q)^T$ and

$$\hat{V}(t) = \begin{pmatrix} V^q(t) & V^{\text{cl}}(t) \\ V^{\text{cl}}(t) & V^q(t) \end{pmatrix} \tag{2.67}$$

As a result, for our example of the single bosonic level the continuum generating function is given by

$$\begin{aligned}
Z_c[V^{\text{cl}}, V^q] &= \int \mathbf{D}[\bar{\phi}, \phi] e^{i \int dt \vec{\phi}^T (\hat{G}^{-1} - \hat{V}(t)) \vec{\phi}} = \frac{1}{\text{Tr} \{\hat{\rho}_0\}} \frac{1}{\det [-i\hat{G}^{-1} + i\hat{V}]} \\
&= \frac{1}{\det [1 - \hat{G}\hat{V}]} = e^{-\text{Tr} \ln [1 - \hat{G}\hat{V}]}
\end{aligned} \tag{2.68}$$

where we have used Eq. (2.25) along with the identity $\ln \det \hat{A} = \text{Tr} \ln \hat{A}$. According to Eqs. (2.40) and (2.47), the matrix Green function is

$$\hat{G}(t, t') = -ie^{-i\omega_0(t-t')} \begin{pmatrix} F(\omega_0) & \theta(t-t') \\ -\theta(t'-t) & 0 \end{pmatrix} \tag{2.69}$$

and $F(\omega_0) = 2n_B(\omega_0) + 1$.

The continuum generating function Z_c is not identical to the discrete one, Z_d . However, as we shall show, it possesses the same general properties and generates exactly the same statistics as the number operator. First, let us verify Eq. (2.63) by expanding the logarithm in Eq. (2.68). To first order in $\hat{V}$ one finds $-\text{Tr} \ln [1 - \hat{G}\hat{V}] \approx \text{Tr} \hat{G}\hat{V} = \int dt [G^{\text{R}}(t, t) + G^{\text{A}}(t, t)] V^{\text{cl}}(t) = 0$, where we put $V^q = 0$ and employed Eq. (2.44). To second order one encounters $\int dt dt' G^{\text{R}}(t, t') V^{\text{cl}}(t') G^{\text{R}}(t', t) V^{\text{cl}}(t)$ and similarly for G^{A} . Since $G^{\text{R}}(t, t') = 0$ if $t < t'$, while $G^{\text{R}}(t', t) = 0$ if $t > t'$, the expression

under the integral is nonzero only if $t = t'$. In the continuum limit ($N \rightarrow \infty$) this is the manifold of zero measure, making the integral zero. Clearly the same holds in all orders in V^{cl} . This illustrates how the generic feature of the Keldysh technique, Eq. (2.63), works in our simple example.

Consider now $i\delta Z_c[V] / \delta V^q(t)|_{V=0} = \langle \bar{\phi}^+(t)\phi^+(t) + \bar{\phi}^-(t)\phi^-(t) \rangle$; we refer to Eqs. (2.65) and (2.66) to see this relation. The expectation value of which operator is calculated this way? The naive answer is that $\bar{\phi}(t)\phi(t)$ is generated by $\langle \hat{b}^\dagger(t)\hat{b}(t) \rangle$ and we deal with the sum of this operator inserted on the forward and backward branches. If this were the case, $\bar{\phi}$ would be taken one time step ahead of the ϕ field, as is indeed the case in the discrete representation. However, our continuum expression indiscriminately places both $\bar{\phi}^\pm$ and $\phi^\pm$ at the same time t . One can check that such a "democratic" choice of the time arguments corresponds to the expectation value of the symmetric combination $\hat{F}(t) \equiv \hat{b}^\dagger(t)\hat{b}(t) + \hat{b}(t)\hat{b}^\dagger(t)$. Employing the equal time commutation relation $[\hat{b}(t), \hat{b}^\dagger(t)] = \hat{1}$, one finds $\hat{F}(t) = 2\hat{n}(t) + 1$ and $\langle \hat{F}(t) \rangle = i\delta Z_c[V^{\text{cl}}, V^q] / \delta V^q(t)|_{V=0} = iG^K(t, t) = F(\omega_0)$, as it should be, of course. For higher-order irreducible correlators one obtains

$$\begin{aligned} \langle \langle \hat{F}^2(t) \rangle \rangle &= i^2 \frac{\delta^2 \ln Z_c}{\delta [V^q(t)]^2} \Big|_{V=0} = F^2 - 1; \\ \langle \langle \hat{F}^3(t) \rangle \rangle &= i^3 \frac{\delta^3 \ln Z_c}{\delta [V^q(t)]^3} \Big|_{V=0} = 2F^3 - 2F; \\ \langle \langle \hat{F}^4(t) \rangle \rangle &= i^4 \frac{\delta^4 \ln Z_c}{\delta [V^q(t)]^4} \Big|_{V=0} = 6F^4 - 8F^2 + 2; \end{aligned} \quad (2.70)$$

and so on. To see how it works, consider, for example, the third-order term in the expansion of $\ln Z_c = -\text{Tr} \ln[1 - \hat{G}\hat{V}]$ in Eq. (2.68) in powers of $V^q(t)$ at $V^{\text{cl}} = 0$:

$$\begin{aligned} \frac{1}{3} \text{Tr} \{(\hat{G}\hat{V})^3\} &= \frac{1}{3} \int dt dt' dt'' \text{Tr} \{ \hat{G}(t, t') V^q(t') \hat{G}(t', t'') V^q(t'') \hat{G}(t'', t) V^q(t) \} \\ &= i \frac{F^3}{3} \left(\int dt V^q(t) \right)^3 - iF \int dt V^q(t) \left(\int_t dt' V^q(t') \right)^2 \\ &= i \frac{F^3 - F}{3} \left(\int dt V^q(t) \right)^3 \end{aligned}$$

To calculate the last integral in the intermediate expression here, one introduces $W(t) = \int_t V^q(t)$ and therefore $V^q = -\dot{W}$, and the integral in question is thus $-\int dt \dot{W} W^2 = -\int dW W^2 = -(1/3)W^3(t)|_{-\infty}^{\infty} = (1/3)(\int dt V^q)^3$. Differentiating over V^q three times, one arrives at Eq. (2.70).

Substituting $\hat{F} = 2\hat{n} + 1$ and $F = 2n_B + 1$, it is easy to check that the respective moments (2.64) and (2.70) are exactly equivalent! Therefore, although the generating functions Z_d and Z_c generate slightly different sets of cumulants, their statistical content is equivalent. From now on we shall always deal with the continuum version, circumventing the tedious discretization procedure.

The generating function $Z[V^q]$ gives access not only to the moments, but to a full counting statistics of the operator $\hat{n}(t_0)$, or $\hat{F}(t_0)$. Let us define the probability of measuring n bosons at a time t_0 as $\mathcal{P}(n)$. Then $\langle \hat{n}^k(t_0) \rangle = \int dn n^k \mathcal{P}(n)$. The generating function $Z[\eta] \equiv \int dn e^{i\eta n} \mathcal{P}(n) = \sum_k (i\eta)^k \langle \hat{n}^k(t_0) \rangle / k!$, where η is called the counting "field." Comparing this with $Z_d[V^q]$, one notices that $Z[\eta]$ may be obtained from it by the substitution $V^q(t) = -(\eta/2)\delta(t - t_0)$. Employing Eq. (2.60), one finds

$$Z[\eta] = \frac{1 - \rho(\omega_0)}{1 - \rho(\omega_0) e^{i\eta}} = (1 - \rho(\omega_0)) \sum_{k=0}^{\infty} [\rho(\omega_0)]^k e^{ik\eta} \quad (2.71)$$

Performing the inverse Fourier transform and recalling that $\rho(\omega_0) = e^{-\beta(\omega_0 - \mu)}$, one finds

$$\mathcal{P}(n) = \sum_{k=0}^{\infty} \delta(n - k) (1 - e^{-\beta(\omega_0 - \mu)}) e^{-\beta(\omega_0 - \mu)k} \quad (2.72)$$

That is, one can measure only an integer number of bosons, and the corresponding probability is proportional to $e^{-\beta(E_n - \mu n)}$, where the energy $E_n = n\omega_0$. This is, of course, a trivial result, which we have already de facto employed in Eq. (2.14). The important message, however, is that the counting field η is nothing but a particular realization of the quantum source field $V^q(t)$, tailored to generate an appropriate statistic. As opposed to the calculation of the moments (2.64) and (2.70), one should not put the quantum source to zero when the full statistics are evaluated. We shall employ this lesson in Sections 4.10, 13.3, and 15.4 to discuss less obvious examples of the full counting statistics.

11.2.10 2.10 Problems

2.10.1 Uncertainty Principle

Define two Hermitian operators $X = (\hat{b}^\dagger + \hat{b})/\sqrt{2}$ and $P = i(\hat{b}^\dagger - \hat{b})/\sqrt{2}$. Verify that they satisfy the canonical commutation relation $[X, P] = i$. Show that the Heisenberg uncertainty principle is saturated by the coherent states, namely

$$\sqrt{\langle (X - \langle X \rangle)^2 \rangle} \sqrt{\langle (P - \langle P \rangle)^2 \rangle} = \frac{1}{2} \quad (2.73)$$

where $\langle \dots \rangle = e^{-|\phi|^2} \langle \phi | \dots | \phi \rangle$ stands for the expectation value in the normalized coherent state.

2.10.2 Bogoliubov Transformation

Consider a quadratic Hamiltonian of the following form:

$$\hat{H} = \Delta \hat{b}^\dagger \hat{b} + \lambda (\hat{b}^\dagger \hat{b}^\dagger + \hat{b} \hat{b}) = (\hat{b}^\dagger, \hat{b}) \begin{pmatrix} \Delta/2 & \lambda \\ \lambda & \Delta/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{b} \\ \hat{b}^\dagger \end{pmatrix} - \frac{\Delta}{2}. \quad (2.74)$$

Such Hamiltonians appear as a rotating wave description of a parametrically driven oscillator, Section 5.5, and in the theory of Bose condensation, Chapter 8. In the former case Δ represents a frequency detuning and λ is the driving amplitude. Show that with the help of the canonical Bogoliubov transformation

$$\hat{b} = \cosh(\alpha) \hat{\mathbf{b}} + \sinh(\alpha) \hat{\mathbf{b}}^\dagger; \quad \hat{b}^\dagger = \cosh(\alpha) \hat{\mathbf{b}}^\dagger + \sinh(\alpha) \hat{\mathbf{b}} \quad (2.75)$$

where $[\hat{\mathbf{b}}, \hat{\mathbf{b}}^\dagger] = 1$ and $\tanh(2\alpha) = -2\lambda/\Delta$, the Hamiltonian (2.74) may be brought to the diagonal form (up to a constant) $\hat{H} = \Omega \hat{\mathbf{b}}^\dagger \hat{\mathbf{b}}$, and $\Omega^2 = \Delta^2 - 4\lambda^2$. Show that its normalized ground state, $|0\rangle$, found from the condition $\hat{\mathbf{b}}|0\rangle = 0$, is given by the coherent state of pairs

$$|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{\cosh(\alpha)}} e^{-\tanh(\alpha) \hat{\mathbf{b}}^\dagger \hat{\mathbf{b}}^\dagger / 2} |0\rangle, \quad (2.76)$$

where $|0\rangle$ is the ground state of the bare oscillator, $\hat{b}|0\rangle = 0$. Notice that it is a superposition of only even-particle number states. All the other eigenstates $|\mathbf{n}\rangle = (\hat{b}^\dagger)^n |0\rangle / \sqrt{n!}$ also have a definite parity, which alternates between even and odd. Show that the expected number of quanta of the bare oscillator in the ground state of (2.74) is $\langle 0|\hat{b}^\dagger \hat{b}|0\rangle = \sinh^2(\alpha)$. It diverges if $\lambda \rightarrow \Delta/2$, signaling an instability of the driven oscillator; see Section 5.5.

Using the first quantization representation, where $\hat{b} = (\partial_X + X)/\sqrt{2}$ and $\hat{b}^\dagger = (-\partial_X + X)/\sqrt{2}$, which satisfy $[\hat{b}, \hat{b}^\dagger] = 1$, rewrite the Hamiltonian (2.74) as a differential operator. Discuss the meaning of Eq. (2.76) in terms of the oscillator eigenstates in the coordinate representation, $\psi_n(X)$.

2.10.3 Keldysh Perturbation Theory

Expand the exponent e^{iS} in (2.50) up to the second order in S_{int} , (2.56), and employ the Wick theorem (2.21) to calculate perturbative interaction corrections to the partition function and components of the matrix Green function. Represent them diagrammatically using notations of Figs. 2.2 and 2.3. Show that (i) the partition function does not acquire any perturbative corrections and thus remains $Z = 1$; (ii) retarded and advanced components of the perturbed Green function remain mutually conjugated triangular matrices in the time space; (iii) corrections to the Keldysh component are anti-Hermitian matrices in the time space. You'll need to employ that $G^R(t, t) + G^A(t, t) = 0$, Eq. (2.44), and $G^R(t, t') G^A(t, t') = 0$ due to causality. Some help may be found in Section 6.2.

11.3 Single-Particle Quantum Mechanics

In this chapter we discuss quantum mechanics formulated on the closed time contour. We also derive a real-time version of the Caldeira-Leggett model for a quantum particle interacting with a bath of harmonic oscillators. A semiclassical treatment of quantum tunneling on the closed time contour is developed and used to evaluate the tunneling rate through a time-dependent potential barrier with and without coupling to the bath.

11.3.1 3.1 Harmonic Oscillator

The simplest many-body system of a single bosonic state, considered previously, is equivalent to a quantum harmonic oscillator. To make this connection explicit, consider the Keldysh contour action Eq. (2.28) with the correlator Eq. (2.29) written in terms of the complex field $\phi(t)$. The latter may be parametrized by its real and imaginary parts as

$$\phi(t) = \frac{1}{\sqrt{2\omega_0}} (\omega_0 X(t) + iP(t)), \quad \bar{\phi}(t) = \frac{1}{\sqrt{2\omega_0}} (\omega_0 X(t) - iP(t)). \quad (3.1)$$

In terms of the real fields $P(t)$ and $X(t)$ the action, Eq. (2.28), takes the form

$$S[X, P] = \int_c dt \left[P\dot{X} - \frac{1}{2}P^2 - \frac{\omega_0^2}{2}X^2 \right] \quad (3.2)$$

where the full time derivatives of P^2 , X^2 , and PX were omitted, since they contribute only to the boundary terms, implicit in the continuum notations. (They have to be kept for the proper regularization, though.) Equation (3.2) is nothing but the action of the quantum harmonic oscillator in the Hamiltonian form. One may perform the Gaussian integration over the real field $P(t)$, with the help of Eq. (2.22), to obtain

$$S[X] = \int_c dt \left[\frac{1}{2}\dot{X}^2 - \frac{\omega_0^2}{2}X^2 \right] \quad (3.3)$$

This is the Feynman Lagrangian action of the harmonic oscillator [33], written on the closed time contour. It may be generalized for an arbitrary single-particle potential $V(X)$:

$$S[X] = \int_c dt \left[\frac{1}{2} \dot{X}^2 - V(X) \right] \quad (3.4)$$

One may split the $X(t)$ field into two components, $X^+(t)$ and $X^-(t)$, residing on the forward and backward branches of the contour. The Keldysh rotation for real fields is conveniently defined as

$$X^{\text{cl}}(t) = \frac{1}{2} [X^+(t) + X^-(t)] ; \quad X^{\text{q}}(t) = \frac{1}{2} [X^+(t) - X^-(t)] . \quad (3.5)$$

In terms of these fields the action takes the form

$$S[X^{\text{cl}}, X^{\text{q}}] = \int_{-\infty}^{+\infty} dt \left[-2X^{\text{q}} \ddot{X}^{\text{cl}} - V(X^{\text{cl}} + X^{\text{q}}) + V(X^{\text{cl}} - X^{\text{q}}) \right] \quad (3.6)$$

where the integration by parts was performed on the term $\dot{X}^{\text{q}} \dot{X}^{\text{cl}}$. This is the Keldysh form of the Feynman path integral. The omitted boundary terms provide a convergence factor of the form $\sim i0 (X^{\text{q}})^2$.

If the fluctuations of the quantum component $X^{\text{q}}(t)$ are regarded as small, one may expand the potential to first order and find for the action

$$S[X^{\text{cl}}, X^{\text{q}}] = - \int_{-\infty}^{+\infty} dt \left[2X^{\text{q}} (\ddot{X}^{\text{cl}} + V'(X^{\text{cl}})) + O[(X^{\text{q}})^3] \right] \quad (3.7)$$

where $V'(X) = \partial V(X)/\partial X$. In this approximation the integration over the quantum component, X^{q} , may be explicitly performed, leading to the functional deltafunction of the expression in the round brackets. This delta-function enforces the classical Newtonian dynamics of X^{cl} :

$$\ddot{X}^{\text{cl}} = -V'(X^{\text{cl}}) . \quad (3.8)$$

This is the reason the symmetric (over the forward and backward branches) part of the field is called the classical component. One should be careful with this name, though. If the higher-order terms in X^{q} are kept in the action, both X^{q} and X^{cl} are subject to quantum fluctuations.

Returning to the harmonic oscillator, $V(X) = \omega_0^2 X^2/2$, one may rewrite its Feynman-Keldysh action (3.3) in the matrix form

$$S[\vec{X}] = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \vec{X}^{\text{T}} \hat{D}^{-1} \vec{X} \quad (3.9)$$

where in analogy with the complex field, Eq. (2.51), we introduced

$$\vec{X}(t) = \begin{pmatrix} X^{\text{cl}}(t) \\ X^{\text{q}}(t) \end{pmatrix}; \quad \hat{D}^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & [D^{-1}]^{\text{A}} \\ [D^{-1}]^{\text{R}} & [D^{-1}]^{\text{K}} \end{pmatrix} \quad (3.10)$$

and the superscript T stands for matrix transposition. Here the retarded and advanced components of the quadratic form in the action are given by $\frac{1}{2} [D^{-1}]^{\text{R(A)}} = (i\partial_t \pm i0)^2 - \omega_0^2$. As before, one should understand that this expression is simply a continuous abbreviation for the large lower (upper) triangular matrices with $-\delta_t^{-1}$ along the main diagonal, $2\delta_t^{-1} - \omega_0^2 \delta_t$ along the lower (upper) sub-diagonal, and $-\delta_t^{-1}$ along the second lower (upper) sub-diagonal. This makes the $\hat{D}^{-1}$ matrix symmetric, since its $[D^{-1}]^{\text{K}}$ component must be symmetric by construction (its antisymmetric part does not enter the action). In continuous notation the

Keldysh component $[D^{-1}]^K$ is only a regularization. It is convenient to keep it explicitly, since it suggests the way the matrix $\hat{D}^{-1}$ should be inverted to find the Green function:

$$\langle X^\alpha(t) X^\beta(t') \rangle = \int \mathbf{D}[\vec{X}] X^\alpha(t) X^\beta(t') e^{iS[\vec{X}]} = i\hat{D}^{\alpha\beta}(t, t') \quad (3.11)$$

where $\alpha, \beta = (\text{cl}, \text{q})$ and the matrix inverse of Eq. (3.10) is given by

$$\hat{D}^{\alpha\beta}(t, t') = \begin{pmatrix} D^K(t, t') & D^R(t, t') \\ D^A(t, t') & 0 \end{pmatrix} \quad (3.12)$$

To apply the rules of Gaussian integration for real variables (see Section 2.3), it is crucial that the matrix $\hat{D}^{-1}$ is symmetric. In the Fourier representation components of the equilibrium correlation matrix are given by

$$D^{R(A)}(\epsilon) = \frac{1}{2} \frac{1}{(\epsilon \pm i0)^2 - \omega_0^2} \quad (3.13a)$$

$$D^K(\epsilon) = \coth \frac{\epsilon}{2T} [D^R(\epsilon) - D^A(\epsilon)] \quad (3.13b)$$

where we have assumed an equilibrium thermal distribution with zero chemical potential. One way to check the consistency of the expression for the Keldysh component is to express X^α through $\bar{\phi}^\alpha$ and ϕ^α and employ the correlation functions for the complex fields, derived in Chapter 2. The fact that the chemical potential of a real field must be zero follows directly from the symmetry of $D^K(t, t')$ (making $D^K(\epsilon)$ an even function) and the identity $D^R(-\epsilon) = D^A(\epsilon)$.

The normalization identity, $\int \mathbf{D}[\vec{X}] e^{iS[\vec{X}]} = 1$, is maintained in the following way: (i) first, due to the structure of the $\hat{D}^{-1}$ matrix, explained previously, $\det \left[\frac{1}{i} \hat{D}^{-1} \right] = -\det \left[\frac{1}{i} D^{-1} \right]^R \det \left[\frac{1}{i} D^{-1} \right]^A = (2/\delta_t)^{2N}$; (ii) the integration measure is understood as $\mathbf{D}[\vec{X}] = \prod_{j=1}^N 2 \left(dX_j^{\text{cl}}/\sqrt{2\pi\delta_t} \right) \left(dX_j^{\text{q}}/\sqrt{2\pi\delta_t} \right)$ (in comparison with Eq. (2.22) there is an additional factor of 2, which originates from the Jacobian of the transformation (3.5), and factor δ_t^{-1} at each time slice, coming from the integrations over $P_j = P(t_j)$). According to the real Gaussian identity (2.22) this leads exactly to the proper normalization. One can also understand the normalization in the way discussed after Eq. (2.52a), without resorting to the discrete representation.

11.3.2 3.2 Quantum Particle in Contact with an Environment

Consider a quantum particle with coordinate $X(t)$, placed in a potential $V(X)$ and brought into contact with a bath of harmonic oscillators. The bath oscillators are labeled by an index s and their coordinates are denoted by φ_s . They possess a set of frequencies ω_s . The Keldysh action of such a system is given by the three terms $S = S_p + S_{\text{bath}} + S_{\text{int}}$, where

$$S_p[X] = \int_{-\infty}^{+\infty} dt \left[-2X^{\text{q}} \ddot{X}^{\text{cl}} - V(X^{\text{cl}} + X^{\text{q}}) + V(X^{\text{cl}} - X^{\text{q}}) \right], \quad (3.14a)$$

$$S_{\text{bath}}[\varphi_s] = \frac{1}{2} \sum_s \int_{-\infty}^{+\infty} dt \vec{\varphi}_s^T \hat{D}_s^{-1} \vec{\varphi}_s, \quad (3.14b)$$

$$S_{\text{int}}[X, \varphi_s] = \sum_s g_s \int_{-\infty}^{+\infty} dt \vec{X}^T \hat{\sigma}_1 \vec{\varphi}_s, \quad (3.14c)$$

where the symmetric quadratic form $\hat{D}_s^{-1}$ is given by Eq. (3.10) with the frequency ω_s . The interaction term between the particle and the bath oscillators is taken as $\sum_s g_s \int_{\mathcal{C}} dt X(t) \varphi_s(t) =$

$\sum_s g_s \int dt (X^+ \varphi_s^+ - X^- \varphi_s^-)$. Performing the Keldysh rotation according to Eq. (3.5), one arrives at Eq. (3.14c), where $\hat{\sigma}_1$ is the first Pauli matrix in the Keldysh (cl, q) space. The corresponding coupling constants are denoted by g_s .

One may now integrate out the degrees of freedom of the bath to reduce the problem to the particle coordinate only. Employing Eq. (2.22) for the Gaussian integration over the real variables, one arrives at the so-called dissipative action for the particle:

$$S_{\text{diss}} = \frac{1}{2} \iint_{-\infty}^{+\infty} dt dt' \vec{X}^T(t) \hat{\mathfrak{D}}^{-1}(t-t') \vec{X}(t') \quad (3.15a)$$

$$\hat{\mathfrak{D}}^{-1}(t-t') = -\hat{\sigma}_1 \left[\sum_s g_s^2 \hat{D}_s(t-t') \right] \hat{\sigma}_1 \quad (3.15b)$$

Straightforward matrix multiplication shows that the dissipative quadratic form $\hat{\mathfrak{D}}^{-1}$ possesses the causality structure as, for example, Eq. (3.10). For the Fourier transform of its retarded (advanced) components, one finds

$$[\mathfrak{D}^{-1}(\epsilon)]^{\text{R(A)}} = -\frac{1}{2} \sum_s \frac{g_s^2}{(\epsilon \pm i0)^2 - \omega_s^2} = \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{\omega J(\omega)}{\omega^2 - (\epsilon \pm i0)^2} \quad (3.16)$$

where $J(\omega) = \pi \sum_s (g_s^2/\omega_s) \delta(\omega - \omega_s)$ is the bath spectral density.

We shall assume now that the spectral density behaves as $J(\omega) = 4\gamma\omega$, where γ is a constant at small frequencies. This is the so-called Ohmic bath, which is frequently found in more realistic models of the environment (see, e.g. Section 8.8). Substituting it into Eq. (3.16), one finds

$$[\mathfrak{D}^{-1}(\epsilon)]^{\text{R(A)}} = 4\gamma \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{\omega^2}{\omega^2 - (\epsilon \pm i0)^2} = \text{const} \pm 2i\gamma\epsilon \quad (3.17)$$

where the ϵ -independent real positive constant (the same for R and A components) may be absorbed into the redefinition of the harmonic part of the particle's potential $V(X) = \text{const} \times X^2 + \dots$ and, thus, may be omitted. If the bath is in equilibrium, the Keldysh component of the correlator is set by FDT,

$$[\mathfrak{D}^{-1}(\epsilon)]^{\text{K}} = ([\mathfrak{D}^{\text{R}}]^{-1} - [\mathfrak{D}^{\text{A}}]^{-1}) \coth \frac{\epsilon}{2T} = 4i\gamma\epsilon \coth \frac{\epsilon}{2T}, \quad (3.18)$$

where we assumed that the bath is at temperature T and, as explained after Eqs. (3.13), the chemical potential of the real bath oscillators must be zero. Notice that the validity of this expression does not rely on the particle being at equilibrium, but only the bath. The Keldysh component is an anti-Hermitian operator with a positive-definite imaginary part, rendering convergence of the functional integral over $\vec{X}(t)$.

In the time representation the retarded (advanced) component of the correlator takes a time-local form: $[\mathfrak{D}^{\text{R(A)}}]^{-1} = \mp 2\gamma\delta(t-t')\partial_{t'}$. On the other hand, the Keldysh component is a nonlocal function that may be found by the inverse Fourier transform of Eq. (3.18):

$$[\mathfrak{D}^{-1}(t-t')]^{\text{K}} = 4i\gamma \left[(2T + C)\delta(t-t') - \frac{\pi T^2}{\sinh^2[\pi T(t-t')]} \right] \quad (3.19)$$

where the infinite constant $C = \pi T^2 \int dt/\sinh^2(\pi Tt)$ serves to satisfy the condition $\int dt [\mathfrak{D}^{-1}(t)]^{\text{K}} = [\mathfrak{D}^{-1}(\epsilon=0)]^{\text{K}} = 8i\gamma T$. Finally, one obtains for the Keldysh action of the particle connected to the ohmic bath

$$S[\vec{X}] = \int_{-\infty}^{+\infty} dt \left[-2X^q (\ddot{X}^{\text{cl}} + \gamma \dot{X}^{\text{cl}}) - V(X^{\text{cl}} + X^q) + V(X^{\text{cl}} - X^q) \right] \\ + 2i\gamma \int_{-\infty}^{+\infty} dt \left[2T (X^q(t))^2 + \frac{\pi T^2}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} dt' \frac{(X^q(t) - X^q(t'))^2}{\sinh^2[\pi T(t - t')]} \right] \quad (3.20)$$

where the infinite constant C is absorbed into the two diagonal terms $\sim (X^q(t))^2$. This action satisfies all the causality criteria listed in Section 2.7. Notice that in the present case the Keldysh $q - q$ component is not just a regularization, but a finite term, originating from the coupling to the bath and serving to limit fluctuations. This term breaks the symmetry $S[X^{\text{cl}}, -X^q] = -S[X^{\text{cl}}, X^q]$ present in the initial action (3.14). Such a symmetry of the action is a direct consequence of the time reversal symmetry of the problem. Thus the appearance of a finite $q - q$ component of the action is a manifestation of the breaking of the time-reversal symmetry. The latter takes place due to integrating out the continuum of the bath degrees of freedom.

The other manifestation of the bath is the presence of the friction term $\sim \gamma \partial_t$ in the R and the A components. In equilibrium the friction coefficient and fluctuation amplitude are rigidly connected by the FDT. The quantum dissipative action, Eq. (3.20), is a convenient playground to demonstrate various approximations and connections to other approaches. We shall discuss it in detail in Chapter 4. If only linear terms in X^q are kept in the action (3.20), the integration over $X^q(t)$ results in the functional delta-function, which enforces the following relation:

$$\ddot{X}^{\text{cl}} = -V'(X^{\text{cl}}) - \gamma \dot{X}^{\text{cl}}. \quad (3.21)$$

This is the classical Newtonian equation with the viscous friction force. Remarkably, we have obtained the $\dot{X}^{\text{cl}}$ term in the equation of motion from the action principle. It would not be possible, if not for the doubling of the number of fields X^{cl} and X^q . Indeed, in any action depending on X^{cl} only, terms linear in the first time derivative may be written as a full time derivative and integrated out, not affecting the equation of motion.

11.3.3 3.3 From Matsubara to Keldysh

Most of the texts dealing with equilibrium systems at finite temperature employ the Matsubara technique [11,2,4,6]. This method is designed to treat the equilibrium density matrix $e^{-\beta \hat{H}}$ as the evolution operator. To this end one considers an imaginary time quantum mechanics, with the imaginary time τ restricted to the interval $0 \leq \tau < \beta$. When calculating an expectation value of an observable $\hat{O}(\tau)$, one evaluates a trace of the form $\langle \hat{O} \rangle = \text{Tr} \{ \hat{O}(\tau) e^{-\beta \hat{H}} \}$. To this end one divides the imaginary time interval $[0, \beta]$ into N infinitesimal segments and inserts the resolution of unity in the coherent state basis at each segment, similar to our procedure in Section 2.2. As a result, one ends up with fields, say with coordinate $X(\tau)$, which, in view of the fact that one evaluates the trace, obeys the periodic boundary conditions $X(0) = X(\beta)$. In the Fourier representation it is represented by a discrete set of components $X_m = \int_0^\beta d\tau X(\tau) e^{i\epsilon_m \tau}$, where $\epsilon_m = 2\pi mT$ is a set of Matsubara frequencies and m is an integer.

We shall discuss now how to convert an action written with the Matsubara technique into the Keldysh representation. This may be useful, if one wishes to extend treatment of the problem to non-equilibrium or time-dependent conditions. As an example consider the following bosonic Matsubara action:

$$S[X_m] = \frac{i}{2} \gamma T \sum_{m=-\infty}^{\infty} |\epsilon_m| |X_m|^2 \quad (3.22)$$

Due to the absolute value sign, $|\epsilon_m| \neq i\partial_\tau$. In fact, in the imaginary time representation the kernel $K_m = |\epsilon_m|$ acquires the form $K(\tau) = \sum_m |\epsilon_m| e^{-i\epsilon_m \tau} = C\delta(\tau) - \pi T \sin^{-2}(\pi T \tau)$, where the infinite constant C is chosen to satisfy normalization, $\int_0^\beta d\tau K(\tau) = K_0 = 0$. As a result, in the imaginary time representation the action (3.22) obtains the following nonlocal form:

$$\begin{aligned} S[X] &= \frac{i}{2} \gamma T \int_0^\beta \int_0^\beta d\tau d\tau' X(\tau) K(\tau - \tau') X(\tau') \\ &= \frac{i}{4\pi} \gamma \int_0^\beta \int_0^\beta d\tau d\tau' \frac{\pi^2 T^2}{\sin^2[\pi T(\tau - \tau')]} (X(\tau) - X(\tau'))^2 \end{aligned} \quad (3.23)$$

This action is frequently named after Caldeira and Leggett [34], who used it to investigate the influence of dissipation on quantum tunneling.

To transform to the Keldysh representation one proceeds along the following steps: (i) double the number of degrees of freedom, correspondingly doubling the action, $X \rightarrow \vec{X} = (X^{\text{cl}}, X^{\text{q}})^T$ and consider the latter as functions of the real time t or real frequency ϵ ; (ii) according to the causality structure, Section 2.7, the general form of the quadratic time translationally invariant Keldysh action is:

$$S[\vec{X}] = \gamma \int \frac{d\epsilon}{2\pi} (X_\epsilon^{\text{cl}}, X_\epsilon^{\text{q}}) \begin{pmatrix} 0 & K^{\text{A}}(\epsilon) \\ K^{\text{R}}(\epsilon) & K^{\text{K}}(\epsilon) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X_\epsilon^{\text{cl}} \\ X_\epsilon^{\text{q}} \end{pmatrix}; \quad (3.24)$$

(iii) the retarded (advanced) component $K^{\text{R(A)}}(\epsilon)$ is the analytic continuation of the Matsubara correlator $K(\epsilon_m) = |\epsilon_m|$ from the upper (lower) half-plane of the complex variable ϵ_m to the real axis: $\mp i\epsilon_m \rightarrow \epsilon$, see [2]. This leads to $K^{\text{R(A)}}(\epsilon) = \pm i\epsilon$; (iv) in equilibrium the Keldysh component follows from FDT: $K^{\text{K}}(\epsilon) = (K^{\text{R}}(\epsilon) - K^{\text{A}}(\epsilon)) \coth(\epsilon/2T) = 2i\epsilon \coth(\epsilon/2T)$; see Eqs. (3.17) and (3.18). We found thus that $\gamma \hat{K}(\epsilon) = \frac{1}{2} \hat{\mathfrak{D}}^{-1}(\epsilon)$ and therefore the Keldysh counterpart of the Matsubara action, Eq. (3.22) or (3.23), is the already familiar dissipative action (3.20) (without the potential and inertial terms, of course). One may now include external fields and allow the system to deviate from equilibrium.

11.3.4 3.4 Quantum Tunneling in a Time-Dependent Potential

We shall discuss here the quasi-classical description of quantum mechanical tunneling. The quasi-classical approach originates from evaluating the Feynman path integral in the stationary path approximation. Taking the variation of the Feynman action, one arrives at the classical Newtonian equation of motion. At first glance, the latter fails to describe motion in the classically forbidden under-barrier region. Let us look at it more closely, however. In particular, for a particle with unit mass and energy $E = P^2/2 + V(X)$ one finds

$$P(t) = \frac{dX}{dt} = \sqrt{2(E - V(X))} \quad (3.25)$$

Integrating this equation, one finds, for the time t needed to reach infinity starting from a point X ,

$$t(X) = \int_X^\infty \frac{dX'}{\sqrt{2(E - V(X'))}} \quad (3.26)$$

As long as $X > X_2$, such that $E > V(X)$, the corresponding time is real; see Fig. 3.1. For $X_1 < X < X_2$, where $E < V(X)$, the time changes along the imaginary direction. Finally, for $X < X_1$ the time is complex, $t + i\tau_0$, with a constant imaginary part

$\tau_0 = \int_{X_1}^{X_2} dX / \sqrt{2(V(X) - E)}$. Therefore, for a tunneling trajectory, with X going from negative to positive infinity, the time evolves along the $\mathcal{C}^+$ contour depicted in Fig. 3.2.

If one wants the tunneling trajectory to be a solution of the stationary path equation, one has to consider the evolution operator along the contour $\mathcal{C}^+$ in the complex time plane; see Fig. 3.2. The semiclassical approximation for the tunneling amplitude is given by the exponentiated action along the $\mathcal{C}^+$ contour. To calculate the tunneling probability one has to supplement the latter with the conjugated backward contour $\mathcal{C}^-$; see Fig. 3.2. Actually, the locations in time of the vertical parts of the contour are not necessarily the same on the forward and backward branches. This freedom is important for the treatment of multiple tunneling events. Since our immediate goal is to find the probability of a single tunneling event, we can restrict ourselves to the particular contour drawn in Fig. 3.2.

With exponential accuracy, the tunneling probability for a particle with energy E is given by

$$P(E) \sim e^{i \int_{\mathcal{C}^+ + \mathcal{C}^-} dt [\frac{1}{2} \dot{X}^2 - V(X) + E]} \quad (3.27)$$

where $X(t)$ is a solution of the classical equation of motion $\ddot{X} = -V'(X)$ along the contour. The last term in the action, $\int dt E = E(t_f - t_i)$, where t_f is the final point on $\mathcal{C}^-$ and t_i is the initial point on $\mathcal{C}^+$, serves to fix the energy of the particle. Indeed, demanding stationarity with respect to variations over $t_{f,i}$ and using [35] $\delta S / \delta t_{f,i} = \mp H$, one finds that the energy is fixed on both branches of the contour $\dot{X}^2/2 + V(X) = E$. An alternative way of looking at this term is to view it as a Fourier transform from the time to the energy representation.

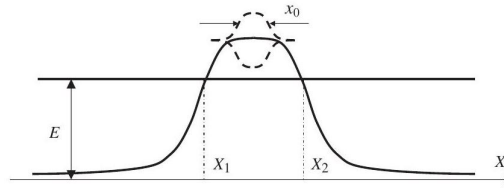


Figure 3.1 Tunneling potential $V(X)$ and classical turning points X_1 and X_2 . Time goes in the imaginary direction for $X_1 < X < X_2$. The dashed lines show a small time-dependent part of the potential, Eq. (3.29).

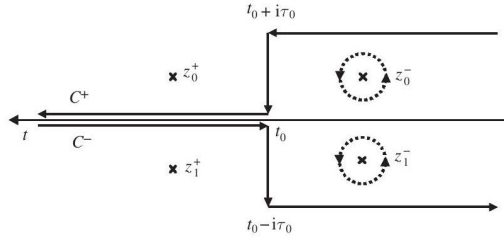


Figure 3.2 The time contour for semiclassical evaluation of the tunneling probability. The poles at $t = z_n^\pm$ appear upon perturbative treatment of a time-dependent potential. After deforming the contour (dotted lines) only the poles at z_0^- and z_1^- contribute to the action.

It is easy to see that the action along the horizontal parts of the contour sums up to zero. Indeed, the action of the backward branch cancels exactly that of the forward one. It is therefore the action along the two vertical segments that remains. With the help of the classical equation of motion (3.25), the latter is given by

$$iS_0 = i \int_{i\tau_0}^{-i\tau_0} dt \dot{X}^2 = 2i \int_{X_1}^{X_2} dX \dot{X} = -2 \int_{X_1}^{X_2} dX \sqrt{2(V(X) - E)}. \quad (3.28)$$

For the tunneling probability one finds $P(E) \sim e^{iS_0}$. This is the well-known WKB result [36], which is in fact obtained by the usual trick [36] of considering the imaginary time Schrödinger equation. (Indeed, the horizontal parts of the contour were inconsequential so far.)

However, doing the problem in the way we have presented allows one to consider tunneling in the presence of a time-dependent potential [37]. To be specific, let us consider a potential of the form (see Fig.3.1)

$$V(X, t) = -\frac{1}{2}\omega_0^2 X^2 + \frac{\varepsilon x_0^2}{X^2 + x_0^2} \cos \Omega t, \quad (3.29)$$

which consists of a parabolic barrier, along with the localized time-dependent potential, oscillating with a frequency Ω . We shall assume that the amplitude of the latter is small and consider a correction to the action linear in ε . To this end we need to find a semiclassical tunneling trajectory $X(t)$ of the unperturbed potential and substitute it into the time-dependent part of the action:

$$iS_1 = -i\varepsilon x_0^2 \int_{c^+ + c^-} dt \frac{\cos \Omega t}{X^2(t) + x_0^2} \quad (3.30)$$

The tunneling trajectory of the particle with energy $E < 0$ in the unperturbed potential $-\omega_0^2 X^2/2$ is given by

$$X(t) = X_2 \cosh(\omega_0(t - t_0)), \quad X_2 = \sqrt{-2E}/\omega_0 \quad (3.31)$$

At time $t = -\infty + i\tau_0$ the particle starts at $X = -\infty$ and reaches the point $X_1 = -X_2$ at time $t = t_0 + i\tau_0$. Then it spends an imaginary time $i\tau_0 = i\pi/\omega_0$ under the barrier where $X(t_0 + i\tau) = X_2 \cos \omega_0 \tau$ and finally continues to move in real time from $X = X_2$ toward $X = \infty$. The integral in Eq. (3.30) has poles in the complex time plane at $t = z_n^\pm$, where $z_n^\pm = t_0 \pm \omega_0^{-1} \operatorname{arcsinh}(x_0/X_2) + i\tau_0(1/2 - n)$ and n is an integer. Two of these poles are located inside the contour, z_0^- and z_1^- ; see Fig. 3.2. Deforming the contour to run around the poles and evaluating the integral in Eq. (3.30) with the help of the residue theorem, one finds

$$iS_1 = \frac{2\varepsilon\tau_0 \cos \alpha}{\sqrt{(X_2/x_0)^2 + 1}} \cosh \frac{\Omega\tau_0}{2} \quad (3.32)$$

where $\alpha = \Omega t_0 - (\Omega/\omega_0) \operatorname{arcsinh}(x_0/X_2)$. The tunneling probability is given by $P(E) \sim e^{iS_0 + iS_1}$, where in the present case $iS_0 = 2E\tau_0 = 2\pi E/\omega_0$ (remember that $E < 0$). The correction iS_1 has a random sign, dictated by $\cos \alpha$, which depends on t_0 - the free parameter of the tunneling trajectory (3.31). One should now fix t_0 by maximizing the tunneling probability, that is demanding $\cos \alpha = 1$. This way one obtains for the tunneling probability in the presence of the oscillating field

$$P(E) \sim e^{-2|E|\tau_0} \exp \left\{ \frac{2\varepsilon\tau_0}{\sqrt{(X_2/x_0)^2 + 1}} \cosh \frac{\Omega\tau_0}{2} \right\}. \quad (3.33)$$

Therefore, the tunneling probability is exponentially enhanced! The most surprising feature of this result is that at high frequency $\Omega\tau_0 \gg 1$ the enhancement parameter is itself exponentially large $\sim \varepsilon\tau_0 e^{\Omega\tau_0/2}$ [37]. This does not mean that a weak high-frequency field can make the barrier completely transparent. It rather means that there is a surprisingly small scale of the ac modulation amplitude $\varepsilon \sim \omega_0 e^{-\Omega\tau_0/2}$, beyond which the linear correction to the action is not sufficient.

To understand this behavior qualitatively, consider absorption of n quanta of energy Ω . It elevates the energy of an incoming particle to $E + \Omega n$ and therefore changes its tunneling action to $iS_0(E + \Omega n) \approx iS_0 + 2\tau_0\Omega n$, since quite generally $\partial(iS_0)/\partial E = 2\tau_0$, where τ_0 is the (imaginary) time the particle spends under the barrier. The amplitude of the n -quanta absorption process may be estimated as $(\varepsilon/\Omega)^n/n!$. As a result, the probability of tunneling

upon absorption of n quanta from the ac field is $e^{iS_0+2\tau_0\Omega n}(\varepsilon/\Omega n)^{2n}$. Optimizing over n , one finds $iS_1 \sim (\varepsilon/\Omega)e^{\Omega\tau_0}$, similarly to what we found earlier. The difference from the actual result, Eq. (3.33), originates in the overestimated absorption amplitude (the actual one is probably reduced by another factor of $n!$). This consideration shows that the results are applicable as long as $\Omega \ll |E|$.

11.3.5 3.5 Dissipative Quantum Tunneling

Consider a particle with unit mass moving in a potential

$$V(X) = V_0 \left[\delta \left(\frac{X}{a} \right)^2 - \left(\frac{X}{a} \right)^3 \right] \quad (3.34)$$

where δ is a dimensionless bifurcation parameter, which governs the shape of the potential. For $\delta > 0$ the potential exhibits a metastable minimum at $X = 0$; see Fig. 3.3(a). If $V_0 \gg 1/(\delta^5 a^2)$ one may disregard energy quantization in the metastable well and consider escape of the particle with zero energy, $E = 0$, initially trapped in the metastable minimum. The semiclassical escape trajectory according to Eq. (3.26) is given by

$$X(t) = \frac{\delta a}{\cos^2 \frac{\omega_0(t-t_0)}{2}} \quad (3.35)$$

where $\omega_0 = \sqrt{2V_0\delta/a^2}$. The contour $\mathcal{C}^+$, see Fig. 3.3(b), proceeds along $t + i\tau_0$, where $t \in]-\infty, t_0]$, then goes along the imaginary axis from $t = t_0 + i\tau_0$ to $t = t_0$ and finally goes along the real-time axis from $t = t_0$ to $t = t_0 + \pi/\omega_0$; see Fig. 3.3(b). In the coordinate space the three pieces of the $\mathcal{C}^+$ contour correspond to (i) the particle staying at $X = 0$; (ii) the particle moving under the barrier, where $X(t_0 + i\tau) = \delta a / \cosh^2(\omega_0\tau/2)$; (iii) the classical motion from the "resurfacing" point $X = \delta a$ toward $X = \infty$. The imaginary time spent under the barrier is infinite in the present case, $\tau_0 = \infty$. The presence of the poles on the real axis in Eq. (3.35) is an artefact of the too-steep potential drop at $X > \delta a$, allowing the particle to reach $X = \infty$ in a finite time. According to Eq. (3.28), the under-the-barrier action is given by

$$iS_0 = -2 \int_0^{\delta a} dX \sqrt{2V(X)} = -\frac{8}{15} \sqrt{2V_0} a \delta^{5/2} \quad (3.36)$$

As long as $|iS_0| \gg 1$, the escape rate from the metastable well is $W \propto \omega_0 e^{iS_0}$.

We now consider how the coupling to the ohmic bath affects the tunneling escape rate. In this paragraph we restrict ourselves to the purely quantum, that is, zerotemperature scenario, $T = 0$ (the high-temperature case is discussed in Chapter 4).

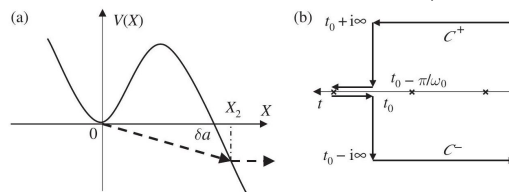


Figure 3.3 (a) Potential (3.34) with the metastable minimum at $X = 0$. If a particle loses energy by exciting the bath, the tunneling trajectory is plotted schematically by the dashed line, with the "resurfacing" point X_2 . (b) Contour in the complex time plane. The particle reaches $X = +\infty$ at $t = t_0 + \pi/\omega_0$. There is an infinite set of poles of Eq. (3.35) at $t = t_0 - \pi(1+2n)/\omega_0$.

Since all the bath oscillators are in their ground states, they cannot transfer energy to the particle. Therefore, one does not expect any activation-like acceleration of the escape. On the other hand, the particle is very far from its ground state and may excite the bath oscillators during its escape. Such processes lead to the particle losing its energy and "sinking" deeper

into the barrier; see Fig. 3.3(a). As a result, one expects that the particle emerges from under the barrier somewhere at $X = X_2 > \delta a$. (In fact, we'll see that in the limit of very strong coupling to the bath there is a universal result for such a "resurfacing" point $X_2 = \frac{4}{3}\delta a$.) At $X > X_2$ the particle moves in real time, and its action is real and cancels between the forward and backward branches of the contour. The finite imaginary part of the action is accumulated during the motion along the imaginary time direction $t = i\tau$. Taking the limit $T \rightarrow 0$ in Eq. (3.23), one finds for the imaginary time action

$$S[X] = i \int d\tau \left\{ \frac{1}{2} (\partial_\tau X)^2 + V(X) + \frac{\gamma}{4\pi} \int d\tau' \frac{(X(t_0 + i\tau) - X(t_0 + i\tau'))^2}{(\tau - \tau')^2} \right\}. \quad (3.37)$$

Variation of this action with respect to $X(t_0 + i\tau)$ leads to the semiclassical equation for under the barrier motion:

$$\partial_\tau^2 X = V'(X) + \frac{\gamma}{\pi} \int d\tau' \frac{X(t_0 + i\tau) - X(t_0 + i\tau')}{(\tau - \tau')^2}, \quad (3.38)$$

where the integral is understood as a principal value. A general solution of this equation is not known. In the limit of weak dissipation, $\gamma \ll \omega_0$, one may find a correction to the tunneling action using perturbation theory. To this end one needs to substitute the imaginary time tunneling trajectory $X(t_0 + i\tau)$, given by Eq. (3.35), into the last term in Eq. (3.37). This way one finds for the small dissipative correction to the bare tunneling action (3.36) that $i\delta S_{\text{diss}} = -(12\zeta(3)/\pi^3)\gamma a^2 \delta^2$. Notice that this correction, being smaller than the bare tunneling action (3.36), may still result in the exponential suppression of the tunneling rate by the dissipation.

As was first realized by Caldeira and Leggett [34], one may also find a solution of Eq. (3.38) in the opposite limit of strong dissipation $\gamma \gg \omega_0$. In this case the inertia term $\partial_\tau^2 X$ on the left-hand side of the equation of motion (3.38) may be neglected. One can check then by direct substitution that the following trajectory is indeed the desired solution:²

$$X(t) = \frac{\frac{4}{3}\delta a}{1 - \omega_1^2(t - t_0)^2} \quad (3.39)$$

where $t = t_0 + i\tau$ and $\omega_1 = 2V_0\delta/(\gamma a^2) = \omega_0^2/\gamma$. At $t = t_0 + i\infty$ it starts in the metastable minimum $X = 0$ and reaches $X_2 = 4\delta a/3$ at $t = t_0 + i0$. Here the particle emerges from under the barrier and continues its motion in real time. The action (3.37) on this trajectory is given by (the inertia term $(\partial_\tau X)^2/2$ is neglected)

$$iS_{\text{diss}} = -\frac{2\pi}{9}\gamma a^2 \delta^2 \quad (3.40)$$

Notice that $S_{\text{diss}}/S_0 \sim \gamma/\omega_0 \gg 1$ in the limit of strong dissipation. As a result, the coupling to the bath leads to the exponential suppression of the escape rate $W \sim e^{iS_{\text{diss}}}$. Remarkably, the scaling of the action with the bifurcation parameter changes from $\delta^{5/2}$ to δ^2 . One expects that the Caldeira-Leggett scaling, δ^2 , always wins in the immediate vicinity of the bifurcation point, that is, for $\delta \ll 1$. Indeed, since $\omega_0 \sim \delta^{1/2}$, for $\delta \ll 1$ the dissipation is always strong, that is, $\omega_0 \ll \gamma$. It may seem paradoxical that the escape rate is independent of the barrier height V_0 . In fact, taking the inertia term $(\partial_\tau X)^2/2$ in Eq. (3.37) as a perturbation, that is, substituting in it the inertia-less solution (3.39), one finds a correction to the action (3.40)

¹ The calculations are easier in the Fourier representation, where the $T = 0$ Matsubara components of the trajectory (3.35) are given by $X_m = 4\pi\delta a\omega_0^{-2}\epsilon_m/\sinh(\pi\epsilon_m/\omega_0)$. Employing the dissipative action in the form of Eq. (3.22) and substituting summation by integration, one finds

$$i\delta S_{\text{diss}} = -(\gamma/2) (4\pi\delta a\omega_0^{-2})^2 \int (d\epsilon/2\pi) \epsilon^3 / \sinh^2(\pi\epsilon/\omega_0) = - (12\zeta(3)/\pi^3) \gamma a^2 \delta^2$$

² Indeed, putting $t_0 = 0$ for simplicity,

$$f \, d\tau' \frac{X(i\tau) - X(i\tau')}{(\tau - \tau')^2} = \frac{4}{3} \delta a \omega_1 f \frac{dz'}{(z' - z)^2} \left[\frac{1}{1 + z^2} - \frac{1}{1 + z'^2} \right] = \frac{4}{3} \frac{\delta a \omega_1}{1 + z^2} \text{Re} \int \frac{dz'}{z' - z - i0} \frac{z' + z}{1 + z'^2}$$

where $z = \omega_1 \tau$. Evaluating the integral with the help of the residue theorem, one finds

$$\frac{4\pi}{3} \frac{\delta a \omega_1}{1 + (\omega_1 \tau)^2} \text{Re} \frac{i + \omega_1 \tau}{i - \omega_1 \tau} = \frac{4\pi}{3} \delta a \omega_1 \frac{(\omega_1 \tau)^2 - 1}{[1 + (\omega_1 \tau)^2]^2} = \frac{-\pi V_0}{\gamma} \left[\frac{2\delta X(\tau)}{a^2} - \frac{3X^2(\tau)}{a^3} \right] = \frac{-\pi}{\gamma} V'(X)$$

$i\delta S_{\text{inert}} = -4\pi V_0 \delta^3 / (9\gamma)$. Although smaller than the dissipative action (3.40), this correction still leads to the exponential dependence of the tunneling rate on V_0 .

One may notice that the real-time Caldeira-Leggett solution (3.39) does not satisfy Newton's equation with viscous friction, Eq. (3.21). This is because during the imaginary-time part of the trajectory the particle has excited the bath oscillators. The latter also continue to evolve in real time, exerting an additional force on the particle. As discussed in Section 3.3, the real-time counterpart of the dissipative action (3.37) is the Keldysh action (3.20). The corresponding semiclassical equation of motion is given by Eq. (3.21). Combining Eqs. (3.21) and (3.38), one finds the equation of motion for $X(t)$ on the real-time part of the contour, Fig. 3.3b,

$$\ddot{X} = -V'(X) - \gamma \dot{X} - \frac{\gamma}{\pi} \int d\tau \frac{X(t_0 + i\tau)}{(t - t_0 - i\tau)^2} \quad (3.41)$$

where the τ -integration runs along the vertical part of the contour in Fig. 3.3b. It is easy to check that, neglecting the inertia term $\ddot{X}$, the Caldeira-Leggett solution (3.39) satisfies this equation too. Therefore, the trajectory (3.39) solves the semiclassical equations of motion along the entire contour! Notice that the tunneling event completed at $t = t_0$ exerts a slowly decaying $\sim (t - t_0)^{-2}$ (for $t - t_0 \gg \omega_1^{-1}$) force, altering the subsequent motion of the particle in real time. This fact may qualitatively change the picture of tunneling between two resonant wells, where multiple tunneling events are important. We shall not develop this theory here, referring the reader to a review [39].

One can now use the analytic form of the tunneling trajectories, Eqs. (3.35) and (3.39), to investigate the influence of an external time-dependent signal on the escape rates. To this end let us consider a weak spatially uniform oscillatory force by adding the following term to the potential (3.34):

$$V(X, t) = \varepsilon \frac{X}{a} e^{\nu t} \cos \Omega t \quad (3.42)$$

where ν is an infinitesimal energy scale, which describes an adiabatic switching on of the external time-dependent force. To the first order in ε the change in the tunneling action is evaluated by substituting the trajectory (3.35) or (3.39) into the action $S_1 = -i \int_{C^+ + C^-} dt V(X(t), t)$. Due to the factor $e^{\nu t}$ (omitted from now on) the $t = -\infty$ part of the contour does not contribute to the action. Deforming the contour, one finds that the integral is reduced to the contribution of the poles of the $X(t)$ function along the $t < t_0$ part of the real-time axis. For the bare tunneling trajectory, Eq. (3.35), the relevant poles are at $t = z_n = t_0 - (\pi + 2\pi n)/\omega_0$, where

$n = 0, 1, \dots$. Summing over all of them and maximizing over the free parameter t_0 , one finds [37]

$$iS_1 = \frac{\varepsilon\Omega}{\omega_0^2} \frac{4\pi\delta}{\sin(\pi\Omega/\omega_0)} \quad (3.43)$$

For $\Omega = \omega_0, 2\omega_0, \dots$ the external field is in resonance with the small oscillations in the metastable minimum, and the linear response approach fails. In the limit $\Omega \rightarrow 0$ one finds $iS_1 = 4\delta\varepsilon/\omega_0$. This may be directly obtained from Eq. (3.36) by changing δ^2 to $\delta^2 - 3\varepsilon/V_0$. Indeed, the potential (3.34) is equivalent, up to a trivial shift, to $V(X) = V_0 [\delta^2 X/3a - (X/a)^3]$. Therefore, adding to it a static linear term $-\varepsilon X/a$ leads to the aforementioned redefinition of δ^2 .

For the case of strong dissipation, the only relevant pole of the trajectory (3.39) is at $t = t_0 - 1/\omega_1$, which leads to the following correction to the action:

$$iS_1 = \frac{4\pi}{3} \frac{\varepsilon\delta}{\omega_1} = \frac{2\pi}{9} \gamma a^2 \frac{3\varepsilon}{V_0} \quad (3.44)$$

This is nothing but the adiabatic change of the time-independent result (3.40) by the static reduction of $\delta^2 \rightarrow \delta^2 - 3\varepsilon/V_0$. Therefore, for not-too-large frequencies the effect of the ac force on the overdamped tunneling decay is the same as the dc one. At higher frequencies the fact that the $-X^3$ tail of the potential must flatten somewhere becomes important. In this case, the particle does not reach infinity in a finite time. This fact translates into the splitting of the poles and moving them away from the real axis by a small imaginary time $i\tau_s \sim ia/\sqrt{V_0}$. Similarly to Section 3.4, it leads to the exponential enhancement of the ac correction at very high frequencies $iS_1 \propto \varepsilon e^{\Omega\tau_s}$ [37].

11.3.6 3.6 Problems

3.6.1 Feynman-Keldysh Action for Symmetric Potentials

Write the Feynman-Keldysh action (3.6) for some symmetric potentials, for example: (i) $V(X) = -X^2 + gX^4$, and (ii) $V(X) = \cosh X$. Explain the apparent symmetry $X^{\text{cl}} \leftrightarrow X^{\text{q}}$. This symmetry is implicitly broken by regularization and explicitly broken by coupling to a bath. The latter generates terms $\propto (X^{\text{q}})^2$, restricting fluctuation of the quantum component. No terms like $\propto (X^{\text{cl}})^2$ are generated, of course. Take variations of the action and derive coupled classical equations of motion for X^{cl} and X^{q} . Investigate them in the limit $X^{\text{q}} = 0$.

3.6.2 Korshunov Instantons

Consider a dissipative quantum rotator, described by a 2π -periodic coordinate $\Phi(\tau)$. The imaginary time boundary conditions need to be generalized to allow for integer winding numbers W , such that $\Phi(\beta) = \Phi(0) + 2\pi W$. The dissipative action, known as Ambegoakar-Eckern-Schön (AES) action [40], is a generalization of the Caldeira-Leggett action (3.23) for the periodic field:

$$S[\Phi] = i \frac{gT^2}{4} \iint_0^\beta d\tau d\tau' \frac{\sin^2 \left[\frac{\Phi(\tau) - \Phi(\tau')}{2} \right]}{\sin^2 [\pi T (\tau - \tau')]} + q \int_0^\beta d\tau \partial_\tau \Phi(\tau) \quad (3.45)$$

where q is a conjugate variable and the last term constitutes the weight $e^{iq2\pi W}$ of different winding numbers in the imaginary time partition sum.

Perform variation of the action over the field $\Phi(\tau)$ and find the imaginary time, stationary point equation of motion for the field. By doing contour integration in the z -plane, verify that the $W = 1$ realization [41],

$$e^{i\Phi(\tau)} = \frac{z - z_1}{1 - z\bar{z}_1} \quad (3.46)$$

satisfies the equation of motion. Here $z = e^{2\pi i T \tau}$ and z_1 is an arbitrary complex number inside the unit circle, $|z_1| < 1$. Plot $\Phi(\tau)$ for various z_1 . Calculate the action (3.45) and show that it is given by $S = ig/4 + 2\pi q$, independent of z_1 . Therefore, z_1 is a zero mode of the saddle-point solution. This solution may be generalized for an arbitrary $W > 0$ as

$$e^{i\Phi(\tau)} = \prod_{a=1}^W \frac{z - z_a}{1 - z\bar{z}_a} \quad (3.47)$$

while $W < 0$ is obtained from here by $z \rightarrow 1/z$. Verify that the corresponding action is $S_W = ig|W|/4 + 2\pi qW$, and thus z_a with $a = 1, 2, \dots, W$ are all zero modes of this solution. Calculate the partition function as $Z(q) = \sum_W e^{iS_W}$. (Though such calculation misses W -dependent fluctuation factors [42, 44], it gives a qualitatively acceptable result.)

Show that the kinetic part of the action removes the degeneracy of the zero modes, since it exhibits an explicit dependence on z_a parameters

$$S_{\text{kin}} = \frac{1}{4E_c} \int_0^\beta d\tau (\partial_\tau \Phi)^2 = \frac{\pi^2 T}{E_c} \sum_{a,b=1}^W \frac{1 - |z_a|^2 |z_b|^2}{|1 - z_a \bar{z}_b|^2} \quad (3.48)$$

The AES action and its Korshunov's stationary solutions are widely used in the theory of the Coulomb blockade [42, 44, 43], where E_c plays the role of the charging energy of a quantum dot, g is dimensionless conductance between a metallic lead and the dot, and q is a background charge on the dot. Periodicity of the partition function $Z(q)$ with the period one reflects the charge quantization. Notice that for $g \gg 1$ the modulation of the free energy $F(q) = -T \log Z(q)$ is exponentially small. This phenomenon is often referred to as a weak Coulomb blockade. Generalizations of this action to the real-time non-equilibrium situation were discussed in [45, 46].

11.4 Classical Stochastic Systems

This chapter is devoted to the classical limit of the quantum dissipative action obtained in Chapter 3. We show how it yields Langevin, Fokker-Planck, and optimal path descriptions of classical stochastic systems. These approaches are used to discuss activation escape, fluctuation relation, reaction models, and other examples.

11.4.1 4.1 Classical Dissipative Action

In Section 3.2 we derived the Keldysh action for a quantum particle coupled to an Ohmic environment, Eq. (3.20). If only linear terms in the quantum coordinate $X^q(t)$ are kept in this action, it leads to a classical Newtonian equation with a viscous friction force, Eq. (3.21). Such an approximation completely disregards any fluctuations, both quantum and classical. Our goal now is to do better than that and to keep classical thermal fluctuations, while still neglecting quantum effects.

To this end it is convenient to restore the Planck constant $\hbar$ in the action and then take the limit $\hbar \rightarrow 0$. For dimensional reasons, the factor $\hbar^{-1}$ should stay in front of the entire action. To keep the part of the action responsible for the classical equation of motion (3.21) free from the Planck constant it is convenient to rescale the quantum component as $X^q \rightarrow \hbar X^q$. Indeed, when this is done all terms linear in X^q do not contain $\hbar$. Finally, to have the temperature in energy units, one needs to substitute T with $T/\hbar$. As a result, the term $\sim \gamma T (X^q(t))^2$ does

not contain the Planck constant either. The limit $\hbar \rightarrow 0$ is now straightforward: (i) one has to expand $\mp V(X^{\text{cl}} \pm \hbar X^{\text{q}})$ to first order in $\hbar X^{\text{q}}$ and neglect all higher-order terms; (ii) in the last nonlocal term in Eq. (3.20) the $\hbar \rightarrow 0$ limit is taken with the help of the identity

$$\frac{\pi T^2/(2\hbar)}{\sinh^2(\pi T(t-t')/\hbar)} \xrightarrow{\hbar \rightarrow 0} T\delta(t-t'). \quad (4.1)$$

Consequently the nonlocal term becomes local in the $\hbar \rightarrow 0$ limit. Finally, the classical limit of the dissipative action (3.20) is

$$S[\vec{X}] = \int_{-\infty}^{+\infty} dt \left\{ -2X^{\text{q}} \left[\ddot{X}^{\text{cl}} + \gamma \dot{X}^{\text{cl}} + V'(X^{\text{cl}}) \right] + 4i\gamma T (X^{\text{q}})^2 \right\}. \quad (4.2)$$

Notice that this action is local in time. Also, despite its name, the quantum component X^{q} still has a role to play in the classical setting.

Physically the limit $\hbar \rightarrow 0$ means that $\hbar\gamma$ and $\hbar\Omega \ll T$, where Ω is a characteristic frequency of the particle's classical motion. These conditions are sufficient for us to neglect both the time nonlocal term and the higher-order expansion of $V(X^{\text{cl}} \pm \hbar X^{\text{q}})$ in Eq. (3.20). Correspondingly, an alternative way to look at the classical expression (4.2) is to view it as a high-temperature limit of the full quantum action (3.20). On the technical level it amounts to substituting $\coth \epsilon/(2T)$ by $2T/\epsilon$ in, for example, Eq. (3.24). In this chapter we consider some implications of the classical dissipative action (4.2) as well as some of its generalizations.

11.4.2 4.2 Langevin Equation

One way to proceed with the classical action (4.2) is to notice that the exponent of its last term (times i) may be rewritten in the following way:

$$e^{-4\gamma T \int dt (X^{\text{q}}(t))^2} = \int \mathbf{D}[\xi(t)] e^{-\int dt \left[\frac{1}{4\gamma T} \xi^2(t) - 2i\xi(t)X^{\text{q}}(t) \right]} \quad (4.3)$$

This identity is called the Hubbard-Stratonovich transformation, where $\xi(t)$ is an auxiliary Hubbard-Stratonovich field. With the integration measure $\mathbf{D}[\xi(t)]$ normalized such that $\int \mathbf{D}[\xi(t)] e^{-\int dt \xi^2/4\gamma T} = 1$, the identity (4.3) is an immediate consequence of the real Gaussian integral (2.22).

Any observable $\mathcal{O}[X^{\text{cl}}]$ formulated in terms of the classical coordinate (possibly taken in more than one instance of time) may be written as follows (recall that $Z = 1$ and thus no normalization factor is needed):

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{O}[X^{\text{cl}}] \rangle &= \int \mathbf{D}[X^{\text{cl}}, X^{\text{q}}] \mathcal{O}[X^{\text{cl}}] e^{iS[\vec{X}]} \\ &= \int \mathbf{D}[\xi] e^{-\frac{1}{4\gamma T} \int dt \xi^2} \int \mathbf{D}[X^{\text{cl}}] \mathcal{O}[X^{\text{cl}}] \int \mathbf{D}[X^{\text{q}}] e^{-2i \int dt X^{\text{q}} (\ddot{X}^{\text{cl}} + \gamma \dot{X}^{\text{cl}} + V'(X^{\text{cl}}) - \xi)} \\ &= \int \mathbf{D}[\xi] e^{-\frac{1}{4\gamma T} \int dt \xi^2} \int \mathbf{D}[X^{\text{cl}}] \mathcal{O}[X^{\text{cl}}] \delta(\ddot{X}^{\text{cl}} + \gamma \dot{X}^{\text{cl}} + V'(X^{\text{cl}}) - \xi) \end{aligned} \quad (4.4)$$

where the last line includes the functional delta-function of the expression in the round brackets. This functional delta-function enforces its argument to be zero at every moment of time. Therefore, among all possible trajectories $X^{\text{cl}}(t)$ only those contribute to the observable that satisfy

$$\ddot{X}^{\text{cl}} = -\gamma \dot{X}^{\text{cl}} - V'(X^{\text{cl}}) + \xi(t). \quad (4.5)$$

This is the Newton equation with a friction force $-\gamma\dot{X}$ and a time-dependent external force $\xi(t)$, known also as the Langevin equation.

Equation (4.4) implies the following strategy for finding the expectation value $\langle \mathcal{O}[X^{\text{cl}}] \rangle$: (i) choose a particular realization of the force $\xi(t)$; (ii) solve Eq. (4.5) (e.g. numerically); (iii) having its solution, $X^{\text{cl}}(t)$, calculate the observable $\mathcal{O}[X^{\text{cl}}]$; (iv) average the result over an ensemble of realizations of the random force $\xi(t)$ with the Gaussian weight $\exp\{-\int dt \xi^2(t)/4\gamma T\}$. The Gaussian statistics of the random force $\xi(t)$ means that only its first and second irreducible moments must be specified. In our example $\langle \xi(t) \rangle = 0$ (if the first moment is not zero, it may always be viewed as a part of the deterministic force $-V'$). This means that the Langevin equation (4.5) must be supplemented only with the second moment of the random force, given by

$$\langle \xi(t)\xi(t') \rangle = \int \mathbf{D}[\xi] \xi(t)\xi(t') e^{-\frac{1}{4\gamma T} \int dt \xi^2} = 2\gamma T \delta(t - t') \quad (4.6)$$

where we employed the Wick theorem, Eq. (2.23). Since in the frequency representation the right-hand side of this equation is a constant, the corresponding random force is often referred to as a white noise. It originates from the classical thermal fluctuations of bath oscillators. The fact that the noise amplitude is proportional to the friction coefficient, γ , and temperature T is a manifestation of FDT in its classical limit (i.e. $\coth \epsilon/2T \rightarrow 2T/\epsilon$). The latter holds because we assumed the bath to be in thermal equilibrium.

11.4.3 4.3 Multiplicative Noise and Martin-Siggia-Rose Method

The Langevin equation (4.5) with the white noise force (4.6) provides a convenient way for a numerical treatment of the classical dissipative action (4.2). It is not very useful, though, for analytical approaches. In fact, many problems may be initially formulated as Langevin equations with certain random forces, and one would like to have a way to convert them into a proper classical action. Such a procedure, which is in essence an inversion of what was done in the previous section, was formulated by Martin, Siggia, and Rose (MSR) [31]. It is presented here in the form suggested by DeDominicis [32] and Janssen [47].

Consider a Langevin equation

$$\dot{X} = A(X) + b(X)\xi(t) \quad (4.7)$$

We have restricted ourselves to the first-order differential operator ∂_t . It may be viewed as an overdamped limit (i.e. $\gamma \gg \Omega$, where Ω is a characteristic classical frequency) of the Newton equation (4.5). We shall generalize, however, Eq. (4.7) to more than one variable. This will allow us to treat an arbitrary order operator by representing it as a higher-dimensional first-order one (see what follows). The most important difference between Eqs. (4.7) and (4.5) is the fact that the noisy force $\xi(t)$ is modulated in a coordinate-dependent way. This is achieved by multiplying it by a coordinate-dependent function $b(X)$, hence the name multiplicative noise. The Gaussian white noise $\xi(t)$ is fully specified by its second moment, which without loss of generality may be normalized as

$$\langle \xi(t)\xi(t') \rangle = 2\delta(t - t') \quad (4.8)$$

In fact the multiplicative Langevin equation (4.7) is ill-defined unless the regularization of the differential operator is explicitly specified. We shall choose such a regularization in a way to be consistent with the field theoretical treatment of the previous chapters. To this end consider the "partition function"

$$Z[\xi] = \int \mathbf{D}[X(t)] \mathcal{J}[X] \delta(\partial_t X - A(X) - b(X)\xi) \equiv 1 \quad (4.9)$$

It is identically equal to unity by virtue of the integration of the delta-function, provided $\mathcal{J}[X]$ is the Jacobian of the operator $\hat{\mathcal{N}}[X] = \partial_t X - A(X) - b(X)\xi$. The way to interpret Eq. (4.9) is to discretize the time axis, introducing N dimensional vectors $X_j = X(t_j)$ and $\xi_j = \xi(t_j)$, where $j = 1, \dots, N$. The operator takes the form $\mathcal{N}_j = \mathcal{N}_j^{(0)} + \mathcal{N}_{jl}^{(1)} X_l + \frac{1}{2} \mathcal{N}_{jlk}^{(2)} X_l X_k + \dots$, where summation is understood over repeated indices. The Jacobian $\mathcal{J}[X]$ in the partition function (4.9) is given by the absolute value of the determinant of the following $N \times N$ matrix: $\mathcal{J}_{jl} \equiv \partial \mathcal{N}_j / \partial X_l = \mathcal{N}_{jl}^{(1)} + \mathcal{N}_{jlk}^{(2)} X_k + \dots$. It is possible to choose a proper (retarded) regularization, where $\mathcal{J}_{jl}$ is the lower triangular matrix with unit main diagonal (coming entirely from the $\mathcal{N}_{jj}^{(1)} = 1$ term). Clearly, in this case $\mathcal{J} = 1$. To this end let us choose the discrete version of the operator as

$$\mathcal{N}_j = X_j - X_{j-1} - \delta_t [A(X_{j-1}) + b(X_{j-1}) \xi_{j-1}] \quad (4.10)$$

Clearly, in this case $\mathcal{J}_{jj} = 1$ and $\mathcal{J}_{j,j-1} = -1 - \delta_t [A'(X_{j-1}) + b'(X_{j-1}) \xi_{j-1}]$, while all other matrix elements $\mathcal{J}_{jl} = 0$. As a result $\mathcal{J}[X] = 1$ for any realization X_j and ξ_j . The regularization (4.10) of the differential operator (4.7) is retarded since the right-hand side of Eq. (4.7) is always taken in the "preceding" moment of time $j - 1$.

Such an understanding of the Langevin equation (4.7) is called Ito regularization [48, 49] and it is the most convenient one for field-theoretical treatment.

Although the partition function (4.9) is trivial, it is clear that all meaningful observables and correlation functions may be obtained by inserting a factor $\mathcal{O}[X]$ in the functional integral (4.9). Having this in mind along with the fact that $\mathcal{J}[X] = 1$ due to Ito regularization, let us proceed with the partition function. Employing the integral representation of the delta-function with the help of an auxiliary field $X^q(t)$, one obtains

$$Z[\xi] = \int \mathbf{D}[X] \int \mathbf{D}[X^q] e^{-2i \int dt X^q(t) (\partial_t^R X - A(X) - b(X)\xi(t))} \quad (4.11)$$

where ∂_t^R stays for the retarded (Ito) regularization of the operator. One may average now the partition function over the white noise, Eq. (4.8), by performing the Gaussian integration over $\xi(t)$:

$$Z = \int \mathbf{D}[\xi] e^{-\frac{1}{4} \int dt \xi^2} Z[\xi] = \int \mathbf{D}[X, X^q] e^{\int dt [-2i X^q (\partial_t^R X - A(X)) - 4(X^q)^2 D(X)]} \quad (4.12)$$

where $D(X) \equiv b^2(X) \geq 0$. The exponent on the right-hand side is (i times) the MSR action for the Ito-Langevin process (4.7), (4.8). The main difference from the classical limit of the Keldysh action (4.2) is the X -dependent coefficient $D(X)$ in the Keldysh component $\sim (X^q)^2$. It clearly originates from the multiplicative nature of the noise term. Notice also that the retarded derivative $\sim X^q \partial_t^R X$ has a correct regularization of the lower triangular matrix with the unit main diagonal. This shows that taking Ito regularization (4.10) of the Langevin process (4.7), is indeed crucial to establishing correspondence with the Keldysh formalism. Let us reiterate thus the discrete form of the MSR action:

$$S[\vec{X}] = \sum_{j=1}^N \left[-2X_j^q (X_j - X_{j-1} - \delta_t A(X_{j-1})) + 4i\delta_t (X_j^q)^2 D(X_{j-1}) \right] \quad (4.13)$$

which appears to be normally ordered (in the sense that the auxiliary variable X^q is taken one time step ahead of the physical variable X , apart from the diagonal term $-2X_j^q X_j$). The

MSR method provides a way to go from a classical stochastic problem to its proper functional representation. The latter is useful for analytical analysis. Some examples are discussed below.

One can generalize the above consideration for an M -component vector variable $X_\alpha(t)$, where $\alpha = 1, \dots, M$. The corresponding Ito-Langevin process reads as

$$\dot{X}_\alpha = A_\alpha(X) + b_{\alpha\beta}(X)\xi_\beta(t); \quad (4.14)$$

$$\langle \xi_\beta(t)\xi_\gamma(t') \rangle = 2\delta_{\beta\gamma}\delta(t-t'), \quad (4.15)$$

where summation over repeated indices is understood. Introducing the corresponding vector of auxiliary fields X_α^q , one obtains the following MSR action (in the continuous notation):

$$S[\vec{X}] = \int dt \left[-2X_\alpha^q \left(\dot{X}_\alpha - A_\alpha(X) \right) + 4iX_\alpha^q X_\beta^q D_{\alpha\beta}(X) \right] \quad (4.16)$$

where $D_{\alpha\beta}(X) = \sum_{\gamma=1}^M b_{\alpha\gamma}(X)b_{\beta\gamma}(X)$ is a symmetric nonnegative-definite matrix.

¹ As an example, consider the second-order Langevin equation (4.5). Renaming the variables as $X_1 = X^{\text{cl}}$ and $X_2 = \dot{X}^{\text{cl}}$, Eq. (4.5) may be brought to the form of Eq. (4.14) with $A_1(X) = X_2$, $A_2(X) = -\gamma X_2 - V'(X_1)$, and $b_{22} = \sqrt{\gamma T}$, while all other components of $b_{\alpha\beta}$ are zero. One may then write the MSR action (4.16) and notice that X_1^q enters the action only linearly. Integrating over X_1^q , one thus obtains $\delta(\dot{X}_1 - X_2)$, which allows one now to perform integration over X_2 . The resulting action written in terms of $X_1 = X^{\text{cl}}$ and $X_2^q = X^q$ is exactly the classical dissipative action (4.2). This illustrates that considering the first-order Langevin equations is not a real limitation. It also shows that, since the equation $\dot{X}_1 = X_2$ should be understood in the Ito way, namely $X_{1,j} - X_{1,j-1} = \delta_t X_{2,j-1}$, the proper regularization of Eq. (4.5) is $X_j - 2X_{j-1} + X_{j-2} = -\delta_t \gamma (X_{j-1} - X_{j-2}) - \delta_t^2 V'(X_{j-2})$. That is, the corresponding quadratic action again has a lower triangular structure with unit diagonal.

11.4.4 4.4 Optimal Path Approximation

For some applications (most notably associated with rare events) the functional integral in Eq. (4.12) may be evaluated in the stationary path approximation. The corresponding equations are obtained by the variation of the action with respect to $X^q(t)$ and $X(t)$ and have the form

$$\begin{aligned} \dot{X} &= A(X) + 4iX^q D(X) \\ i\dot{X}^q &= -iX^q A'(X) + 2(X^q)^2 D'(X) \end{aligned} \quad (4.17)$$

One possible solution of these equations is $X^q = 0$, while $\dot{X} = A(X)$. Clearly this solution corresponds to the noiseless evolution of $X(t)$. Such a noiseless trajectory is by no means the only solution of the stationary path equations (4.17). There are other solutions, which ought to be considered. Since $X(t)$ as well as $A(X)$ and $D(X)$ are all real, one expects that stationary trajectories of the variable X^q are purely imaginary. This does not contradict, of course, the fact that $\mathbf{D}[X^q] = \prod_j dX_j^q$ integrations run along the real axis. What we observed is that the stationary points are located away from the initial integration contour and therefore the latter must be

deformed in the complex planes of X_j^q to pass through purely imaginary stationary points (unless $X^q = 0$).

⁰¹ Indeed, the eigenvalue equation is $D_{\alpha\beta}s_\beta = b_{\alpha\gamma}b_{\beta\gamma}s_\beta = \lambda s_\alpha$. Multiplying by s_α , one finds $\lambda = (b_{\beta\gamma}s_\beta)^2 / (s_\alpha)^2 \geq 0$. The zero eigenvalue is possible if the matrix $b_{\alpha\beta}$ possesses a left zero mode, i.e. if $s_\alpha b_{\alpha\beta} = 0$.

To avoid complex notation it is convenient to rename a stationary trajectory $X^q(t)$ as $X^q(t) = P(t)/(2i)$, where $P(t)$ is real on the stationary trajectories. With this notation, Eqs. (4.17) acquire the Hamiltonian structure

$$\dot{X} = \partial_P H(P, X), \quad \dot{P} = -\partial_X H(P, X); \quad (4.18)$$

$$H(P, X) = PA(X) + P^2 D(X). \quad (4.19)$$

Notice that P is not the physical momentum (indeed we deal with the overdamped motion (4.7)). It is rather an auxiliary variable that encodes the noise. Nevertheless, it is useful to view it as the canonical pair of the physical variable X . Due to their Hamiltonian nature, the stationary path equations possess the integral of motion: the "energy" $H(P, X) = \text{const.}$ The corresponding MSR action, acquired along an optimal trajectory (i.e. the one satisfying the equations of motion (4.18)), takes the standard form [35]

$$iS[X, P] = - \int dt [P\dot{X} - H(P, X)] \quad (4.20)$$

where $H(P, X)$ is a constant along the trajectory. The statistical weight of the corresponding path is given by $\exp\{iS\}$.

One may visualize solutions of Eqs. (4.18) by plotting the phase portrait, namely the curves of constant energy on the phase plane (P, X) . The special role is played by the curves of zero energy $H = 0$. Generally (i.e. if $D(X) \neq 0$) there are two of them: $P = 0$ and $P = -A(X)/D(X)$. The first one corresponds to the noiseless relaxation according to $\dot{X} = A(X)$, while the second one is responsible for fluctuations. These two intersect at the points where $A(X) = 0$, namely at the fixed points of the noiseless dynamics. Along the fluctuation curve $P = -A(X)/D(X)$ the equation of motion reads $\dot{X} = A(X) + 2PD(X) = -A(X)$, namely it describes the evolution, which is time reversed compared to that along the noiseless $P = 0$ line. The fact that the fluctuations are time-reversed partners of the relaxation is not generic. It is a consequence of the potential nature of the force; see Section 4.13.

As an example, consider an overdamped thermal motion in a potential $V(X)$. In this case $A(X) = -V'(X)$ and $D(X) = T$ (we put $\gamma = 1$ for brevity). The fluctuation zero energy curve takes the form $P = V'(X)/T$. Figure 4.1(a) depicts the phase portrait for a potential with a single stable minimum at $X = 0$. The noiseless relaxation drives the system toward the origin $X = 0$ along the $P = 0$ line. If we are interested in a relative weight for finding the system at some $X_0 \neq 0$, we need to identify an optimal trajectory, which brings the system to X_0 in a given time. If no time limitations are imposed (i.e. the observation time is unlimited), the proper optimal trajectory is the zero energy curve $P = V'(X)/T$. Indeed, it takes an infinite time to depart from the fixed point $X = 0$. Since along the optimal path $H(P, X) = 0$, the accumulated action (4.20) may be written as

$$iS(X_0) = - \int dt P\dot{X} = - \int_0^{X_0} P dX$$

that is, it is given by the geometric area shaded in Fig. 4.1a.

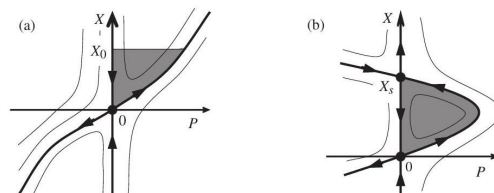


Figure 4.1 Phase portraits of the Fokker-Planck Hamiltonians: (a) for a potential with a single minimum at $X = 0$; (b) for a potential with a metastable minimum at $X = 0$ and

unstable maximum at $X = X_s$. Bold lines are curves of zero energy $P = 0$ and $P = V'(X)/T$. The shaded areas give actions of the optimal paths, reaching points X_0 and X_s , respectively.

Employing the fact that $P = V'(X)/T$, one further obtains

$$iS(X_0) = - \int_0^{X_0} P dX = - \frac{1}{T} \int_0^{X_0} V'(X) dX = - \frac{V(X_0) - V(0)}{T} \quad (4.21)$$

As a result, the relative statistical weight for finding the system at $X = X_0$ is $\propto \exp\{-V(X_0)/T\}$. This is, of course, nothing but the Boltzmann distribution. So far we have found it with exponential accuracy only, namely without a pre-exponential factor, which, in principle, could be X_0 -dependent. In the next section we'll prove that this is not the case.

Consider now a potential that has a metastable minimum at $X = 0$ and an unstable maximum at $X = X_s$; see Fig. 3.2. The corresponding phase portrait is depicted in Fig. 4.1b. The fluctuation curve $P = V'(X)/T$ now has two intersections with the relaxation line $P = 0$. The relaxation dynamics in a local vicinity of $X = 0$ is stable (attractive), while at $X = X_s$ it is unstable (repulsive). According to the Liouville theorem of classical mechanics [35], the Hamiltonian motion conserves the area of the phase space. This implies that both fixed points must be hyperbolic, that is, have one attractive and one repulsive direction. As a result, the stability of the two fixed points along the fluctuation curve is opposite to that along the relaxation line, that is, $X = 0$ is repulsive, while $X = X_s$ is attractive; see Fig. 4.1(b). It is clear now that the activation escape from the metastable fixed point $X = 0$ must proceed along the fluctuation curve $P = V'(X)/T$ until $X = X_s$, and then follow the relaxation line $P = 0$. The action is accumulated only along the fluctuation part of the optimal escape trajectory and is given by the shaded area in Fig. 4.1(b). In complete analogy with Eq. (4.21) one finds that the escape rate is proportional to the Boltzmann factor $\propto \exp\{-(V(X_s) - V(0))/T\}$. We shall evaluate the corresponding pre-exponential factor in Section 4.8.

Let us discuss now an overdamped particle in a harmonic potential subject to a multiplicative noise (in the Ito sense), proportional to a certain positive power of $|X|$:

$$\dot{X} = -\kappa X + |X|^v \xi(t), \quad (4.22)$$

where the Gaussian white noise $\xi(t)$ is specified by Eq. (4.8). The question is whether the particle sticks to the bottom of the well and does not ever leave it, because the noise near the bottom is too weak. The corresponding Hamiltonian reads as $H(P, X) = -\kappa PX + P^2 |X|^{2v}$ and its phase portrait for the case $v > 1/2$ is plotted in Fig. 4.2. Again, the relative weight of reaching a point $X_0 \neq 0$ is given by an exponentiated (negative) area enclosed by the curves of zero energy, that is, $\exp\{-\kappa X_0^{2-2v}/(2-2v)\}$ for $v < 1$. On the other hand, for $v \geq 1$ the corresponding area diverges, nullifying the long-time probability of finding the particle away from $X_0 = 0$. As a result, for $v \geq 1$ the particle eventually sticks to the bottom and the only steady-state distribution is $\delta(X_0)$.

The message of this section is that the stationary path dynamics of dissipative stochastic models may be described by the effective Hamiltonian system. The role of momentum is played by the auxiliary MSR variable (times i), which is nothing but the classical limit of the Keldysh "quantum" component. A lot of insight into the behavior of the corresponding stochastic model may be gained by an inspection of the phase portrait of the corresponding Hamiltonian. The action (4.20) was written earlier only for stationary trajectories (i.e. satisfying the equations of motion (4.18)).

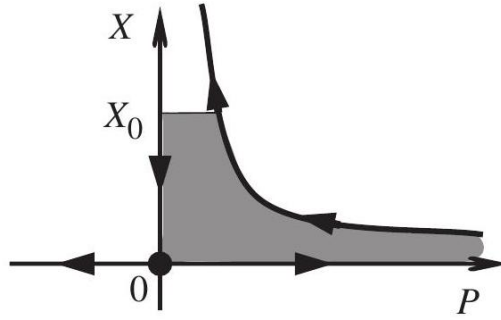


Figure 4.2 Zero energy lines of the Fokker-Planck Hamiltonian corresponding to Eq. (4.22): $P = 0$, $X = 0$, and $P = \kappa/X^{2v-1}$ with $v > 1/2$. The action (i.e. the shaded area) diverges for $v \geq 1$.

However, it may be equally well extended to any trajectory $X(t)$ and $P(t)$ and used as a weight in the functional integral, much as the action (4.13) or (4.16). The only thing to remember is that the $\mathbf{D}[P(t)] = \prod_j dP_j$ integrations run along the imaginary axis. Notice that quantities such as the escape rate are determined by the optimal trajectories with some nonzero $X^q(t)$. This means, in turn, that such trajectories are different along the forward and backward branches of the time contour. The latter is a consequence of the timereversal invariance being broken by the integration over the bath with a continuous spectrum.

11.4.5 4.5 Fokker-Planck Equation

The consideration of the previous section closely resembles the WKB approximation in quantum mechanics. One may take one step forward toward the analogy between the theory of classical stochastic models and quantum mechanics and look for a corresponding Schrödinger equation. The latter is derived through the transfer-matrix treatment of the Feynman path integral [33]. To this end one integrates over trajectories, which at time $t = t_j$ arrive at the point $X = X_j$ with an arbitrary momentum (i.e. arbitrary X^q). From the definition (4.9) it is clear that the corresponding restricted partition function $\mathcal{P}(X, t) = Z|_{X(t)=X}$ is proportional to the probability (not the amplitude!) of finding the system at the point X at time t . The fact that $\mathcal{P}(X, t)$ is real follows immediately from the form of the action (4.12) and the symmetry $X^q \rightarrow -X^q$, while $Z \rightarrow Z^*$. In other words, the Keldysh contour provides the product of an amplitude (forward branch) and its complex conjugate (backward branch), resulting in the probability.

We shall formally derive the equation for $\mathcal{P}(X, t)$ in what follows. The result, however, may be anticipated from the Hamiltonian formulation, Eqs. (4.19), (4.20), and analogy with quantum mechanics. The latter states that the required equation has the form $\partial_t \mathcal{P} = \hat{H} \mathcal{P}$. Here the Hamiltonian operator $\hat{H}$ is obtained from the normally ordered classical Hamiltonian $H(P, X)$ by the substitution of $P \rightarrow \hat{P}$, which satisfies the canonical commutation relation $[X, \hat{P}] = 1$ (in our case P runs along the imaginary axis), that is, $\hat{P} = -\partial_X$. Using Eq. (4.19) for the Hamiltonian, one obtains

$$\partial_t \mathcal{P}(X, t) = -\partial_X [A(X) \mathcal{P}(X, t) - \partial_X [D(X) \mathcal{P}(X, t)]] \quad (4.23)$$

This is the Fokker-Planck equation [50] for the evolution of the probability distribution function of the stochastic system (4.7). The normal ordering of the action (4.13) is crucial to employing the quantum mechanical analogy. Therefore, this form of the Fokker-Planck equation is specific to the Ito regularization.

The Fokker-Planck equation has the structure of the continuity relation $\partial_t \mathcal{P} + \partial_X J = 0$, where the probability current is $J = A\mathcal{P} - \partial_X [D\mathcal{P}]$. This fact is responsible for the conservation of probability $\partial_t \int dX \mathcal{P} = 0$. On the classical level it may be traced back to the observation

that $H(P, X) \sim P$, that is, there are no terms with the zero power of momentum P in the Hamiltonian. Therefore the property of the Hamiltonian

$$H(0, X) = 0 \quad (4.24)$$

is crucial to the conservation of probability. On the other hand, this relation along with expression (4.20) for the action are completely equivalent to the basic Keldysh symmetry $S[X, 0] = 0$, Eq. (2.53) (recall that $P \sim X^q$).

In the case of the additive noise $D(X) = T$ the Fokker-Planck Hamiltonian (4.19) may be transformed into the conventional Schrödinger form. This is achieved by the canonical transformation $x = X$ and $\hat{p} = \hat{P} - V'(X)/(2T)$, which preserves the commutation relation $[x, \hat{p}] = 1$ and thus $\hat{p} = -\partial_x$. With these new variables the Fokker-Planck equation acquires the form of the imaginary-time Schrödinger equation:

$$\partial_t \Psi(x, t) = -T \left[-\partial_x^2 + W(x) \right] \Psi(x, t) \quad (4.25)$$

where the effective potential, $W(x)$, and the "wave function", $\Psi(x, t)$, are given by

$$W(x) = \frac{[V'(x)]^2}{4T^2} - \frac{V''(x)}{2T}; \quad \Psi(x, t) = e^{V(x)/(2T)} \mathcal{P}(x, t) \quad (4.26)$$

It is worth mentioning that the effective quantum mechanics (4.25) is supersymmetric [51, 52], which is due to the fact that the initial Hamiltonian (4.19) satisfies the normalization identity (4.24).²

2 Indeed the "Schrödinger equation" (4.25) may be written as

$$T^{-1} \partial_t \Psi = -\hat{B}^\dagger \hat{B} \Psi; \quad \hat{B} = i\partial_x + \frac{i}{2T} V'(x) \quad (4.27)$$

This equation admits a stationary zero mode annihilated by the operator $\hat{B}$, i.e. $\hat{B}\Psi_0 = 0$. This results in $\Psi_0(x) \propto e^{-V(x)/(2T)}$ and thus $\mathcal{P}(x) \propto e^{-V(x)/T} \propto \Psi_0^2$, which is, of course, the Boltzmann distribution. This is indeed a solution as long as $\Psi_0(x)$ is a normalizable "wave-function", i.e. $V(x) \rightarrow +\infty$, when $x \rightarrow \pm\infty$. In this case the supersymmetry is said to be unbroken [52]. In the opposite case of the broken supersymmetry (e.g. $V(x) = \delta x^2 - x^3$) there is no zero eigenvalue of the Hamiltonian $\hat{B}^\dagger \hat{B}$, but instead there is an exponentially small one, considered in Section 4.8 (notice that the super-potential $W(x)$ is still confining, even if the potential $V(x)$ is not).

We turn now to the transfer matrix derivation of the Fokker-Planck equation (4.23). Consider $\mathcal{P}(X_{j-1}, t_{j-1})$, which is obtained from Eq. (4.12) by integration over all X_i with $i = 1, \dots, j-2$ and all X_i^q with $i = 1, \dots, j-1$. Notice that the X^q integration runs one step ahead of the X integration. To find $\mathcal{P} = \mathcal{P}(X, t) = \mathcal{P}(X_j, t_j)$, one needs to perform two more integrations over $dX_{j-1} dX_j^q$ with the weight specified by Eq. (4.12):

$$\mathcal{P} = \int dX_{j-1} dX_j^q e^{-2iX_j^q(X_j - X_{j-1} - \delta_t A(X_{j-1})) - 4\delta_t (X_j^q)^2 D(X_{j-1})} \mathcal{P}(X_{j-1}, t_{j-1}) \quad (4.28)$$

We now rename the integration variables as $X_j^q = X^q$ and $X_{j-1} = X_j - \delta_X$ and expand the exponent to second order in the small fluctuations δ_X and X^q . This leads to the already familiar Keldysh structure

$$\exp \left\{ -(\delta_X, X^q) \begin{pmatrix} 0 & i \\ i & 4\delta_t D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta_X \\ X^q \end{pmatrix} \right\} \quad (4.29)$$

From here one concludes that as $\delta_t \rightarrow 0$ the fluctuations scale as $X^q \sim \delta_t^{-1/2}$ and $\delta_X \sim \delta_t^{1/2}$. We then approximate $A(X_{j-1}) \approx A - \delta_X A'$, while $D(X_{j-1}) \approx D - \delta_X D' + \delta_X^2 D''/2$ and

$\mathcal{P}(X_{j-1}, t_{j-1}) \approx \mathcal{P} - \delta_X \mathcal{P}' + \delta_X^2 \mathcal{P}''/2 - \partial_t \mathcal{P} \delta_t$, where $A = A(X_j)$, $D = D(X_j)$, and $\mathcal{P} = \mathcal{P}(X_j, t_j)$ and primes denote derivatives with respect to X_j . Expanding the exponent up to second order in terms $\delta_X \sim \delta_t^{1/2}$ and up to first order in terms $\delta_X^2 \sim \delta_t$, we find

$$\partial_t \mathcal{P} = -(A' \mathcal{P} + A \mathcal{P}') 2i \langle \delta_X X^q \rangle - (D'' \mathcal{P} + 2D' \mathcal{P}') 2 \langle \delta_X^2 (X^q)^2 \rangle + \mathcal{P}'' \frac{\langle \delta_X^2 \rangle}{2\delta_t},$$

where the angular brackets stand for averaging with the Gaussian weight (4.29) and we took into account that, as always, $\langle (X^q)^2 \rangle = 0$ and also $\langle \delta_X (X^q)^3 \rangle = \langle \delta_X^2 (X^q)^4 \rangle = 0$. The remaining nonzero averages are given by $\langle \delta_X X^q \rangle = -i/2$, $\langle \delta_X^2 (X^q)^2 \rangle = -1/2$, and $\langle \delta_X^2 \rangle = 2\delta_t D$. As a result one obtains the Fokker-Planck equation (4.23), as expected.

The derivation may be straightforwardly extended to the multivariable ItoLangevin process (4.14), yielding

$$\partial_t \mathcal{P}(X, t) = -\partial_\alpha [A_\alpha(X) \mathcal{P}(X, t) - \partial_\beta [D_{\alpha\beta}(X) \mathcal{P}(X, t)]] \quad (4.30)$$

where $\partial_\alpha = \partial_{X_\alpha}$ and summation over repeated indices is understood. Again the equation has the structure of the continuity relation $\partial_t \mathcal{P} + \text{div } J = 0$, where the probability current vector $J_\alpha = A_\alpha \mathcal{P} - \partial_\beta [D_{\alpha\beta}(X) \mathcal{P}]$ consists of the drift part and the diffusive part.

For a particular case where the drift is provided by a potential force, that is, $A_\alpha(X) = -\partial_\alpha V(X)$ and the noise is isotropic and additive, namely $D_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta} T$, one may look for a stationary solution of Eq. (4.30) by demanding that the current vector is zero: $\partial_\alpha V \mathcal{P} = -T \partial_\alpha \mathcal{P}$. Solving this first-order equation, one finds

$$\mathcal{P}(X) = Z^{-1} e^{-V(X)/T} \quad (4.31)$$

which is a proper stationary probability distribution as long as it can be normalized. This means the normalization constant, also known as the partition function, $Z = \int \prod_\alpha dX_\alpha e^{-V(X)/T}$ exists.³ This is, of course, the Boltzmann distribution, which we have already found with exponential accuracy using the optimal path method; see Eq. (4.21). Here we proved that the pre-exponential factor is an X independent constant. Notice that if the drift force is not a potential one, the stationary distribution (if it exists) implies, in general, a nonzero divergenceless current, $\text{div } J = 0$, whereas $J_\alpha \neq 0$. The distribution (4.31) is thus not applicable.

The fact that the Fokker-Planck equation has a stationary solution (for the class of normalizable potentials) may be formulated as the presence of a zero eigenvalue of the corresponding Hamiltonian operator $\hat{H}(\hat{P}, X)$. Equation (4.31) provides the corresponding eigenfunction, or zero mode. In the transformed Schrödinger variables (4.25) the presence of the zero mode follows from the supersymmetric nature of the effective potential $W(x)$ [51, 52]; see footnote 2.

If there is an inertia term $\ddot{X}$ in the Langevin equation (4.5), one needs to consider particle momentum as just another coordinate $X_1 = X$ and $X_2 = \dot{X} = K$. Employing that $A_1(K) = K$, $A_2(X, K) = -\gamma K - V'(X)$ and $D_{22} = \gamma T$ is the only nonzero component of $D_{\alpha\beta}$, one may rewrite Eq. (4.30) for the probability distribution function $\mathcal{P} = \mathcal{P}(X, K, t)$ as

$$\partial_t \mathcal{P} + K \partial_X \mathcal{P} - V'(X) \partial_K \mathcal{P} = \gamma \partial_K (K \mathcal{P} + T \partial_K \mathcal{P}) \quad (4.32)$$

The left-hand side, called the kinetic term, may be written as $\partial_t \mathcal{P} - \{E, \mathcal{P}\}$, where the classical Hamiltonian function is $E(K, X) = K^2/2 + V(X)$ and we used standard Poisson brackets. It describes evolution of the distribution function due to the drift of position in the presence of the velocity $K = v_K = \partial_K (K^2/2)$ and the drift of momentum in the presence of the force $-\partial_X V(X)$. The right-hand side, also known as the collision term, originates from the interaction with the thermal bath. It describes random diffusion in the momentum space

superimposed on the drift toward $K = 0$ in the effective "potential" $K^2/2$. The latter is responsible for the particle losing energy and cooling down, if the temperature T is too low.

One may look for a stationary solution of the Fokker-Planck equation (4.32), which separately nullifies the kinetic and the collision terms. From the latter condition one finds that $\mathcal{P}(X, K) = \mathcal{P}(X)e^{-K^2/2T}$. Substituting it into the kinetic term, one finally finds for the corresponding zero mode

$$\mathcal{P}(X, K) = Z^{-1}e^{-V(X)/T}e^{-K^2/2T} = Z^{-1}e^{-E(K,X)/T} \quad (4.33)$$

where the normalization constant Z , namely the partition function, is given by $Z = \int dX dK e^{-V(X)/T}e^{-K^2/2T}$. This is the Maxwell-Boltzmann distribution for the particle's potential and kinetic energy in thermal equilibrium.

If the system is out of equilibrium, but all characteristic time scales are much longer than the relaxation time γ^{-1} , one may look for a solution of the Fokker-Planck equation (4.32) in the form

$$\mathcal{P}(X, K, t) = (2\pi T)^{-1/2}e^{-K^2/2T}[\mathcal{P}(X, t) + K\mathcal{N}(X, t)]$$

where the exponential factor is chosen to nullify the right-hand side of Eq. (4.32) and thus to compensate for the large factor γ . We now substitute this trial solution in Eq. (4.32) and (i) integrate over K ; (ii) multiply by K and then integrate over K . This way we obtain two coupled equations:

$$\partial_t \mathcal{P} + T\partial_X \mathcal{N} = 0; \quad T\partial_X \mathcal{P} + V'(X)\mathcal{P} = -\gamma T\mathcal{N}$$

where in the second equation we neglected the term $T\partial_t \mathcal{N}$ as being much smaller than its right-hand side. Substituting $\mathcal{N}$ from the second equation into the first one, one finds a closed equation for $\mathcal{P}(X, t)$:

$$\gamma\partial_t \mathcal{P} = \partial_X [V'(X)\mathcal{P} + T\partial_X \mathcal{P}] \quad (4.34)$$

This is, of course, the already familiar overdamped Fokker-Planck equation (4.23). The fact that the diffusion coefficient in the coordinate space is $D = T/\gamma$ is known as the Einstein relation. Notice that the diffusion coefficient in momentum space, according to Eq. (4.32), is $D_K = \gamma T$. Both of these facts are manifestations of FDT.

Since we are dealing with a classical particle, there is no problem in exactly specifying its coordinate X and momentum K simultaneously. This should be contrasted with the fictitious momentum $P = 2iX^q$, introduced in Section 4.4. The latter is conjugated to the coordinate X in the sense of the functional integral. It thus obeys the uncertainty principle $\Delta X \Delta P \geq 1$ even in a purely classical setting. One may still discuss trajectories in the phase space (P, X) in the semiclassical (i.e. weak fluctuations, or low temperature) approximation. If the inertia and thus the physical momentum K are taken into account, the semiclassical phase space is four-dimensional: (P, P_2, X, K) , where P_2 is conjugate to $K = X_2$.

11.4.6 4.6 Ito versus Stratonovich

Although Ito regularization of stochastic processes, discussed in Section 4.3, is the most convenient for the field-theoretical representation, one must be aware that there are other regularizations. The one frequently found in physics literature is known as Stratonovich regularization. It appears upon changing variables in stochastic evolution equations. Consider,

⁰³ Here Z is not the Keldysh "partition function" normalized to one, but a usual equilibrium statistical mechanics partition function.

for example, the Langevin equation (4.7), (4.8) with the additive noise, namely $b = 1$. The corresponding Fokker-Planck equation for the probability distribution function $\mathcal{P}(X, t)$ is given by Eq. (4.23) with $D = b^2 = 1$,

$$\dot{X} = A(X) + \xi(t); \quad \partial_t \mathcal{P} = -\partial_X [A\mathcal{P} - \partial_X \mathcal{P}] \quad (4.35)$$

Suppose now we want to change the coordinate $X(t)$ to another coordinate $Y(t)$, such that

$$X = f(Y), \quad (4.36)$$

where f is a monotonic function, which provides a one-to-one correspondence between X and Y . We shall assume thus that $f'(Y) = dX/dY > 0$, for convenience. Substituting it in the Langevin equation (4.35), one notices that the corresponding stochastic equation for the new variable $Y(t)$ formally acquires the multiplicative form

$$\dot{Y} = \tilde{A}(Y) + \tilde{b}(Y)\xi(t), \quad (4.37)$$

where $\tilde{b}(Y) = 1/f'(Y)$ and $\tilde{A}(Y) = A(f(Y))/f'(Y)$.

Naively one may think that the corresponding Fokker-Planck equation is given by Eq. (4.23) with $D(Y) = \tilde{b}^2(Y) = [1/f'(Y)]^2$. Let us, however, perform the change of variables (4.36) directly in the Fokker-Planck equation (4.35). To maintain normalization of the probability distribution function one has to demand that $\tilde{\mathcal{P}}(Y, t)dY = \mathcal{P}(X, t)dX$, and thus the proper distribution of the Y variable is $\tilde{\mathcal{P}}(Y, t) = \mathcal{P}(f(Y), t)f'(Y)$. Notice also that $\partial_X = (1/f'(Y))\partial_Y$. As a result the Fokker-Planck equation (4.35) transforms into

$$\partial_t \tilde{\mathcal{P}}(Y, t) = -\partial_Y [\tilde{A}(Y)\tilde{\mathcal{P}}(Y, t) - \tilde{b}(Y)\partial_Y [\tilde{b}(Y)\tilde{\mathcal{P}}(Y, t)]] \quad (4.38)$$

As before, $\tilde{b}(Y) = 1/f'(Y)$. While the drift current is what we expect from the Langevin equation (4.37), the diffusive current is different from that in the Ito-Fokker-Planck equation (4.23). The latter has the form $\partial_Y [\tilde{b}^2 \tilde{\mathcal{P}}]$.

The reason for this difference is that the multiplicative noise in Eq. (4.37) does not have the Ito retarded regularization. Indeed, the discrete form of the Langevin equation (4.35) is $X_j - X_{j-1} = \delta_t A(X_{j-1}) + \delta_t \xi_{j-1}$. Upon the change of variables given by Eq. (4.36) the left-hand side takes the form $f(Y_j) - f(Y_{j-1}) = f(\bar{Y} + \delta_Y/2) - f(\bar{Y} - \delta_Y/2) = f'(\bar{Y})(Y_j - Y_{j-1}) + O(\delta_Y^3)$, where $\delta_Y = Y_j - Y_{j-1}$ and $\bar{Y} = (Y_j + Y_{j-1})/2$. As a result the discrete version of the Langevin equation (4.37) is

$$Y_j - Y_{j-1} = \delta_t \tilde{b}\left(\frac{Y_j + Y_{j-1}}{2}\right) A(Y_{j-1}) + \delta_t \tilde{b}\left(\frac{Y_j + Y_{j-1}}{2}\right) \xi_{j-1} \quad (4.39)$$

The first term on the right-hand side is already $\sim \delta_t$ and therefore may be substituted by $\delta_t \tilde{A}_{j-1} = \delta_t \tilde{b}(Y_{j-1}) A(Y_{j-1})$. This is not so with the second term: since $\xi_j \sim \delta_t^{-1/2}$ (indeed the corresponding statistical weight is $e^{-\delta_t \xi_j^2/4}$), one finds $\delta_t \xi_{j-1} \sim \delta_t^{1/2}$. Therefore it is important to keep the argument of the noise modulation function as $\tilde{b}((Y_j + Y_{j-1})/2)$. This is different from the Ito retarded regularization, which assumes $\tilde{b}(Y_{j-1})$ instead. The symmetric regularization of the multiplicative noise as in Eq. (4.39) is known as Stratonovich regularization. It leads to the different form of the diffusion term in the Fokker-Planck equation (4.38).

One may formally bring the Stratonovich diffusion term to the Ito form, at the expense of adding $(\partial_Y \tilde{b}) \tilde{b} \tilde{\mathcal{P}}$ to the drift term. All the considerations may be straightforwardly generalized to an arbitrary dimension M . As a result the Stratonovich-Langevin equation $\dot{X} = A^{(S)} + b\xi$ is equivalent to the Ito-Langevin one $\dot{X} = A^{(I)} + b\xi$ with

$$A_{\alpha}^{(I)}(X) = A_{\alpha}^{(S)}(X) + \sum_{\beta, \gamma=1}^M [\partial_{\beta} b_{\alpha\gamma}(X)] b_{\beta\gamma}(X) \quad (4.40)$$

The Ito process may be then used for the field-theoretical treatment via the MSR procedure of Section 4.3.

11.4.7 4.7 Noise with a Finite Correlation Time

Another context where the Stratonovich interpretation appears naturally is stochastic systems with noise that has a short, but finite correlation time τ . Consider Gaussian "colored" noise with the correlation function

$$\langle \eta(t) \eta(t') \rangle = \frac{1}{\tau} e^{-|t-t'|/\tau} \quad (4.41)$$

known also as the Ornstein-Uhlenbeck process. The white noise (4.8) is obtained in the limit $\tau \rightarrow 0$. Such a random function is a result of "filtering" the white noise force $\xi(t)$, Eq. (4.8), with an overdamped harmonic oscillator (e.g. an RC circuit), having the time constant τ . This means that $\eta(t)$ satisfies

$$\dot{\eta} = \frac{1}{\tau} [-\eta + \xi(t)] \quad (4.42)$$

Indeed, the solution of this equation is $\eta(t) = \frac{1}{\tau} \int^t dt_1 \xi(t_1) e^{(t_1-t)/\tau}$. Employing Eq. (4.8), one readily establishes the correlation function (4.41).

One may consider the Ornstein-Uhlenbeck process (4.41), (4.42) as a random force term in a multiplicative Langevin equation:

$$\dot{X} = A(X) + b(X)\eta(t) \quad (4.43)$$

Then in the limit $\tau \ll \Omega^{-1}$ (but still $\tau \gg \delta_t$), where Ω is a characteristic frequency of the deterministic process $\dot{X} = A(X)$, the probability distribution function $\mathcal{P}(X, t)$ obeys the Stratonovich-Fokker-Planck equation (4.38).

To prove this statement let us consider the two evolutionary equations (4.43) and (4.42) as a two-dimensional Langevin process (4.14). In this case $A_X = A(X) + b(X)\eta$ and $A_{\eta} = -\eta/\tau$, while the noise $\xi(t)$ is non-multiplicative with the coupling constant $b_{\eta,1} = 1/\tau$. Because the noise is non-multiplicative, there is no need to specify the regularization. The Fokker-Planck equation for the joint probability distribution $\mathcal{P}(X, \eta, t)$ acquires the form (cf. Eq. (4.30))

$$\partial_t \mathcal{P} = -\partial_X [(A(X) + b(X)\eta)\mathcal{P}] + \partial_{\eta} \left[\frac{1}{\tau} \eta \mathcal{P} + \frac{1}{\tau^2} \partial_{\eta} \mathcal{P} \right] \quad (4.44)$$

In the absence of coupling, $b = 0$, the η -variable quickly equilibrates to a symmetric Gaussian distribution $\sim e^{-\eta^2 \tau/2}$. One can thus proceed in a way analogous to the one that led from Eq. (4.32) to Eq. (4.34). To this end we look for a solution in the form $\mathcal{P}(X, \eta, t) \sim e^{-\eta^2 \tau/2} [\mathcal{P}(X, t) + \eta \mathcal{N}(X, t)]$. Substituting it into Eq. (4.44) and then (i) integrating over η and (ii) multiplying by η and then integrating over it, one obtains two equations, $\partial_t \mathcal{P} = -\partial_X [A\mathcal{P}] - \partial_X [b\mathcal{N}]/\tau$ along with $\mathcal{N}/\tau = -\partial_X [b\mathcal{P}]$, where in the last equation we have neglected $\partial_t \mathcal{N}$ and $\partial_x [A\mathcal{N}]$, as being much less than $\mathcal{N}/\tau$. Substituting the resulting $\mathcal{N}$ into the equation for $\mathcal{P}$, one finds the Stratonovich-Fokker-Planck equation (4.38).

11.4.8 4.8 Kramers Problem

We return now to the problem of activation escape of an overdamped particle from a metastable potential minimum. It was briefly considered in Section 4.4 in the stationary path approximation. Here we address it employing the Ito-Fokker-Planck equation (4.23). To modify the result for the Stratonovich stochastic process, one can take advantage of the correspondence rule (4.40). The potential $V(X)$ is similar to the one plotted in Fig. 3.3a. Since the Boltzmann distribution (4.31) with such a potential is not normalizable, there is no stationary solution (i.e. zero mode) of the Fokker-Planck equation. One expects, however, that there is a long-lived solution localized in the vicinity of the metastable minimum. We shall look for such a solution in the form

$$\mathcal{P}(X, t) = \mathcal{P}(X)e^{-t/\tau_{\text{es}}}, \quad (4.45)$$

where τ_{es} is the escape time, which is expected to be exponentially long. The total probability is not conserved, because there is a probability current J toward $X = \infty$. Substituting this form into Eq. (4.23), one obtains the stationary Fokker-Planck equation for $\mathcal{P}(X)$:

$$\frac{1}{\tau_{\text{es}}} \mathcal{P} = \partial_X [-V' \mathcal{P} - \partial_X [D \mathcal{P}]] = \partial_X J \quad (4.46)$$

Since the escape rate $1/\tau_{\text{es}}$ is expected to be exponentially small, so is $\partial_X J$ everywhere, except near the narrow peak of the metastable distribution $\mathcal{P}(X)$ around $X = 0$. As we show here, the latter has the characteristic width $l_0 = \sqrt{D(0)/V''(0)} \ll X_s$, if $D(0)$ is small enough (see Fig. 4.1(b)). Therefore the current J out of the metastable state is practically a constant for $|X| \gg l_0$. Obviously the current is zero in the negative direction: $J(-\infty) = 0$, while at large positive X it approaches a constant value, which we denote $J(\infty)$. This observation leads to the linear first-order differential equation

$$-V'(X)\mathcal{P}(X) - \partial_X[D(X)\mathcal{P}(X)] = J(X) \quad (4.47)$$

which may be easily solved to express $\mathcal{P}$ through $J(X)$. The result is

$$\mathcal{P}(X) = \frac{1}{D(X)} e^{-S(X)} \int_X^\infty dY J(Y) e^{S(Y)} \quad (4.48)$$

where S satisfies $S' = V'/D$, that is,

$$S(X) = \int_{-\infty}^X dY \frac{V'(Y)}{D(Y)} \quad (4.49)$$

The upper limit of the Y -integration in Eq. (4.48) is basically arbitrary (with exponential accuracy) as long as it is well to the right of the point $Y = X_s$. We put it at infinity for brevity. One can now integrate the stationary Fokker-Planck equation (4.46) from minus infinity, where the current is zero, to plus infinity (in the same sense as previously), where the current is $J(\infty)$. This leads to

$$\tau_{\text{es}} = \frac{1}{J(\infty)} \int_{-\infty}^\infty dX \mathcal{P}(X) = \int_{-\infty}^\infty \frac{dX}{D(X)} e^{-S(X)} \int_X^\infty dY \frac{J(Y)}{J(\infty)} e^{S(Y)} \quad (4.50)$$

Notice that adding a constant to S does not change the result. This means that the lower limit of integration in Eq. (4.49) is of no importance.

The X -integral is dominated by the vicinity of the potential minimum, that is, $|X| \lesssim l_0$. On the other hand, the Y -integral is coming from the vicinity of the maximum, that is, $|X - X_s| \lesssim l_s$, where the characteristic width of the maximum is $l_s = \sqrt{D(X_s)/|V''(X_s)|}$. If $l_0 + l_s \ll X_s$,

which is the case for sufficiently small D , one may extend the Y -integral to minus infinity and perform both integrals in the stationary point approximation. The crucial observation is that under the same condition, $J(X_s)/J(\infty) = 1$ with exponential accuracy. As a result one obtains for the escape time, including the pre-exponential factor [53],

$$\tau_{\text{es}} = \frac{2\pi}{D(0)} \frac{e^{\Delta S}}{\sqrt{S''(0)|S''(X_s)|}} = \sqrt{\frac{D(X_s)}{D(0)}} \frac{2\pi}{\sqrt{V''(0)|V''(X_s)|}} e^{\Delta S} \quad (4.51)$$

where we took into account that $S'' = (V'/D)' = V''/D$, since $V'(0) = V'(X_s) = 0$, and

$$\Delta S = S(X_s) - S(0) = \int_0^{X_s} dX \frac{V'(X)}{D(X)} \quad (4.52)$$

This is exactly the action along the zero energy trajectory $P = V'/D$ of the Hamiltonian (4.19), introduced in Section 4.4. The Fokker-Planck equation allowed us to determine the pre-exponential factor. In the case of non-multiplicative noise $D = T = \text{const}$, the exponent is the Boltzmann one, $(V(X_s) - V(0))/T$, while the prefactor is temperature independent, $2\pi [V''(0)|V''(X_s)|]^{-1/2}$. This is the celebrated Kramers result [54]. In the case where the inertia term may not be neglected, the pre-exponential factor was evaluated in [55].

In a vicinity of the bifurcation point, a wide class of problems may be modeled by the cubic potential (3.34) and the additive noise with variance D . According to Kramers formula the corresponding escape time is

$$\tau_{\text{es}} = \frac{\pi a^2}{V_0 \delta} e^{\frac{4}{27} \frac{V_0 \delta^3}{D}}. \quad (4.53)$$

The scaling of the action with the bifurcation parameter δ is rather different from both the pure tunneling exponent (3.36) and the dissipative tunneling exponent (3.40).

11.4.9 4.9 Counting Statistics: Donsker-Varadhan Theory and Beyond

Here we focus on an equilibrium stochastic process:

$$\dot{X} = -\partial_X V(X) + \sqrt{T} \xi(t), \quad (4.54)$$

with the white noise, $\xi(t)$, normalized according to Eq. (4.8). We will be concerned with the long time counting statistics of a certain observable, $Q(X)$, accumulated during a long time interval, t_0 . Specifically, we will define a counter:

$$q = \frac{1}{t_0} \int_0^{t_0} dt Q(X(t)) \quad (4.55)$$

Since $X(t)$ depends on a specific realization of the noise $\xi(t)$, so does the counter, q . Therefore q is a stochastic variable, and we will be interested in its probability distribution function, $\mathcal{P}(q)$. Specifically we will look for it in the long time limit, $t_0 \rightarrow \infty$. In this limit, X is distributed according to the Boltzmann distribution, $\mathcal{P}_0(X) = Z^{-1} e^{-V(X)/T}$, and therefore the expected value of the counter is $\langle q \rangle = \int dX Q(X) \mathcal{P}_0(X)$. The question is how probable are deviations of the counter q from its expectation value $\langle q \rangle$. We will show that in many cases the long time limit of $\mathcal{P}(q)$ takes the form

$$\mathcal{P}(q) \propto e^{-t_0 \Lambda(q)} \quad (4.56)$$

where $\Lambda(q) = -\lim_{t_0 \rightarrow \infty} \log \mathcal{P}(q)/t_0$ is called the large deviation function. The normalization requires

$$\Lambda(\langle q \rangle) = 0. \quad (4.57)$$

The counting statistics is calculated as

$$\begin{aligned} \mathcal{P}(q) &= \int \mathbf{D}[\xi(t)] e^{-\frac{1}{4} \int dt \xi^2(t)} \delta\left(q - \frac{1}{t_0} \int_0^{t_0} dt Q(X(t))\right) \\ &= \int d\lambda e^{t_0 \lambda q} \int \mathbf{D}[X(t), P(t)] e^{-\int_0^{t_0} dt [P\dot{X} - TP^2 + P\partial_X V + \lambda Q(X)]} \end{aligned} \quad (4.58)$$

where we used integral representation of the delta-function $\delta(\dots) = \int_{-\infty}^{\infty} d\lambda e^{t_0 \lambda \dots}$ and the Martin-Siggia-Rose procedure of Section 4.3 with $P = 2iX^\dagger$. We notice now that the functional integral over X and P represents the Green function, $G(X_0, X_{t_0}; t_0)$, of the imaginary time quantum mechanics with the Hamiltonian $H_\lambda(P, X) = TP^2 - P\partial_X V - \lambda Q(X)$. One can write such a Green function as $G(X_0, X_{t_0}; t_0) = \sum_n \Psi_n(X_0) \Psi_n(X_{t_0}) e^{-t_0 E_n(\lambda)}$, where $\Psi_n(X)$ are eigenfunctions of the Hamiltonian H_λ and $E_n(\lambda)$ are the corresponding eigenvalues. In the long time limit only the ground-state, $E_0(\lambda)$, should be retained, resulting in

$$\mathcal{P}(q) \propto \int_{-\infty}^{\infty} d\lambda e^{-t_0 [E_0(\lambda) - \lambda q]} \quad (4.59)$$

Since t_0 is large, this integral may be evaluated in the saddle-point approximation, which leads to the extremum condition $\partial_\lambda E_0(\lambda) = q$.

To proceed further, we employ the quantum mechanical variational principle, which states that the ground-state energy $E_0(\lambda) = \min \langle \Psi | \hat{H}_\lambda | \Psi \rangle$, where the variation is taken over the space of normalized functions $\int dx \Psi^2(x) = 1$. Here the Hamiltonian operator should be taken in the conventional Schrödinger form (4.25): $\hat{H}_\lambda = -T\partial_x^2 + [V'(x)]^2/(4T) - V''(x)/2 + \lambda Q(x)$. The extremum condition takes the form $\partial_\lambda E_0(\lambda) = \langle \Psi | Q(x) | \Psi \rangle = \int dx Q(x) \Psi^2(x) = q$. As a result, the large deviation function is found as

$$\Lambda(q) = E_0(\lambda) - \lambda q = \min \langle \Psi | \hat{H}_0 | \Psi \rangle \quad (4.60)$$

where the wave function is constrained by the normalization $\int dx \Psi^2(x) = 1$ and $\int dx Q(x) \Psi^2(x) = q$ conditions, and $\hat{H}_0$ is the supersymmetric Hamiltonian $\hat{H}_0 = T(\partial_x + \frac{i}{2T}V'(x))^\dagger (\partial_x + \frac{i}{2T}V'(x))$; see footnote 2. This shows that the large deviation function is manifestly nonnegative:

$$\Lambda(q) = \min \left\{ T \int dx \left[\partial_x \Psi + \frac{1}{2T} V'(x) \Psi \right]^2 \right\} \geq 0 \quad (4.61)$$

Notice that $\Lambda(q) = 0$ if and only if $[\partial_x + V'(x)/(2T)] \Psi(x) = 0$. This leads to $\Psi(x) \propto e^{-V(x)/(2T)} \propto \sqrt{\mathcal{P}_0(x)}$ and therefore $q = \langle q \rangle$. This agrees with the condition (4.57).

One may reformulate the variational principle in terms of a nonnegative probability density, $\mathcal{P}(x) = \Psi^2(x)$. Substituting $\Psi = \sqrt{\mathcal{P}}$ into Eq. (4.61), one finds

$$\Lambda(q) = \min \left\{ \frac{T}{4} \int dx \mathcal{P}(x) \left[\partial_x \log \frac{\mathcal{P}(x)}{\mathcal{P}_0(x)} \right]^2 \right\} \quad (4.62)$$

with the constraints $\int dx \mathcal{P}(x) = 1$ and $\int dx Q(x) \mathcal{P}(x) = q$. Here we have used the fact that $V(x) = -T \log \mathcal{P}_0(x)$. This is the form of the large deviation function found by Donsker

and Varadhan [56]. For a generalization to the case where a stationary distribution admits a nonzero steady-state current, see Ref. [60].

As an example, let's take the harmonic potential $V(x) = \kappa x^2/2$ and set the counter q as a fraction of time t_0 the stochastic particles spend at a positive x . To this end we choose $Q(x) = \theta(x)$ - the Heaviside step-function. The corresponding Schrödinger operator is $\hat{H}_\lambda = -T\partial_x^2 + (\kappa x)^2/(4T) - \kappa/2 + \lambda\theta(x)$. Its ground state energy may be shown to have the form

$$E_0(\lambda) = \kappa e_0(\lambda/\kappa); \quad e_0(y) \approx \begin{cases} 1 & y \rightarrow +\infty \\ y/2 - cy^2 & |y| \ll 1 \\ 1 + y & y \rightarrow -\infty \end{cases} \quad (4.63)$$

Here $e_0(\lambda/\kappa)$ is a monotonously increasing function and $c = \log 2/4$ is found from the second-order perturbation theory. The extremum condition, $e'_0(\lambda/\kappa) = q$, dictates that $0 < q < 1$, as it should be according to the definition of q . One also notices that $e'_0(0) = \langle q \rangle = 1/2$, also as expected from the reflection symmetry of the harmonic potential. Finally, one finds the probability distribution function from Eq. (4.59) as $\mathcal{P}(q) \propto \exp\{-f(q)t_0/\tau_{\text{rel}}\}$, where $\tau_{\text{rel}} = \gamma/\kappa$ is the relaxation time (we have restored the friction constant γ from Eq. (4.5)) and $f(q)$ is a dimensionless function with $f(0) = f(1) = 1$ and $f(q) \approx (q - 1/2)^2/\log 2$ for $|q - 1/2| \ll 1$. This result holds for $t_0 \gg \tau_{\text{rel}}$. Notice that the distribution function is temperature independent.

As another example, let us take the harmonic potential $V(x) = \kappa x^2/2$ and $Q(x) = x$, so the counter, $q = \langle x(t) \rangle_{t_0}$, is a long time average value of the coordinate. From the reflection symmetry one expects a symmetric distribution $\mathcal{P}(q)$ with the zero expectation value, $\langle q \rangle = 0$. The Schrödinger operator is $\hat{H}_\lambda = -T\partial_x^2 + (\kappa x)^2/(4T) - \kappa/2 + \lambda x$. Since the potential is still harmonic, the ground state wave function is Gaussian $\Psi = (2\pi T/\kappa)^{1/4} \exp\{-\kappa(x - q)^2/4T\}$, where the center is chosen to satisfy $\langle \Psi|x|\Psi \rangle = q$. Substituting this minimizer into Eq. (4.61), one finds $\Lambda(q) = (\kappa q)^2/4T$. Finally the distribution function of the average coordinate is a Gaussian, $\mathcal{P}(q) \propto \exp\{-(t_0/\tau_{\text{rel}})(\kappa q^2/4T)\}$, with the width that scales as $\sqrt{T/t_0}$.

Let us now turn to a case where the Donsker-Varadhan theory is not applicable. To this end we again consider the harmonic potential $V(x) = \kappa x^2/2$ and take $Q(x) = x^3$. The counter, $q = \langle x^3(t) \rangle_{t_0}$, represents an average value of the cube of the coordinate. Due to the reflection symmetry, its distribution function, $\mathcal{P}(q)$, is expected to be symmetric with zero mean value. The corresponding Schrödinger operator contains potential $(\kappa x)^2/(4T) + \lambda x^3$, which does not admit a ground state. This indicates a departure of the long time distribution from the Donsker-Varadhan form (4.56). The physical reason for such a departure is that typical trajectories, $x(t)$, which result in a fixed value of $q = t_0^{-1} \int_0^{t_0} x^3(t) dt$, are short bursts with a large amplitude (whereas in the Donsker-Varadhan case they are given by small deviations sustained for a long time $\sim t_0$). To illustrate this point, ⁴ imagine a meander-like trajectory $x(t)$, which stays at $x(t) = x_q$ for a time $\tau \leq t_0$ and at $x = 0$ for the rest of the time (one may assume sharp fronts of the meander with duration τ_{rel}). The two variational parameters x_q and τ are related through $q = x_q^3 \tau/t_0$. The statistical weight, e^{-S} , of such a trajectory is given by

$$S = \frac{\kappa}{4T\tau_{\text{rel}}} \int dt [(\dot{x}\tau_{\text{rel}})^2 + x^2] \approx \frac{\kappa}{4T} \left[x_q^2 + x_q^2 \frac{\tau}{\tau_{\text{rel}}} \right] = \frac{\kappa}{4T} \left[x_q^2 + \frac{qt_0}{x_q \tau_{\text{rel}}} \right] \quad (4.64)$$

Optimizing this over x_q , one finds $x_q \propto (qt_0/\tau_{\text{rel}})^{1/3}$. From here and $q = x_q^3 \tau/t_0$ one finds $\tau \propto \tau_{\text{rel}}$, that is, the entire burst has a short duration, $\sim \tau_{\text{rel}}$, while its amplitude scales as $t_0^{1/3}$. The corresponding statistical weight is $S \sim (qt_0)^{2/3}/T$. Therefore, the Donsker-Varadhan scaling (4.56) gives way ⁵ to a very different scaling of the probability with the counting time, t_0 ,

$$\mathcal{P}(q) \propto \frac{t_0}{\tau_{\text{rel}}} \exp \left\{ -\alpha \frac{\kappa (qt_0/\tau_{\text{rel}})^{2/3}}{2T} \right\} \quad (4.65)$$

with yet undetermined numerical constant α . The pre-factor, t_0/τ_{rel} , is due to the fact that the short burst may happen at any time during the counting interval, t_0 .

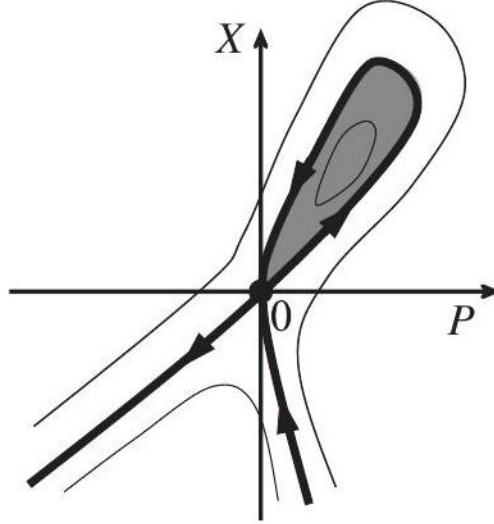


Figure 4.3 Lines of the constant energy for the counting Hamiltonian $H_\lambda(P, X) = TP^2 - \kappa PX - \lambda X^3$ with $\lambda < 0$. The zero energy line is in bold. The corresponding action, $S(\lambda)$, is given by the area of the shaded area.

To make these qualitative arguments more quantitative, we follow Nickelsen and Touchette [62]. They argued that the optimal path $X(t)$ is given by a special stationary trajectory of the action in the second line of Eq. (4.58). Such trajectories are given by lines of constant energy $H_\lambda(P, X) = TP^2 - \kappa PX - \lambda X^3$, depicted in Fig. 4.3. The trajectory of interest, shown in bold, starts and ends at the stationary point $X = P = 0$. It thus has zero energy and describes a short, large amplitude burst reaching $X = -\kappa^2/(4\lambda T)$. The corresponding action, $S(\lambda) = \int dt P \dot{X} = \int P dX$, is given by the area shaded in Fig. 4.3:

$$S(\lambda) = \frac{1}{T} \int_0^{-\kappa^2/(4\lambda T)} \sqrt{\kappa^2 X^2 + 4\lambda T X^3} dX = \frac{1}{60} \frac{\kappa^5}{T^3} \frac{1}{\lambda^2} \quad (4.66)$$

One can now optimize $S = -t_0 \lambda q + S(\lambda)$ (cf. Eq. (4.58)) over λ and substitute the optimal λ back into this expression. This way we recover Eq. (4.65) with $\alpha = (9/10)^{1/3}$, in agreement with Ref. [62].

11.4.10 4.10 Fluctuation Relation

Consider an overdamped Langevin dynamics in a time-dependent potential

$$\dot{X} = -\partial_X V(X, t) + \sqrt{T} \xi(t), \quad (4.67)$$

where the white noise is normalized according to Eq. (4.8). The time dependence of the potential is limited to a time window $t_i < t < t_f$. Moreover, we shall assume that initially at

⁰⁴ I am grateful to Ofer Zeitouni for providing these arguments.

⁵ At smallest q the Donsker-Varadhan scaling still holds. This can be seen from a brute force evaluation of low moments, $\langle q^2 \rangle, \langle q^4 \rangle, \dots$. The corresponding large deviation function is found as $\Lambda(q) \propto \kappa^3 q^2 / (T^3 \tau_{\text{rel}})$. Comparing Eqs. (4.56) and (4.65), one finds that the Donsker-Varadhan scaling holds for $q < q_c$, where $q_c \propto (T/\kappa)^{3/2} (\tau_{\text{rel}}/t_0)^{1/4} \rightarrow 0$, as $t_0 \rightarrow \infty$. At $q = q_c$ there is a first-order transition to the new counting statistics, which is given by Eq. (4.65) for $q \gg q_c$ [61]. I am indebted to Baruch Meerson and Naftali Smith for clarifications of this issue.

$t = t_i$ the system is in equilibrium with a bath maintained at temperature T . During the time interval $[t_i, t_f]$ the potential is changing by the action of an external device. Such a device (e.g. a piston) is performing work W on the system, which may be written as

$$W[X] = \int_{t_i}^{t_f} dt \partial_t V(X(t), t) \quad (4.68)$$

The work is a functional of the stochastic trajectory $X(t)$, which the system follows upon a given realization of the random noise $\xi(t)$. As a result, the work W is itself a random quantity, dependent on the noise. One may ask about statistics of the work, for example, the work distribution function $\mathcal{P}(W)$. This question probably can't be answered for an arbitrary potential. There is, however, a particular function of the work, $e^{-W/T}$, whose average value may be found in a very general form [63, 65].

Employing the MSR method of Section 4.3, one finds for the corresponding average value (cf. Eq. (4.12)),

$$\begin{aligned} \langle e^{-W/T} \rangle &= \int \mathbf{D}[X, X^q] e^{\int dt [-2iX^q(\dot{X} + \partial_X V(X, t)) - 4T(X^q)^2]} e^{-W[X]/T} \\ &= \int \mathbf{D}[X, X^q] e^{\int dt [-2iX^q(\dot{X} + \partial_X V(X, t)) - 4T(X^q)^2 - \frac{1}{T} \partial_t V(X, t)]} \end{aligned} \quad (4.69)$$

Let us first analyze this expression within the stationary path approximation. Following the procedure of Section 4.4, it is convenient to rename the auxiliary variable as $X^q = P/(2i)$. The action acquires the Hamiltonian form (4.20), where

$$H(P, X, t) = -P \partial_X V(X, t) + TP^2 - \frac{1}{T} \partial_t V(X, t). \quad (4.70)$$

Notice that this Hamiltonian does not satisfy the probability conservation condition (4.24), because it includes the specific observable $-W/T$. Since the Hamiltonian is explicitly time dependent, the energy is not conserved and the solution of the stationary path equations

$$\dot{X} = \frac{\partial H}{\partial P} = -\partial_X V + 2TP, \quad \dot{P} = -\frac{\partial H}{\partial X} = P \partial_X^2 V + \frac{1}{T} \partial_X \partial_t V \quad (4.71)$$

is not immediately obvious. Remarkably, the activation trajectory of the timeindependent problem, that is, the time-reversed path of the noiseless relaxation $\dot{X} = +\partial_X V$ and $P = \partial_X V/T$, still solves the equations of motion. This fact may be checked by direct substitution of this solution into the equations (4.71).⁶ Notice

⁶ This solution may be traced back to the existence of the canonical transformation $(P, X, H) \rightarrow (p, x, h)$, with the generating function [35] $\Phi = \Phi(x, P, t) = -xP + V(x, t)/T$. Then the following relations hold:

$$X = -\frac{\partial \Phi}{\partial P} = x, \quad p = -\frac{\partial \Phi}{\partial x} = P - \frac{1}{T} \partial_x V(x, t)$$

The transformed Hamiltonian is

$$\begin{aligned} h = H + \frac{\partial \Phi}{\partial t} &= -\left(p + \frac{1}{T} \partial_x V(x, t)\right) \partial_x V(x, t) + T \left(p + \frac{1}{T} \partial_x V(x, t)\right)^2 \\ \frac{1}{T} \partial_t V(x, t) + \frac{1}{T} \partial_t V(X, t) &= p \partial_x V(x, t) + Tp^2. \end{aligned}$$

that to have such a solution it is crucial to average $e^{-\eta W}$ with $\eta = 1/T$. It would not work for any other η . The action along this trajectory is given by

$$iS = - \int dt [P\dot{X} - H] = -\frac{1}{T} \int dt [\partial_X V \dot{X} + \partial_t V] = -\frac{1}{T} \int dV = \frac{V_i - V_f}{T}$$

where $V_{i/f} = V(X_{i/f}, t_{i/f})$ and e^{iS} gives the relative weight of a particle moving from X_i to X_f under the action of the time-dependent potential. Since at $t = t_i$ the system is assumed to be in thermal equilibrium, the initial coordinate is to be weighted with the Boltzmann distribution $e^{-V_i/T}/Z(t_i)$. On the other hand, there is no control over the final coordinate X_f and therefore it should be integrated over with the plane measure, resulting in $Z(t_f)$. One thus obtains

$$\langle e^{-W/T} \rangle = \frac{e^{-V_i/T}}{Z(t_i)} \int dX_f e^{(V_i - V_f)/T} = \frac{Z(t_f)}{Z(t_i)} = e^{-(F(t_f) - F(t_i))/T} \quad (4.72)$$

where $Z(t_{i/f}) = \int dX e^{-V(X, t_{i/f})/T} \equiv e^{-F(t_{i/f})/T}$ are the equilibrium partition functions in the potentials $V(X, t_i)$ and $V(X, t_f)$, respectively. Therefore this particular average value of the non-equilibrium work may be expressed through the equilibrium free energies of the system allowed to equilibrate in the initial and final potential configurations. This remarkable statement is known as the Jarzynski fluctuation relation [63, 65]. As a matter of principle, it allows one to measure the equilibrium free energy of the final state, without waiting for the system to equilibrate. To this end one has to accumulate statistics of the work performed to bring the system into final (yet non-equilibrium) states, and average $e^{-W/T}$.

So far we have derived the fluctuation relation in the stationary path approximation. Let us show now that Eq. (4.72) is actually exact, that is, there is no pre-exponential factor on its right-hand side. To this end we need to derive the Fokker-Planck equation corresponding to the functional integral (4.69) [67]. As explained in Section 4.5 the "quantization" procedure is $\partial_t \mathcal{P}(X, t) = \hat{H} \mathcal{P}(X, t)$, where $\hat{H}$ is obtained from Eq. (4.70) by the substitution $P \rightarrow -\partial_X$:

$$\partial_t \mathcal{P} = \partial_X [\partial_X V \mathcal{P}] + T \partial_X^2 \mathcal{P} - \frac{1}{T} \partial_t V \mathcal{P} \quad (4.73)$$

The initial condition is $\mathcal{P}(X, t_i) = e^{-V(X, t_i)/T}/Z(t_i)$. Motivated by the stationary path result, we look for the solution of this equation in the following form: $\mathcal{P}(X, t) = e^{-V(X, t)/T}/Z(t)$. It is easy to check that it is indeed the solution, satisfying the initial condition. Notice that having the coefficient $1/T$ in the last term (the observable) is vital to find such a simple solution. By construction of the functional integral (4.69), $\langle e^{-W/T} \rangle = \int dX \mathcal{P}(X, t_f)$, leading directly to Eq. (4.72). This proves that the

fluctuation relation (4.72) is not restricted to the stationary path approximation, but is actually exact.

11.4.11 4.11 Reaction Models

Another important class of classical stochastic models is provided by reaction systems. These models are formulated in terms of reaction rules that are followed by certain agents. The latter are typically denoted as A, B , and so on and can be atoms, molecules, viruses, organisms, or other things. An example of such a reaction rule is $A + A \xrightarrow{\lambda} B$, which states that two agents A may coagulate to form an agent B . A probability for this to happen per unit time (in other words, a reaction rate) is denoted as λ . One would like to have a description that would be able to predict an outcome of many such reactions, provided some initial conditions are specified. It is clear that such a description has to be probabilistic, since there is no way to say with absolute

⁰It is conserved (despite being time dependent), $h = 0$, along the following obvious solution of the equations of motion: $p = 0$, while $\dot{x} = \partial_x V$. Being transformed back to the original variables, it yields the required solution.

certainty how many and what reactions will happen in a long time span. The other important thing to remember is that the number of agents at any time is always an integer. Therefore a state of the system may be characterized by a time-dependent probability $\mathcal{P}(n, m, \dots, t)$ of finding n agents A , m agents B , and so on at time t , where $n, m, \dots$ are integers. Such a probability is normalized as

$$\sum_{n, m, \dots} \mathcal{P}(n, m, \dots, t) = 1 \quad (4.74)$$

For any given set of reaction rules one may formulate an evolution equation, also known as a Master equation, for probabilities $\mathcal{P}(n, m, \dots, t)$. For example, for a single species reaction model, the Master equation is

$$\partial_t \mathcal{P}(n, t) = \sum_{n'} [W_{n' \rightarrow n} \mathcal{P}(n', t) - W_{n \rightarrow n'} \mathcal{P}(n, t)] \quad (4.75)$$

where $W_{n \rightarrow n'}$ is the rate of going from a state with n agents to a state with n' ones. The first term on the right-hand side is the rate of in processes, that is, those which lead into the state n from any other state, while the second term is the rate of out processes, namely, those which lead out of the state n into any other state. If, for example, the reaction rules are $A + A \xrightarrow{\lambda} \emptyset$, $A \xrightarrow{\mu} \emptyset$, and $A \xrightarrow{\sigma} 2A$, the corresponding rates are

$$W_{n \rightarrow n'} = \lambda \delta_{n', n-2} n(n-1)/2 + \mu \delta_{n', n-1} n + \sigma \delta_{n', n+1} n \quad (4.76)$$

where $n(n-1)/2$ is the number of pairs that can enter the coagulation reaction, and n is the number of agents amenable to annihilation or branching.

Reaction models may have a stationary state, that is a time-independent solution of the Master equation $\mathcal{P}(n)$. If, in such a stationary state, every term on the righthand side of Eq. (4.75) (i.e. for any integer n') is zero, $W_{n' \rightarrow n} \mathcal{P}(n') = W_{n \rightarrow n'} \mathcal{P}(n)$, it is said that the reaction scheme satisfies the detailed balance condition. If there are no reactions creating agents out of the empty state $\emptyset$, in many cases the only stationary solution is the complete extinction $\mathcal{P}(n) = \delta_{n,0}$. In this case the detailed balance condition is clearly absent.

The Master equation (4.75) may be written as a differential equation. To this end let us formally extend the integer variable n onto the entire real axis. The "in" term of the Master equation includes the shift operation of the function $W_{n \rightarrow n+r} \mathcal{P}(n, t)$, where r is an integer, on r units to bring it to the form $W_{n-r \rightarrow n} \mathcal{P}(n-r, t)$. Such a shift operation may be written as $e^{-r \partial_n}$.⁷ As a result, the Master equation (4.75) acquires the form

$$\partial_t \mathcal{P}(n, t) = \sum_r [e^{-r \partial_n} - 1] W_{n \rightarrow n+r} \mathcal{P}(n, t) \quad (4.77)$$

It may thus be written as $\partial_t \mathcal{P} = \hat{H}(\hat{p}, n) \mathcal{P}$, where the "momentum" operator stands for $\hat{p} = -\partial_n$ and the reaction Hamiltonian is given by [68]

$$H(\hat{p}, n) = \sum_r [e^{r \hat{p}} - 1] W_{n \rightarrow n+r} \quad (4.78)$$

The reaction Hamiltonian is normally ordered, meaning that all $\hat{p}$ operators stay on the left of the n -dependent functions. It also satisfies the identity (4.24), $H(0, n) = 0$, which is necessary to maintain the conservation of probability (4.74). This way of writing the Master equation brings it into the same category as the Ito-Fokker-Planck equation. The only difference is that the latter has only terms of the first and second powers of the $\hat{p}$ -operator. For some problems one may expand the exponent in Eq. (4.78) up to second power in $r\hat{p}$, reducing the Master equation to the Fokker-Planck equation (4.23). In this case the drift term is $A(n) = \sum_r r W_{n \rightarrow n+r}$,

while the diffusion coefficient $D(n) = \sum_r r^2 W_{n \rightarrow n+r}/2$. Other problems do not allow for such an expansion, nevertheless all the tools developed for the treatment of the Ito-Fokker-Planck dynamics may be directly transferred to the reaction models.

In particular, a solution to the Master equation may be formally written as $\mathcal{P}(n, t) = \int dn_i \hat{\mathcal{U}}(n, t; n_i, t_i) \mathcal{P}(n_i, t_i)$, where the evolution operator acts on an initial distribution function. The evolution operator $\hat{\mathcal{U}}$ may be represented by the Hamiltonian path integral; see Eq. (4.12):

$$\hat{\mathcal{U}}(n, t; n_i, t_i) = \int \mathbf{D}[n, p] e^{-\int dt [p\dot{n} - H(p, n)]} \quad (4.79)$$

where, as explained at the end of Section 4.4, the $\mathbf{D}[p]$ integration runs along the imaginary axis. The trajectories satisfy $n(t_i) = n_i$ and $n(t) = n$. We shall first

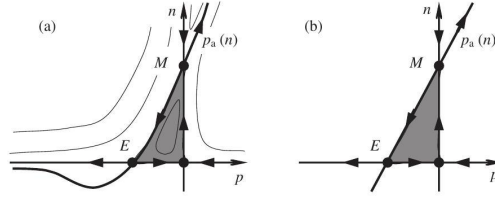


Figure 4.4 Phase portraits of the reaction Hamiltonians: (a) (4.81), which corresponds to the reaction scheme (4.76); (b) the universal Hamiltonian (4.83) close to the bifurcation point. Bold lines are curves of zero energy, M is the metastable point, and E the extinction fixed point.

analyze this expression in the stationary path approximation. The corresponding equations of motion are the Hamilton equations $\dot{n} = \partial_p H$ and $\dot{p} = -\partial_n H$. Since they conserve the energy H , one may visualize the solutions by plotting curves of constant energy on the phase plane (p, n) , Fig. 4.4(a). As discussed in Section 4.4, the long-time behavior is described by the curves of zero energy $H = 0$. Due to the conservation of probability (4.74), one such line is always $p = 0$. The corresponding stationary path equation is nothing but the rate equation

$$\dot{n} = \partial_p H(p, n)|_{p=0} = \sum_r r W_{n \rightarrow n+r} = A(n) \quad (4.80)$$

It provides the mean-field description, which disregards fluctuations and discreteness of the agents. For the reaction scheme of Eq. (4.76) it predicts the stable fixed point at $n = \bar{n} \approx (\sigma - \mu)/\lambda$ and the unstable fixed point at $n = 0$. According to the rate equation (4.80), the population stabilizes at $n \approx \bar{n}$. This is indeed the case at the intermediate time scale (provided $\bar{n} \gg 1$). However, in the long-time limit the only stationary solution of the corresponding Master equation is the extinct state. In the stationary path approximation this fact is reflected in the presence of the $n = 0$ line of constant zero energy, which is thus the invariant line of the Hamiltonian dynamics. This is always the case if $n = 0$ is the absorbing state, namely $W_{0 \rightarrow n'} = 0$. As a result all $W_{n \rightarrow n'} \sim n$ and therefore $H(p, 0) = 0$.

For a scheme exemplified by Eq. (4.76) one finds, with the help of Eq. (4.78), the following reaction Hamiltonian:

$$H(p, n) = \frac{\lambda}{2} (e^{-2p} - 1) n(n-1) + \mu (e^{-p} - 1) n + \sigma (e^p - 1) n. \quad (4.81)$$

Its inspection shows that in addition to $p = 0$ and $n = 0$, there is the third curve of zero energy $p = p_a(n)$, which we call the activation trajectory; see Fig. 4.4(a). The activation trajectory intersects the rate equation line $p = 0$ in the metastable fixed point $M = (0, \bar{n})$. It also intersects the extinction line $n = 0$ in the extinction fixed point $E = (\bar{p}, 0)$. The large fluctuation, leading to the population extinction, starts at the metastable state M and proceeds

⁰⁷ Indeed, $e^{-r\partial_n} f(n) = f(n) - r f'(n) + r^2 f''(n)/2 - \dots = f(n-r)$.

along the activation trajectory $p_a(n)$ until the extinction fixed point E . The rate of such events is $\sim e^{-S_{\text{ex}}}$, where the extinction action is given by (hereafter we absorb the factor $-i$ into the action; cf. Eq. (4.20))

$$S_{\text{ex}} = \int dt[p\dot{n} - H(p, n)] = \int_{\bar{n}}^0 p_a(n)dn \quad (4.82)$$

Here we took into account that $H = 0$ along the activation trajectory. The extinction time is thus proportional to the exponentiated area of the shaded triangle in Fig. 4.4(a) [68, 69].

If the two fixed points of the rate equation $n = \bar{n}$ and $n = 0$ are relatively close to each other, the problem may be substantially simplified. For our example (4.76), (4.81) this is the case when $0 < \sigma - \mu \ll \sigma$. One may then disregard the curvature of the activation trajectory between the fixed points M and E and substitute it by a straight line. This leads to the universal reaction Hamiltonian of the form

$$H(p, n) = p \left(\delta - \frac{n}{N} + p \right) n \quad (4.83)$$

Its three zero-energy lines form the right triangle, Fig. 4.4(b). In terms of our example (4.76) we put $\mu + \sigma = 1$, which fixes units of time, and introduced notations $\delta = (\sigma - \mu)/(\sigma + \mu) \ll 1$ for the so-called bifurcation parameter and $N = (\sigma + \mu)/\lambda \gg 1$ for the effective system size. A large class of models in the vicinity of the bifurcation point may be described by this Hamiltonian. The activation trajectory is given by $p_a(n) = n/N - \delta$ and therefore the extinction action (4.82) is $S_{\text{ex}} = N\delta^2/2$.

Substituting $p \rightarrow -\partial_n$ and keeping the normal ordering in Eq. (4.83), one obtains the universal limit of the Master equation for $\mathcal{P}(n, t)$. Its only true stationary solution is the extinct state $\mathcal{P}(n) = \delta_{n,0}$. There is, however, a long-lived metastable solution, which we shall look for in the form $\mathcal{P}(n)e^{-t/\tau_{\text{ex}}}$. With the help of the Master equation with the universal Hamiltonian (4.83), one finds $\mathcal{P}/\tau_{\text{ex}} = \partial_n [(-p_a(n) - \partial_n)n\mathcal{P}] = \partial_n J$. Since the extinction time τ_{ex} is expected to be exponentially long, the probability current $J(n)$ is practically a constant away from the narrow peak of the metastable distribution around $\bar{n} = N\delta \gg 1$. This constant current is obviously zero for $n \gg \bar{n}$ and is finite, $J(0)$, in the direction of the absorbing boundary at $n = 0$. Integrating the expression for the current, one finds $n\mathcal{P}(n) = -e^{-S(n)} \int_0^n dl J(l) e^{S(l)}$, where $S(n) = \int^n p_a(n)dn$ and we demanded that $n\mathcal{P} \xrightarrow{n \rightarrow 0} 0$. Integrating the equality $\mathcal{P} = \tau_{\text{ex}} \partial_n J$ over the entire range of n , one finds

$$\tau_{\text{ex}} = -\frac{1}{J(0)} \int_0^\infty dn \mathcal{P}(n) = \int_0^\infty \frac{dn}{n} e^{-S(n)} \int_0^n dl \frac{J(l)}{J(0)} e^{S(l)} \quad (4.84)$$

The dn integral is dominated by the minimum of the action $S(n)$, that is, by $n \approx N\delta = \bar{n}$. Under these conditions the dl integral is given by the boundary region $l \approx 0$, where $J(l) \approx J(0)$ with exponential precision. Evaluating the integrals in the stationary/boundary point approximation, one finds

$$\tau_{\text{ex}} = \sqrt{\frac{2\pi}{S''(\bar{n})}} \frac{1}{\bar{n}} \frac{e^{S_{\text{ex}}}}{|S'(0)|} = \sqrt{\frac{2\pi}{p'_a(\bar{n})}} \frac{1}{\bar{n}} \frac{e^{S_{\text{ex}}}}{|p_a(0)|} = \sqrt{\frac{2\pi}{N}} \frac{1}{\delta^2} e^{N\delta^2/2}. \quad (4.85)$$

The result is valid for $N^{-1/2} < \delta \ll 1$. Notice that scaling of the action and the pre-exponential factor with the bifurcation parameter δ is very different from the Kramers activation (4.53). This result, along with pre-exponential factors in more general situations, was found in [70, 71, 72].

11.4.12 4.12 Time-Dependent Problems

Imagine that the particle's potential or reaction rates are modulated in time. In Sections 3.4 and 3.5 we discussed how such a modulation affects the quantum tunneling. Here we consider its influence on the activation escape time, or the extinction time. In the language of optimal paths these rare events correspond to instanton trajectories, which bring the system from, for example, the metastable fixed point M to the extinction fixed point E ; see Fig. 4.4. In a time-independent setting, such an instanton trajectory may be written $n = n_0(t - t_0)$ and $p = p_0(t - t_0)$, where t_0 is an arbitrary constant that specifies the time of the extinction event. The action does not depend on t_0 and it is therefore said to be a "zero mode." If the Hamiltonian is an explicit function of time, the independence of the action on t_0 is lifted. Indeed, there are more and less preferable instances of undertaking the fluctuation that leads to the extinction. The probabilities of these fluctuations differ exponentially and therefore are largely dominated by the "best chance" t_0 , when the extinction is most likely to occur [73].

One can analytically access such an optimal t_0 and the corresponding extinction probability in some limiting cases. The first such case is a weak time-dependent modulation of the system's parameters. It leads to a time-dependent reaction (or Fokker-Planck) Hamiltonian:

$$H(p, n, t) = H_0(p, n) + \varepsilon H_1(p, n, t) \quad (4.86)$$

where ε is a small parameter. According to the Melnikov theorem of classical mechanics [75, 76], the perturbed Hamiltonian still allows for the optimal trajectory. This is the case if ε is small enough and another condition, explained in what follows, is satisfied. Such a deformed optimal trajectory may be written as

$$n(t, t_0) = n_0(t - t_0) + \varepsilon n_1(t, t_0), \quad p(t, t_0) = p_0(t - t_0) + \varepsilon p_1(t, t_0) \quad (4.87)$$

The corresponding action to first order in ε is given by the integral of

$$(p_0 + \varepsilon p_1)(\dot{n}_0 + \varepsilon \dot{n}_1) - H_0 - \partial_n H_0 \varepsilon n_1 - \partial_p H_0 \varepsilon p_1 - \varepsilon H_1 = p_0 \dot{n}_0 - \varepsilon H_1$$

where we employed the fact that $H_0(n_0, p_0) = 0$ along with the equations of motion $\dot{n}_0 = \partial_p H_0$ and $\dot{p}_0 = -\partial_n H_0$. We have also disregarded the full time derivative $p_0 \dot{n}_1 + \dot{p}_0 n_1$. The first term on the right-hand side is the unperturbed action S_{ex} . Therefore, to first order in ε the change of the action (4.20) is

$$S_1(t_0) = -\varepsilon \int dt H_1(p_0(t - t_0), n_0(t - t_0), t) \quad (4.88)$$

To maximize the extinction (escape) probability $\sim e^{-(S_{\text{ex}} + S_1(t_0))}$, one needs to find minima of $S_1(t_0)$ with respect to the center of the bare instanton t_0 . That is, find a t_0 such that $\partial_{t_0} S_1(t_0) = 0$, while the second derivative is positive. This leads to the condition

$$\int dt (\partial_p H_1 \dot{p}_0 + \partial_n H_1 \dot{n}_0) = \int dt \{H_1, H_0\} = 0 \quad (4.89)$$

where $\{, \}$ denotes classical Poisson brackets [35] and we again employed equations of motion $\dot{n}_0 = \partial_p H_0$ and $\dot{p}_0 = -\partial_n H_0$. Existence of simple zeros of this function is the condition of the Melnikov theorem [75, 73, 77].

As an example, consider H_0 given by the universal extinction Hamiltonian (4.83). Its bare instanton trajectory may be easily obtained by putting $p = p_a(n) = n/N - \delta$ into the Hamilton equation of motion $\dot{n} = \partial_p H(p, n)$ and integrating this first-order differential equation. The result is

$$n_0(t - t_0) = \frac{N\delta}{1 + Ne^{\delta(t-t_0)}}, \quad p_0(t - t_0) = -\frac{N\delta e^{\delta(t-t_0)}}{1 + Ne^{\delta(t-t_0)}} \quad (4.90)$$

For the time-dependent part we take a weak harmonic modulation of the bifurcation parameter $\delta(t) = \delta(1 + \varepsilon \cos \Omega t)$, leading to $H_1(p, n, t) = pn\delta \cos \Omega t$. The resulting correction (4.88) to the action is

$$S_1(t_0) = \varepsilon N^2 \delta^3 \int dt \frac{e^{\delta(t-t_0)} \cos \Omega t}{(1 + Ne^{\delta(t-t_0)})^2} = \frac{\varepsilon \pi N \delta \Omega}{\sinh \pi \Omega / \delta} \cos [\Omega (t_0 + \delta^{-1} \ln N)]$$

Once every period there is the "best chance" t_0 , rendering the last cosine to be -1. For such optimal trajectories one finds the negative correction to the extinction action

$$S_1 = -\varepsilon S_{\text{ex}} \frac{2\pi \Omega / \delta}{\sinh(\pi \Omega / \delta)} \quad (4.91)$$

where, as before, $S_{\text{ex}} = N\delta^2/2$. The modulation thus leads to the exponential reduction of the extinction time (4.84) by the factor $e^{-|S_1|}$. The result is valid as long as $1 < |S_1| \ll S_{\text{ex}}$. In the limit $\Omega \ll \delta$ the correction is $-2\varepsilon S_{\text{ex}}$, which may be immediately found as the minimizing adiabatic form of the extinction action $S_{\text{ex}} = N\delta^2(t)/2$. At large frequency $\Omega > \delta$ the linear correction decays exponentially.⁸ This should be compared with the very different frequency dependence for the underdamped, Eq. (3.32), and overdamped, Eq. (3.43), quantum tunneling.

Another example where the optimal path may be explicitly constructed is a sudden temporary change in the system's parameters [79]. We call it a "catastrophic" event. Consider, for example, the reaction scheme (4.76) and assume that during the time window $-t_c < t < t_c$ the branching rate σ suddenly drops to zero. There is a chance that, after it recovers back to its pre-catastrophic value at $t = t_c$, the population does not recover (provided it was not extinct at the time the catastrophe struck at $t = -t_c$). Our goal is to evaluate the probability that the population goes extinct during the catastrophe or in its immediate aftermath. The corresponding optimal trajectory starts at the metastable fixed point M sometime before the catastrophe arrives and ends up in the extinction fixed point E after it ends. Therefore the initial and final pieces of the optimal path follow the zero energy activation trajectory $p_a(n)$ of the pre-catastrophic Hamiltonian $H_0(p, n)$. During the time window $|t| < t_c$ the Hamiltonian acquires a different form $H_c(p, n)$, and the optimal path follows one of its finite energy trajectories, Fig. 4.5. The latter is selected in such a way that the time elapsed between its two intersections with $p_a(n)$ is exactly $2t_c$.

To be specific, let us model the pre-catastrophic $H_0(p, n)$ by Eq. (4.83), while during the catastrophe $H_c(p, n) = -\mu pn$. The latter corresponds to the pure annihilation reaction $A \xrightarrow{\mu} \emptyset$, where we took into account that $|p| < \delta \ll 1$. Its constant energy H trajectory $p_H(n) = -H/(\mu n)$ intersects the activation trajectory $p_a(n) = n/N - \delta$ in points $n_{\pm} = (1 \pm \epsilon)N\delta/2$, where $\epsilon = \sqrt{1 - 4H/\mu N\delta^2}$. Since $n(t) \sim e^{-t\mu}$ along $p_H(n)$, the time elapsed between points n_+ and n_- is found to be $e^{-2t_c\mu} = n_-/n_+ = (1 - \epsilon)/(1 + \epsilon)$. From here one finds the proper energy to be $H = \mu N\delta^2/4 \cosh^2(t_c\mu)$. The corresponding extinction action is given by $S(t_c) = \int dt [p\dot{n} - H]$, where the first term is the area shaded in Fig. 4.5, while the second one is $-2t_c H$. Straightforward calculation yields

$$S(t_c) = S_{\text{ex}} [1 - \tanh(t_c\mu)] = N\delta^2 / (1 + e^{2t_c\mu}) \quad (4.92)$$

The extinction probability in the aftermath of the catastrophe is $\sim e^{-S(t_c)}$. It is of order one if $N\delta^2 e^{-2t_c\mu} \approx 1$. However, according to the rate equation $\dot{n} = -\mu n$, by the time such a catastrophe ends $n(2t_c) = N\delta e^{-2t_c\mu} \approx 1/\delta \gg 1$, and one could

⁰⁸ There is, however, the second-order correction to the action $\sim -(\varepsilon\delta/\Omega)^2 S_{\text{ex}}$, which decays only as a power

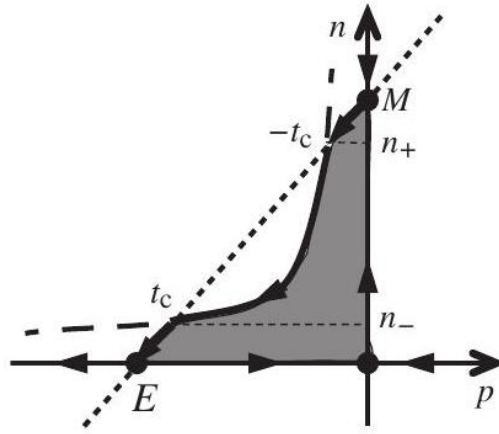


Figure 4.5 Optimal path to extinction facilitated by the catastrophe - bold line. The dotted line is the activation trajectory of the pre-catastrophic Hamiltonian $p_a(n)$. The dashed line is a finite energy trajectory of the Hamiltonian during the catastrophe, $p_H(n)$. The switches between the two occur at $t = \mp t_c$.

expect that the population is still in no immediate danger of extinction. The message is that the population may be much less catastrophe-tolerant than a naive expectation based on the rate equations.

11.4.13 4.13 Large Deviations in Multivariable Systems

We discuss now applications of the optimal path approach of Section 4.4 for systems with several degrees of freedom. The ideas touched upon here were introduced in seminal works of Graham and Tél [80], Dykman and Smelyanskiy [84], and Maier and Stein [86]. Consider, for example, an overdamped stochastic system with two degrees of freedom X_1 and X_2 , that is, $\dot{X}_\alpha = A_\alpha(X) + \sqrt{T}\xi_\alpha(t)$, with the white noise (4.15). Its Fokker-Planck Hamiltonian (4.19) is given by

$$H(P_1, P_2, X_1, X_2) = P_1 A_1(X) + P_2 A_2(X) + T P_1^2 + T P_2^2 \quad (4.93)$$

The corresponding noiseless motion is described by the zero-energy invariant plane of this Hamiltonian $P_1 = P_2 = 0$, indeed $\dot{X}_\alpha = A_\alpha(X) = \partial_{P_\alpha} H|_{P=0}$. Let us assume for simplicity that such a noiseless dynamics admits a fixed point at $X_1 = X_2 = 0$, namely it is in the origin of the four-dimensional phase space. Being the fixed point means $A_\alpha(0) = 0$. Linearizing noiseless equations of motion in the vicinity of this point, one finds $\dot{X}_\alpha = A_{\alpha\beta} X_\beta$, where $A_{\alpha\beta} = \partial_\beta A_\alpha(X)|_{X=0}$. The matrix $A_{\alpha\beta}$ may have either two real eigenvalues $\lambda_{1,2}$, or two complex conjugated eigenvalues $\lambda_{1,2} = \kappa \pm i\omega$. We consider the latter case and assume that $\kappa < 0$, that is the fixed point $X = 0$ is a locally stable focus. This means that the noiseless relaxation tends to bring the system to the fixed point along a spiral trajectory. In a near vicinity of $X = 0$ the spirals may be characterized in terms of the two right eigenvectors of $A_{\alpha\beta}$, which both belong to the (X_1, X_2) plane of the four-dimensional phase space (analog of the $P = 0$ line in the one degree of freedom example of Fig. 4.1).

Thermal fluctuations take the system out of the fixed point and lead to a certain probability of finding the system at $X_0 \neq 0$. As explained in Section 4.4, such a probability is given by the exponentiated action of an activation trajectory, which goes from the origin to a point of the phase space with the coordinates X_0 . In case of the single degree of freedom there is only one possible trajectory that departs from the fixed point: the curve of zero energy $P = -A(X)/T$,

law of frequency [78]. The same type of correction is responsible for the Kapitza pendulum effect. Therefore, at $\Omega \gtrsim (\delta/\pi) \ln(1/\varepsilon)$ the linear correction (4.91) may be disregarded.

Fig. 4.1. The situation is much more interesting now. Linearizing the Hamiltonian equations of motion determined by Eq. (4.93) near the origin, one finds

$$\begin{pmatrix} \dot{X}_\alpha \\ \dot{P}_\alpha \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{\alpha\beta} & 2T\delta_{\alpha\beta} \\ 0 & -A_{\alpha\beta}^T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X_\beta \\ P_\beta \end{pmatrix}. \quad (4.94)$$

This 4×4 matrix possesses four eigenvalues. Two of them are already familiar eigenvalues of $A_{\alpha\beta}$ denoted as $\lambda_{1,2}$. The corresponding two right eigenvectors have zero components in the P directions. They thus give rise to the relaxation trajectories, which stay entirely within the invariant hyperplane $P = 0$. Two additional eigenvalues $\lambda_{3,4} = -\lambda_{1,2}$ have positive real parts and thus describe the activation trajectories that depart from the fixed point. The corresponding right eigenvectors have, in general, nonzero components in all four directions of the phase space. All trajectories that depart from the fixed point along an arbitrary linear superposition of these two eigenvectors form the two-dimensional Lagrangian manifold of activation trajectories. The energy is still a conserved quantity and therefore all the trajectories forming the Lagrangian manifold have the fixed energy, which is zero. (Indeed, all these trajectories depart from the origin, which has zero energy). The Lagrangian manifold is a generalization of the activation zero energy trajectory of Fig. 4.1. Since for a non-potential force A_α the Lagrangian manifold is not given by $P_\alpha(X) = -A_\alpha(X)/T$,⁹ the activation trajectories are not time-reversed counterparts of the relaxation ones.

This observation may have dramatic consequences. As shown in [80, 84, 86], for non-potential forces the Lagrangian manifold develops cusp singularities some distance away from the origin, Fig. 4.6(a). The projection of the manifold onto the physical (X_1, X_2) plane exhibits two caustics, emanating from the cusp, Fig. 4.6(b). In between them the projection is three-valued. There are thus three distinct trajectories, whose projections pass through the same point $X_0 = (X_{01}, X_{02})$. Two of them, 1 and 2, reach the point X_0 before being reflected by one of the caustics, that is, they meet X_0 while being on the top and bottom sheets of the manifold.

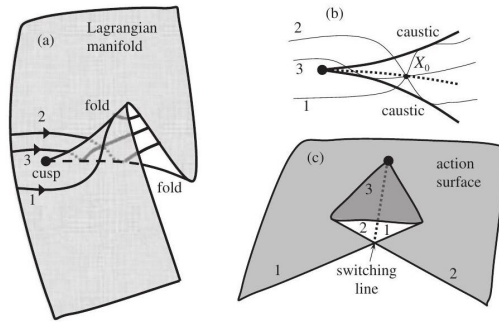


Figure 4.6 (a) Lagrangian manifold with a cusp singularity and three characteristic trajectories coming from the origin; (b) Projection of the Lagrangian manifold onto the (X_1, X_2) plane. The two folds project onto caustics, while projections of the three trajectories intersect at the point X_0 ; (c) The action $S(X_0)$ is a threevalued function in between the caustics. Two of its lower branches intersect along the switching line. After [84].

The projection of 3 passes through X_0 after being reflected once by a caustic, that is, the corresponding trajectory meets X_0 being on the middle sheet of the Lagrangian manifold. The action $S(X_0)$ calculated along the trajectories is therefore a three-valued function of the

⁹ Indeed, according to the Hamilton-Jacobi equation [35] the Lagrangian manifold is characterized by $P_\alpha(X) = -\partial_\alpha S(X)$, where S is the action along a trajectory leading to X . Therefore, for $P_\alpha(X) = -A_\alpha(X)/T$ to be true one needs to have $\partial_2 A_1 = \partial_1 A_2$, which implies $A_\alpha = -\partial_\alpha V(X)$, that the force is potential (no vorticity). In the language of the Fokker-Planck equation the condition $P_\alpha(X) = -A_\alpha(X)/T$ means that in a stationary state all components of the current vector are zero. Again, this is not the case in presence of vorticity - a stationary state does support a finite divergenceless current. The author is indebted to M. Dykman for clarifying this point.

physical coordinate in between the two caustics, Fig. 4.6(c). The biggest action is due to trajectories of type 3, which underwent reflection before arriving at the point X_0 . The two smaller action branches intersect each other along the switching line, which emanates from the projection of the cusp and stays in between the two caustics.

The stationary state probability $\mathcal{P}(X_0)$ of finding the system at point X_0 is given by the exponentiated action; see Section 4.4. If the action is multivalued, one can observe only its smallest branch, which gives rise to the largest probability. Therefore the large deviation function: $-\lim_{T \rightarrow 0} [T \ln \mathcal{P}(X_0)] = T \min \{S(X_0)\}$ is a nonanalytic function of the coordinates along the switching line. Notice that for the potential forces $A_\alpha = -\partial_\alpha V$, this function is simply the potential $V(X_0)$ and thus is perfectly smooth. As a result, the stationary state of non-equilibrium systems (e.g. with non-potential forces) is qualitatively different from that of equilibrium ones. Strictly speaking, this is only true in the limit of weak noise $T \rightarrow 0$, while for a finite noise the singularities are smeared. However, since the action is in the exponent, the change in the derivative across the switching line may be extremely sharp. There is a large mathematical literature devoted to this phenomenon [89, 90].

11.4.14 4.14 Problems

4.14.1 Noise-Induced Stabilization

Consider the following stochastic system:

$$\dot{X} = X^2 - Y^2 + \xi_X, \quad \dot{Y} = -2Y + \xi_Y \quad (4.95)$$

where the two uncorrelated Gaussian noises are $\langle \xi_X(t) \xi_X(t') \rangle = 2T_X \delta(t - t')$ and $\langle \xi_Y(t) \xi_Y(t') \rangle = 2T_Y \delta(t - t')$. Clearly the Y -degree of freedom equilibrates toward the stationary Boltzmann distribution $\mathcal{P}(Y) \propto e^{-Y^2/T_Y}$. If in the X -equation one substitutes $Y^2 \rightarrow \langle Y^2 \rangle = T_Y/2$, it creates an effective potential $V(X) = -X^3/3 + X \langle Y^2 \rangle$, which has a metastable minimum at $X_{\min} = -\sqrt{\langle Y^2 \rangle}$ and a local maximum at $X_{\max} = \sqrt{\langle Y^2 \rangle}$. Consequently, X may be trapped near $X_{\min}$ for the exponentially long time $\tau_{\text{es}} \propto e^{(V(X_{\max}) - V(X_{\min}))/T_X} = e^{\sqrt{2}T_Y^{3/2}/3T_X}$. Notice that the trapping time increases exponentially with the increase of the Y -noise amplitude.

Show that for $T_Y \gg \sqrt{T_X}$ the actual trapping time, though exponentially long, is much shorter than suggested by the preceding estimate. This is due to rare periods of anomalously quiet Y -noise, during which X has a chance to escape. To estimate this effect: (i) calculate the probability that for the time t_0 the Y degree of freedom is confined to $|Y| < Y_0$ (to this end one needs to solve the Fokker-Planck equation with the absorbing boundary conditions at $Y = \pm Y_0$); (ii) calculate the probability that in time t_0 the X coordinate diffuses the distance $X_{\max} - X_{\min} \approx 2Y_0$ and thus escapes the trapping (the corresponding diffusion coefficient is T_X). One can now optimize the product of these two probabilities over t_0 and Y_0 (it actually only depends on the ratio t_0/Y_0^2) to find the escape rate. This brings the estimate $\log \tau_{\text{es}} \propto \sqrt{T_Y/T_X}$. The numerical factor is calculated in [91].

4.14.2 Anomalous Counting Statistics

Following Section 4.9 and reference [62], derive long time counting statistics of $q_n = t_0^{-1} \int_0^{t_0} dt x^n(t)$, where $x(t)$ are trajectories of a stochastic harmonic oscillator and $n \geq 3$ is an integer. Show that $-\log \mathcal{P}(q_n) \propto (q_n t_0)^{2/n}$ at large t_0 .

4.14.3 Lotka-Volterra Model

Consider a population dynamics model of interacting fox (F) and rabbit (R) populations:

$$F \xrightarrow{\mu} \emptyset; \quad R \xrightarrow{\mu} 2R; \quad F + R \xrightarrow{\lambda} 2F, \quad (4.96)$$

where we put fox death and rabbit birth rates to be equal. (This assumption does not change any of the qualitative features of the model.) Derive the corresponding mean-field equations for $n_F(t)$ and $n_R(t)$, the corresponding reaction Hamiltonian (4.78), $H(p_F, p_R; n_F, n_R)$, and the Fokker-Planck equation for $\mathcal{P}(n_F, n_R, t)$. The latter may be obtained by expanding the normally ordered reaction Hamiltonian up to the second order in p_F and p_R and "quantizing" it with the substitution $\hat{p}_F = -\partial_{n_F}$ and $\hat{p}_R = -\partial_{n_R}$.

Show that with the change of variables $n_F, n_R \rightarrow \mathcal{F}, \mathcal{R}$ as $(N = \mu/\lambda)$

$$\mathcal{F} = \log(n_F/N); \quad \mathcal{R} = \log(n_R/N) \quad (4.97)$$

the mean-field equations acquire the Hamiltonian form $\dot{\mathcal{F}} = \partial_{\mathcal{R}} G; \dot{\mathcal{R}} = -\partial_{\mathcal{F}} G$, where the "Hamiltonian" $G(\mathcal{F}, \mathcal{R}) = e^{\mathcal{F}} - 1 - \mathcal{F} + e^{\mathcal{R}} - 1 - \mathcal{R} \geq 0$, and the time is measured in units of $1/\mu$. This implies a presence of the mean-field integral of motion: the "energy," G , and therefore the motion along closed orbits of constant G in the $(\mathcal{F}, \mathcal{R})$ phase space. This way $G = 0$, namely $\mathcal{F} = \mathcal{R} = 0$, corresponds to stationary populations of size $n_F = n_R = N$. The $G > 0$ orbits describe periodic population cycles, while $G \rightarrow \infty$ signals either the total extinction, or the extinction of the fox with the unlimited growth of the rabbit population.

The Fokker-Planck description does not conserve G and leads to a slow growth of G , resulting in an inevitable extinction. To show this, transform the Fokker-Planck equation for $\mathcal{P}(\mathcal{F}, \mathcal{R}, t) = n_F n_R \mathcal{P}(n_F, n_R, t)$, where factor $n_F n_R$ is the Jacobean of (4.97), into the form of the continuity relation

$$\partial_t \mathcal{P} = -\vec{\nabla} \cdot \left(\vec{J}_{\text{MF}} + \frac{\vec{J}_{\text{D}}}{N} \right); \quad \vec{\nabla} = (\partial_{\mathcal{F}}, \partial_{\mathcal{R}}); \quad \vec{J}_{\text{MF}} = (\mathcal{P} \partial_{\mathcal{R}} G, -\mathcal{P} \partial_{\mathcal{F}} G)$$

In the limit $N \rightarrow \infty$ where diffusive current component, $\vec{J}_{\text{D}}$, may be disregarded, any function $\mathcal{P}(G(\mathcal{F}, \mathcal{R}))$ is a stationary solution of the Fokker-Planck equation. This corresponds to the mean-field notion of never-ending population cycles. Corrections to this picture are small in $1/N \ll 1$, yet they lead to a drift of G toward infinity and therefore to extinction in a finite time $\tau_{\text{ex}} \sim N$. A quantitative theory may be derived by averaging over the fast cycles and deducing an effective radial Fokker-Planck equation for $\mathcal{P}(G, t)$, [92].

11.5 Driven-Dissipative Systems

This chapter considers driven oscillatory systems weakly coupled to a bath. To this end we derive the Lindblad equation for the density matrix as a limiting case of the effective Keldysh action. The formalism is then applied to a number of examples where the combined effect of the drive and the dissipation leads to qualitatively new phenomena.

11.5.1 5.1 Rotating-Wave Approximation

We again consider a quantum system in contact with a harmonic bath, very similar to the one presented in Section 3.2. There we have shown that already the simplest linear coupling to the environment generates an effective quadratic action, with nonlocal in time Keldysh component. The reason for this behavior is that for an equilibrium bath with temperature T the aforementioned quantum-quantum component of the bath-induced self-energy¹ is given by Eqs. (3.17), (3.18):

$$[\Sigma(\epsilon)]^{\text{K}} = -iJ(\epsilon) \coth \frac{\epsilon}{2T}, \quad (5.1)$$

where $J(\epsilon)$ is a spectral density of the bath, defined after Eqs. (3.17). Since at small temperatures $\coth \epsilon/2T \rightarrow \text{sign } \epsilon$ is a nonanalytic function of ϵ , this leads to a nonlocal in time $[\Sigma(t-t')]^K$. For example, an ohmic bath with $J(\epsilon) \sim \epsilon$ leads to $\Sigma^K(\epsilon) \sim |\epsilon|$. In the time domain this results in the nonlocal Caldeira-Leggett type action (3.20), [34], with $\Sigma^K \sim (t-t')^{-2}$ kernel.

This predicament may be avoided, however, if the system filters out the low frequency part of the bath spectrum and self-selects some relatively narrow highfrequency band. To illustrate this point, we consider a weakly nonlinear bosonic oscillator, which may represent, for example, a particular mode of a resonant cavity.

We will also assume that it is subject to an external monochromatic drive, close to its resonance frequency. In the secondary quantized representation the corresponding Hamiltonian of the oscillator linearly coupled to the bath is (cf. Eqs. (3.14)) $H = H_p + H_{\text{bath}} + H_{\text{int}}$, with ²

$$\hat{H}_p = \omega_0 \hat{b}^\dagger \hat{b} + \frac{g}{12} (\hat{b}^\dagger + \hat{b})^4 + 2i\eta (\hat{b}^\dagger - \hat{b}) \cos \omega_p t; \quad (5.2a)$$

$$\hat{H}_{\text{bath}} = \sum_s \omega_s \hat{a}_s^\dagger \hat{a}_s; \quad \hat{H}_{\text{int}} = \sum_s \frac{g_s}{\sqrt{2\omega_s}} (\hat{a}_s^\dagger \hat{b} + \hat{b}^\dagger \hat{a}_s), \quad (5.2b)$$

where η is an amplitude and ω_p a frequency of the external drive. We now perform a gauge transformation to pass to the rotating frame $\hat{b} = \hat{b} e^{i\omega_p t}$ and $\hat{b}^\dagger = \hat{b}^\dagger e^{-i\omega_p t}$. In the limit $|\omega_0 - \omega_p| \ll \omega_p$, one may disregard all terms rotating with frequency $2\omega_p$ and its higher harmonics. The resulting Hamiltonian in the rotating-wave approximation takes the form:

$$\hat{H}_p = \Delta \hat{b}^\dagger \hat{b} + \frac{g}{2} \hat{b}^\dagger \hat{b}^\dagger \hat{b} \hat{b} + i\eta (\hat{b}^\dagger - \hat{b}); \quad (5.3a)$$

$$\hat{H}_{\text{bath}} = \sum_s \omega_s \hat{a}_s^\dagger \hat{a}_s; \quad \hat{H}_{\text{int}} = \sum_s \frac{g_s}{\sqrt{2\omega_s}} (\hat{a}_s^\dagger \hat{b} e^{-i\omega_p t} + \hat{b}^\dagger \hat{a}_s e^{i\omega_p t}), \quad (5.3b)$$

where $\Delta \equiv \omega_0 - \omega_p + g \ll \omega_p$ is the detuning frequency. Notice that the timedependence enters now only in the interaction term between the system and the bath. One could, in principle, absorb it into a gauge transformation of the bath degrees of freedom. However this would obscure the fact that the original bath oscillators are assumed to be in thermal equilibrium. We thus prefer to keep their time-dependence explicitly.

The evolution operator along the closed time contour with the normally ordered Hamiltonian (5.3) may be written using the coherent state functional representation, using fields $\vec{\phi}(t)$, $\phi(t)$ for the system and $\vec{\varphi}_s(t)$, $\varphi_s(t)$ for the bath degrees of freedom. The time-dependent coupling terms acquire the following form: $\vec{\varphi}_s^+(t) \phi^+(t) e^{i\omega_p t} - \vec{\varphi}_s^-(t) \phi^-(t) e^{i\omega_p t} = [\vec{\varphi}_s^q(t) \phi^{\text{cl}}(t) + \vec{\varphi}_s^{\text{cl}}(t) \phi^q(t)] e^{i\omega_p t}$ and similarly for the conjugated term. Evaluating Gaussian integrals over $\vec{\varphi}_s = (\varphi_s^{\text{cl}}, \varphi_s^q)^T$, one finds the dissipative action for the oscillator (cf. Eq. (3.15)):

$$S_{\text{diss}} = - \iint_{-\infty}^{+\infty} dt dt' \vec{\phi}^T(t) \hat{\Sigma}(t-t') \vec{\phi}(t') \quad (5.4a)$$

$$\hat{\Sigma}(t-t') = \hat{\sigma}_1 \left[\sum_s \frac{g_s^2}{2\omega_s} e^{i\omega_p t} \hat{G}_s(t-t') e^{-i\omega_p t'} \right] \hat{\sigma}_1 \quad (5.4b)$$

⁰¹ Here we use a more appropriate self-energy notation for the inverse bath correlator of Section 3.2: $\hat{\Sigma} = -\hat{\mathcal{D}}^{-1}$.

⁰² We use $g_s/\sqrt{2\omega_s}$ as a coupling constant to keep the same notations as in the first quantized treatment of Section 3.2. Indeed, connection between the field variables and first quantized coordinates involves the square root of the oscillator frequency, Eq. (3.1).

where $\hat{G}_s$ is the Green function of the equilibrium bath oscillators, given by Eqs. (2.40), (2.47). Using bath spectral density, $J(\omega) = \pi \sum_s (g_s^2/\omega_s) \delta(\omega - \omega_s)$, one obtains for the components of the dissipative self-energy:

$$\text{Im}[\Sigma(\epsilon)]^{\text{R(A)}} = \mp \frac{i}{2} J(\epsilon + \omega_p); \quad [\Sigma(\epsilon)]^{\text{K}} = -iJ(\epsilon + \omega_p) \coth \frac{\epsilon + \omega_p}{2T} \quad (5.5)$$

The characteristic frequencies of the weakly nonlinear oscillator (5.3a) are centered in the narrow band around $\epsilon \approx \Delta$. In this case one is justified in approximating $\epsilon + \omega_p \approx \Delta + \omega_p \approx \omega_0$ on the right-hand sides of these equations and approximating them by constants:

$$\text{Im}[\Sigma(\epsilon)]^{\text{R(A)}} \approx \mp i\kappa; \quad [\Sigma(\epsilon)]^{\text{K}} \approx -2i\kappa(2n_B + 1) = -2i\kappa_1 \quad (5.6)$$

where $\kappa = J(\omega_0)/2$ is the spectral density of the bath at the resonance frequency and

$$\frac{\kappa_1 + \kappa}{\kappa_1 - \kappa} = \frac{n_B + 1}{n_B} = e^{\omega_0/T} \quad (5.7)$$

independent of the details of the bath. Here $n_B = n_B(\omega_0) = (e^{\omega_0/T} - 1)^{-1}$ is the occupation number of the bath oscillators at the oscillator frequency. Notice that $\text{Re } \Sigma^{\text{R}} = \text{Re } \Sigma^{\text{A}}$ may also be approximated by a constant, which may then be absorbed in the redefinition of the detuning frequency, Δ , in Eq. (5.3a). The approximation is valid for weak dissipation $\kappa \ll \omega_0$ and weak nonlinearity $gT \ll \omega_0^2$.

Comparing Eqs. (5.5) and (5.1), one observes that the nonanalytic behavior of $\Sigma^{\text{K}}(\epsilon)$ at $\epsilon = 0$ is avoided by shifting the nonanalytic point far away from the range of relevant frequencies. The ϵ -independent form of the dissipative self-energy (5.6) results in the time-local effective action, which includes the dissipative part (5.4) along with the unitary evolution with the time-independent Hamiltonian (5.3a):

$$\begin{aligned} S[\phi^{\text{cl}}, \phi^{\text{q}}] = & \int_{-\infty}^{+\infty} dt (\bar{\phi}^{\text{cl}}, \bar{\phi}^{\text{q}}) \begin{pmatrix} 0 & i\partial_t - \Delta - \frac{g}{2} |\phi^{\text{cl}}|^2 - i\kappa \\ i\partial_t - \Delta - \frac{g}{2} |\phi^{\text{cl}}|^2 + i\kappa & 2i\kappa_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi^{\text{cl}} \\ \phi^{\text{q}} \end{pmatrix} \\ & - \int_{-\infty}^{+\infty} dt \left[\frac{g}{2} (\bar{\phi}^{\text{q}} \bar{\phi}^{\text{q}} \phi^{\text{q}} \phi^{\text{cl}} + \bar{\phi}^{\text{cl}} \bar{\phi}^{\text{q}} \phi^{\text{q}} \phi^{\text{q}}) + \sqrt{2}i\eta (\bar{\phi}^{\text{q}} - \phi^{\text{q}}) \right] \end{aligned} \quad (5.8)$$

The driving term, $\sim \eta$, may be eliminated by a shift of the classical field variable, $\phi^{\text{cl}} \rightarrow \phi^{\text{cl}} - \phi_\eta$, by a complex constant ϕ_η , which is found as a solution of the nonlinear equation $(\Delta - i\kappa)\phi_\eta + \frac{g}{2} |\phi_\eta|^2 \phi_\eta = \sqrt{2}i\eta$. Due to nonlinearity such a shift generates Bogoliubov terms $\bar{\phi}^{\text{q}} \bar{\phi}^{\text{cl}}$ and $\phi^{\text{q}} \phi^{\text{cl}}$ as well as extra cubic nonlinear terms of the form $\bar{\phi}^{\text{q}} \phi^{\text{cl}} \phi^{\text{cl}}$ and $\bar{\phi}^{\text{q}} \phi^{\text{q}} \phi^{\text{q}}$.

The time-local driven-dissipative Keldysh action (5.8), in the rotating-wave approximation, is the central result of this section. It describes an inherently non-equilibrium setup and possesses the causality structure. To some extent it resembles the high temperature limit of the Caldeira-Leggett action (4.2), which leads to classical Langevin and Fokker-Planck equations, Sections 4.2 and 4.5. Nevertheless, there are important distinctions between the local actions (4.2) and (5.8). Most notably, while the classical action (4.2) is limited to terms linear and quadratic in the quantum field, the driven-dissipative action (5.8) contains higher order (cubic) terms in the quantum component. As a result, the latter contains the full quantum information, similar to Eq. (3.6), while the former is restricted to the classical limit, cf. Eqs. (3.7) and (3.8).

One may expect that a time-local action is equivalent to some evolution equation. In the case of the quantum mechanical action (3.6), this is the Von Neumann equation (1.1), $\partial_t \hat{\rho}(t) = -i[\hat{H}(t), \hat{\rho}(t)]$, for the density matrix operator, $\hat{\rho}$, governed by some hermitian Hamiltonian, $\hat{H}$. In the case of the classical action (4.2), this is the Fokker-Planck equation (4.23) for the classical probability distribution function. One may ask if there is an evolution equation, corresponding

to the local driven-dissipative action (5.8). Since the latter contains the quantum physics, the corresponding equation should be written in terms of a density matrix. However, unlike the Von Neumann equation, it can't describe a unitary evolution. Indeed, since the bath degrees of freedom were integrated out, the unitarity is expected to be lost. On the formal level this observation manifests itself in the fact that the driven-dissipative action (5.8) does not have the form of $S[\phi^+] - S[\phi^-]$ (while Eq. (3.6) does), because of κ and κ_1 terms. Nevertheless, the corresponding nonunitary evolution equation for the reduced density matrix indeed exists. It is known [93, 94, 95, 96] as the Lindblad equation.

11.5.2 5.2 Lindblad Equation

The full quantum system, which includes the nonlinear oscillator and the bath, is described by the density matrix, $\hat{\rho}$. The latter undergoes the unitary evolution according to the Von Neumann equation (1.1) with the Hamiltonian, $\hat{H}$, (5.2). We have already tacitly used this fact, when we wrote the coherent state representation for the corresponding evolution operator. Since one is not interested in the bath, one may define the reduced density matrix by tracing out degrees of freedom belonging to the bath (i.e. $\hat{a}_s$ oscillators):

$$\hat{\rho}_p = \text{Tr}_{\text{bath}} \{\hat{\rho}\}, \quad (5.9)$$

where $\text{Tr}_{\text{bath}} \{\dots\}$ stays for the trace over the bath coordinates, as opposed to the trace over all degrees of freedom, $\text{Tr}\{\dots\} = \text{Tr}_p \{\text{Tr}_{\text{bath}} \{\dots\}\}$. Since $\text{Tr}\{\hat{\rho}\} = 1$, one concludes that

$$\text{Tr}_p \{\hat{\rho}_p\} = 1 \quad (5.10)$$

One can also show that $\hat{\rho}_p$ is Hermitian and positive semi-definite (since $\hat{\rho}$ is). It therefore possesses all the properties of the density matrix of an isolated p-subsystem.

This does not mean, of course, that $\hat{\rho}_p$ evolves according to the Von Neumann equation. Moreover, since coupling to the bath may introduce long-time memory effects within the p-subsystem, $\hat{\rho}_p(t)$ may not satisfy any local in time evolution equation. Assuming that such memory effects are not present - the assumption known as the Markovian approximation - one may show [94, 95, 96] that the reduced density matrix evolves according to the Lindblad equation:

$$\partial_t \hat{\rho}_p(t) = -i [\hat{H}'_p, \hat{\rho}_p(t)] + \sum_a \gamma_a \left(\hat{L}_a \hat{\rho}_p(t) \hat{L}_a^\dagger - \frac{1}{2} \{ \hat{L}_a^\dagger \hat{L}_a, \hat{\rho}_p(t) \} \right), \quad (5.11)$$

where $\gamma_a \geq 0$ is a set of real nonnegative constants and $\{.,.\}$ is the *anti-commutator* of two operators. In general non-Hermitian operators $\hat{L}_a$ are called quantum jump operators. The Hamiltonian, $\hat{H}'_p$, is that of an isolated p-subsystem, possibly renormalized³ by the coupling to the bath - thus the prime mark.

The Lindblad equation is trace-preserving, making Eq. (5.10) valid at all times. It also preserves Hermiticity and positive semi-definiteness of the reduced density matrix. In fact, it may be shown [94, 96] that the Lindblad form is the most general Markovian equation, which possesses these properties. Its evolution operator realizes quantum dynamical semigroup. That is, the product of any two evolution operators is again an evolution operator, but inverse operators may not be defined. Notice that the inverse operators would represent backward in time evolution. The fact that they may not exist reflects irreversible dynamics of the subsystem and appearance of the time arrow.

In the next section we will show, following Refs. [97, 98], that the Markovian approximation is another name for a time-local form of the effective Keldysh action, obtained after integration over the bath degrees of freedom. In particular, the driven-dissipative action (5.8) provides

the evolution operator for the Lindblad equation with the Hamiltonian (5.3a) and two jump operators (hereafter we omit the tilde symbol for the rotating frame operators):

$$\hat{L}_1 = \hat{b}, \quad \gamma_1 = \kappa_1 + \kappa; \quad \hat{L}_2 = \hat{b}^\dagger, \quad \gamma_2 = \kappa_1 - \kappa \quad (5.12)$$

One may consider the right-hand side of the Lindblad equation (5.11) as a linear super-operator, $\hat{\mathcal{L}}$ - the Lindbladian, acting on a "vectorized" density matrix ρ . For an $\mathcal{N}$ -dimensional Hilbert space, the reduced density matrix is $\mathcal{N} \times \mathcal{N}$ and therefore its vectorized form is a vector with $\mathcal{N}^2$ components. Thus, the super-operator,

$\hat{\mathcal{L}}$, is $\mathcal{N}^2 \times \mathcal{N}^2$, in general non-Hermitian operator. In these notations the Lindblad equation (5.11) acquires the following form:

$$\partial_t \rho = \hat{\mathcal{L}}[\rho] \quad (5.13)$$

where from now on we omit subscript p , indicating reduced density matrix, for brevity. The spectrum of the super-operator consists of $\mathcal{N}^2$, in general complex, eigenvalues. In a particular case of a pure Hamiltonian evolution (i.e. all $\gamma_a = 0$) all eigenvalues are imaginary, given by $i(E_n - E_m)$, where E_n are real eigenvalues of the Hamiltonian and $n, m = 1, \dots, \mathcal{N}$. Therefore there are at least $\mathcal{N}$ zero eigenvalues with $n = m$, corresponding to pure eigenstates of the Hamiltonian, $\rho_n = |n\rangle\langle n|$. In the presence of a bath ($\gamma_a \neq 0$) some of the eigenvalues of $\hat{\mathcal{L}}$ acquire real parts. For systems that admit a long-time stationary state (or possibly states) such real parts ought to be nonpositive. At least one eigenvalue must remain zero. This can be seen from the presence of at least one conserved quantity - the trace of the reduced density matrix, Eq. (5.10).

In some cases (see Section 5.7 for an example) there is more than one zero eigenvalue of the Lindbladian. The corresponding eigenvectors form a subspace, which is stationary in the process of evolution. Such subspace is called dark space, or dissipation-free subspace. The simplest realization is the case of a pure dissipative evolution, namely $\hat{H}'_p = 0$, and all quantum jump operators annihilating a set of states $\hat{L}_a|\mu\rangle = 0 = \langle\mu|\hat{L}_a^\dagger$, for all a , and $\mu, v = 1, \dots, \mathcal{M}$. Then there is $\mathcal{M}^2$ -dimensional dark space, spanned by the zero eigenstates of the form $|\mu\rangle\langle\nu|$.

11.5.3 5.3 From Keldysh to Lindblad

Following references [97, 98] we now develop coherent state representation for the Lindbladian evolution. The formal solution of equation (5.13) may be written as the time-ordered-exponent of the super-operator (cf. Eq. (1.2)),

$$\rho(t) = \mathbb{T} e^{\int_{t'}^t dt \hat{\mathcal{L}}(t)} \rho(t') \quad (5.14)$$

Here we allowed for an explicit time dependence of the Lindbladian super-operator, either through time-dependent Hamiltonian, or quantum jump operators, or both. Notice that, since this is the super-operator, which incorporates acting on the density matrix from the left and from the right, one does not need a closed time contour. Therefore the time here runs along the usual real axis - the field doubling and the corresponding two branches appearing automatically. One now discretizes the time axis onto N infinitesimal steps, labelled by $j = 1, \dots, N$, and writes one infinitesimal evolution step from t_j to t_{j+1} as

$$\rho_{j+1} = e^{\delta t \hat{\mathcal{L}}_j} \rho_j \approx \left(1 + \delta t \hat{\mathcal{L}}_j\right) \rho_j \quad (5.15)$$

⁰³ Such renormalization is provided by $\text{Re} \Sigma^R = \text{Re} \Sigma^A$ in the previous section. It is absorbed into a redefinition of the detuning frequency, Δ , in the Hamiltonian (5.3a). A celebrated example is the Lamb shift of S and P atomic hydrogen levels due to their interactions with the quantized electromagnetic field.

where $\delta_t = \int_{t_j}^{t_{j+1}} dt$ is a duration of one time step (cf. Eq. (2.17)).

We restrict ourselves to the case of one bosonic degree of freedom, that is, assume that all operators $\hat{H}_p$ and $\hat{L}_a$ are expressed in terms of (normally ordered) operators $\hat{b}$ and $\hat{b}^\dagger$. To proceed one needs to introduce two sets [98] of coherent state over-complete basis, $|\phi_j^+\rangle$ and $|\phi_j^-\rangle$, such that $\hat{b}|\phi_j^\pm\rangle = \phi_j^\pm|\phi_j^\pm\rangle$, at each time discretization point. With their help and employing the resolution of unity (2.15) one represents the instantaneous density matrix operator as

$$\hat{\rho}_j = \iint d[\bar{\phi}_j^+, \phi_j^+] d[\bar{\phi}_j^-, \phi_j^-] e^{-|\phi_j^+|^2 - |\phi_j^-|^2} |\phi_j^+\rangle \langle \phi_j^+| \hat{\rho}_j |\phi_j^-\rangle \langle \phi_j^-| \quad (5.16)$$

One can now use the explicit form of the Lindbladian (5.11) to write the action of the super-operator $\hat{\mathcal{L}}_j$ on the vectorized form of each operator component

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{L}}_j [|\phi_j^+\rangle \langle \phi_j^-|] &= -i\hat{H}'_{p,j} |\phi_j^+\rangle \langle \phi_j^-| + i|\phi_j^+\rangle \langle \phi_j^-| \hat{H}'_{p,j} \\ &+ \sum_a \gamma_a \left[\hat{L}_{a,j} |\phi_j^+\rangle \langle \phi_j^-| \hat{L}_{a,j}^\dagger - \frac{1}{2} \hat{L}_{a,j}^\dagger \hat{L}_{a,j} |\phi_j^+\rangle \langle \phi_j^-| \right. \\ &\left. - \frac{1}{2} |\phi_j^+\rangle \langle \phi_j^-| \hat{L}_{a,j}^\dagger \hat{L}_{a,j} \right] \end{aligned} \quad (5.17)$$

We are now in a position to write down matrix elements of the density matrix in the subsequent instant of time, $\langle \phi_{j+1}^+ | \hat{\rho}_{j+1} | \phi_{j+1}^- \rangle$. They include

$$\begin{aligned} \langle \phi_{j+1}^+ | \hat{\mathcal{L}}_j [|\phi_j^+\rangle \langle \phi_j^-|] | \phi_{j+1}^- \rangle &= -i \langle \phi_{j+1}^+ | \hat{H}'_p | \phi_j^+ \rangle \langle \phi_j^- | \phi_{j+1}^- \rangle + i \langle \phi_{j+1}^+ | \phi_j^+ \rangle \langle \phi_j^- | \hat{H}'_p | \phi_{j+1}^- \rangle \\ &+ \sum_a \gamma_a \left[\langle \phi_{j+1}^+ | \hat{L}_a | \phi_j^+ \rangle \langle \phi_j^- | \hat{L}_a^\dagger | \phi_{j+1}^- \rangle \right. \\ &- \frac{1}{2} \langle \phi_{j+1}^+ | \hat{L}_a^\dagger \hat{L}_a | \phi_j^+ \rangle \langle \phi_j^- | \phi_{j+1}^- \rangle \\ &\left. - \frac{1}{2} \langle \phi_{j+1}^+ | \phi_j^+ \rangle \langle \phi_j^- | \hat{L}_a^\dagger \hat{L}_a | \phi_{j+1}^- \rangle \right] \end{aligned} \quad (5.18)$$

where possible time dependence of the operators is suppressed for brevity. To make progress one needs to assume that all operators, $\hat{H}'_p$ as well as $\hat{L}_a$ and $\hat{L}_a^\dagger$, are normally ordered. For the reasons articulated in what follows, we shall not be concerned about any subtleties that may arise upon normal ordering. With this understanding all matrix elements in the last lengthy expression may be immediately evaluated by simple substitution of operators by complex variables: $\hat{b} \rightarrow \phi^\pm$ and $\hat{b}^\dagger \rightarrow \bar{\phi}^\pm$. Notice also that in the case of (+)-fields the time ordering is $\bar{\phi}_{j+1}^+ \phi_j^+$, while in the case of (-)-fields it is opposite: $\bar{\phi}_j^- \phi_{j+1}^-$. This is precisely what happens along the closed time contour, where the (+)-fields are understood as being on the forward branch, while the (-)-fields are on the backward one. As a result one finds

$$\langle \phi_{j+1}^+ | \hat{\mathcal{L}}_j [|\phi_j^+\rangle \langle \phi_j^-|] | \phi_{j+1}^- \rangle = \langle \phi_{j+1}^+ | \phi_j^+ \rangle \langle \phi_j^- | \phi_{j+1}^- \rangle \mathcal{L}_j(\bar{\phi}_{j+1}^+, \bar{\phi}_j^-, \phi_j^+, \phi_{j+1}^-), \quad (5.19)$$

where the function $\mathcal{L}(\dots)$ is given by

$$\mathcal{L}(\bar{\phi}^+, \bar{\phi}^-, \phi^+, \phi^-) = -i(H_p'^+ - H_p'^-) + \sum_a \gamma_a \left(L_a^+ \bar{L}_a^- - \frac{1}{2} \bar{L}_a^+ L_a^+ - \frac{1}{2} \bar{L}_a^- L_a^- \right). \quad (5.20)$$

Here all the functions are obtained by the aforementioned substitution: for example, $H_p'^\pm = \hat{H}'_p(\bar{\phi}^\pm, \phi^\pm)$, $\bar{L}_a^\pm = \hat{L}_a^\dagger(\bar{\phi}^\pm, \phi^\pm)$, and so on.

We now approximate $(1 + \delta_t \mathcal{L}) \approx e^{\delta_t \mathcal{L}}$ - valid to the first order in δ_t , and use coherent states overlaps, Eq. (2.6), to write for the matrix element of the reduced density matrix

$$\langle \phi_{j+1}^+ | \hat{\rho}_{j+1} | \phi_{j+1}^- \rangle = \iint d[\bar{\phi}_j^+, \phi_j^+, \bar{\phi}_j^-, \phi_j^-] e^{\delta_t [\partial_t \bar{\phi}_j^+ \phi_j^+ + \bar{\phi}_j^- \partial_t \phi_j^- + \mathcal{L}_j(\dots)]} \langle \phi_j^+ | \hat{\rho}_j | \phi_j^- \rangle, \quad (5.21)$$

where we use the notation $\partial_t \phi_j^\pm = (\phi_{j+1}^\pm - \phi_j^\pm) / \delta_t$. One can now iterate this expression all the way from an initial time, t' , to a final time, t , to obtain the evolution super-operator, Eq. (5.14), in the form of the functional integral. To streamline the notations we take trace of the reduced density matrix at the final time to obtain the "partition function," $Z = \text{Tr} \hat{\rho}(t) = 1$. This entails integrating over $\phi_N^\pm$ with the Gaussian weight, Eq. (2.10). We also introduce obvious continuum notations for the discrete sum, accumulated in the exponent upon iteration of the time steps. This way, one finds (cf. Eqs. (2.26) and (2.30)),

$$Z = \int \mathbf{D}[\bar{\phi}(t), \phi(t)] e^{iS[\bar{\phi}, \phi]} \quad (5.22)$$

where

$$S[\bar{\phi}, \phi] = \int dt [\bar{\phi}^+ i_t \phi^+ - \bar{\phi}^- i_t \phi^- - H_p^+ + H_p^- - i \sum_a \gamma_a \left(L_a^+ \bar{L}_a^- - \frac{1}{2} \bar{L}_a^+ L_a^+ - \frac{1}{2} \bar{L}_a^- L_a^- \right)]. \quad (5.23)$$

One recognizes the structure similar to the Keldysh path integral of Chapter 2. In fact, without dissipative terms, $\gamma_a = 0$, this is exactly the same object, with the structure $S = S[\phi^+] - S[\phi^-]$, derived in a slightly different way. The dissipative terms violate this structure. Most notably, the $\hat{L}_a \hat{\rho} \hat{L}_a^\dagger$ term in the Lindblad equation (5.11) results in the $L_a^+ \bar{L}_a^-$ part of the action, which mixes variables on the two branches of the contours. This is not unexpected - integration of the bath degrees of freedom, illustrated in Section 5.1, indeed generates such terms. Therefore, the structure of the action (5.23) is not inconsistent with that of an effective Keldysh action, where some degrees of freedom were integrated out.

Indeed, one notices a characteristic feature of the causality structure, Section 2.7, namely the action (5.23) is nullified if $\phi^+(t) = \phi^-(t)$. This property may be traced back to the trace-preserving nature of the Lindblad equation. This motivates to introduce classical and quantum fields in the usual way, Eq. (2.39):

$$\phi^{\text{cl}}(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi^+(t) + \phi^-(t)), \quad \phi^{\text{q}}(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi^+(t) - \phi^-(t)), \quad (5.24)$$

and to notice that $S[\phi^{\text{cl}}, \phi^{\text{q}} = 0] = 0$ (cf. Eq. (2.53)). To verify the full causality structure of the action (5.23) one needs to prove retarded/advanced character of the quantum-classical correlations. This can be done by carefully following the time discretization and operator normal ordering [97]. We will not follow this route here. Instead, we take a point of view that the Keldysh action, derived along the lines of Section 5.1, is the primary object, while the Lindblad equation is the secondary. In this approach the Keldysh action, for example, (5.8), is guaranteed to possess the causality structure. The role of Eq. (5.23), derived here, is to help identifying quantum jump operators, $\hat{L}_a$, in a Lindblad equation, corresponding to an approximately time-local effective Keldysh action, such as (5.8).

Following this line of reasoning, let us examine the action (5.23) with the simplest jump operators $\hat{L}_1 = \hat{b}$ and $\hat{L}_2 = \hat{b}^\dagger$. Upon substitution $\hat{b} \rightarrow \phi^\pm$ and $\hat{b}^\dagger \rightarrow \bar{\phi}^\pm$, the dissipative parts of the action (5.23) acquire the following form:

$$-i\gamma_1 \left(\phi^+ \bar{\phi}^- - \frac{1}{2} \bar{\phi}^+ \phi^+ - \frac{1}{2} \bar{\phi}^- \phi^- \right) = \frac{1}{2} (\bar{\phi}^{\text{cl}}, \bar{\phi}^{\text{q}}) \begin{pmatrix} 0 & -i\gamma_1 \\ i\gamma_1 & 2i\gamma_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi^{\text{cl}} \\ \phi^{\text{q}} \end{pmatrix} \quad (5.25a)$$

$$-i\gamma_2 \left(\bar{\phi}^+ \phi^- - \frac{1}{2} \bar{\phi}^+ \phi^+ - \frac{1}{2} \bar{\phi}^- \phi^- \right) = \frac{1}{2} (\bar{\phi}^{\text{cl}}, \bar{\phi}^{\text{q}}) \begin{pmatrix} 0 & i\gamma_2 \\ -i\gamma_2 & 2i\gamma_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi^{\text{cl}} \\ \phi^{\text{q}} \end{pmatrix} \quad (5.25b)$$

Comparing this to Eq. (5.8), one finds $\kappa = (\gamma_1 - \gamma_2)/2$ and $\kappa_1 = (\gamma_1 + \gamma_2)/2$. This establishes equivalence between the time-local action (5.8) and the Lindblad equation (5.11) with the quantum jump operators (5.12).

One can immediately generalize this construction by taking a more general form of the interactions between the oscillator and the bath. To this end we modify Eq. (5.2b) as

$$\hat{H}_{\text{int}} = \sum_s \frac{g_s}{\sqrt{2\omega_s}} (\hat{a}_s^\dagger \hat{L} + \hat{L}^\dagger \hat{a}_s) \quad (5.26)$$

where $\hat{L} = \hat{b}^n$. Integrating over the bath variables and comparing the resulting action with Eq. (5.23), one again arrives at the Lindblad equation with the two competing jump operators: "down" jumps with $\hat{L}_1 = \hat{L}$ and "up" jumps with $\hat{L}_2 = \hat{L}^\dagger$. According to Eq. (5.7) the ratio of the corresponding "down" to "up" rates is

$$\frac{\gamma_1}{\gamma_2} = \frac{n_B + 1}{n_B}; \quad n_B = \frac{1}{e^{n\omega_0/T} - 1}, \quad (5.27)$$

independent of the details of the coupling mechanism and the bath. This statement may be dubbed as rotating-wave *FDT*. Notice that n_B here is the equilibrium occupation number of the bath oscillators at integer multiples of the oscillator frequency. The rotating-wave FDT relies thus on the bath being in equilibrium at a temperature T . For $T \ll n\omega_0$ only "down" jumps remain.

11.5.4 5.4 Linear Systems

Here we focus on driven-dissipative harmonic systems. To this end we disregard nonlinearity by putting $g = 0$ in Eqs. (5.2) and (5.8). We then perform a constant shift of the classical field variables by a complex constant $\phi_\eta = \sqrt{2i\eta}/(\Delta - i\kappa)$, as $\phi^{\text{cl}} \rightarrow \phi^{\text{cl}} - \phi_\eta$ and $\bar{\phi}^{\text{cl}} \rightarrow \bar{\phi}^{\text{cl}} - \bar{\phi}_\eta$ to eliminate the drive, $\sim \eta$, term from the action (5.8). The physical meaning of this shift is that the original driven oscillator follows the driving force by rotating in the phase space with the frequency ω_p , the amplitude $|\phi_\eta|$, and the phase shift $\arg(\phi_\eta)$. This is exactly what one expects from a steady-state classical damped harmonic oscillator, driven by a periodic external force. The residual Gaussian action (cf. Eq. (5.8)),

$$S[\phi^{\text{cl}}, \phi^{\text{q}}] = \int_{-\infty}^{+\infty} dt (\bar{\phi}^{\text{cl}}, \bar{\phi}^{\text{q}}) \begin{pmatrix} 0 & i\partial_t - \Delta - i\kappa \\ i\partial_t - \Delta + i\kappa & 2i\kappa(2n_B + 1) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi^{\text{cl}} \\ \phi^{\text{q}} \end{pmatrix} \quad (5.28)$$

describes quantum and thermal fluctuations on top of the aforementioned classical rotation in the phase space. Here $\Delta = \omega_0 - \omega_p + \text{Re}[\Sigma(\omega_0)]^{\text{R}}$ is a detuning frequency, renormalized by a coupling to the bath.

According to the previous section this action is equivalent to the following Lindblad equation:

$$\partial_t \hat{\rho} = -i [\hat{H}'_p, \hat{\rho}] + 2\kappa(n_B + 1) \left(\hat{b} \hat{\rho} \hat{b}^\dagger - \frac{1}{2} \{ \hat{b}^\dagger \hat{b}, \hat{\rho} \} \right) + 2\kappa n_B \left(\hat{b}^\dagger \hat{\rho} \hat{b} - \frac{1}{2} \{ \hat{b} \hat{b}^\dagger, \hat{\rho} \} \right), \quad (5.29)$$

where $\hat{H}'_p = \Delta \hat{b}^\dagger \hat{b}$. Here $n_B = n_B(\omega_0)$ is the occupation number at the resonance frequency. Notice that one could equally well use the harmonic Hamiltonian with the driving force $H'_p = \Delta \hat{b}^\dagger \hat{b} + i\eta(\hat{b}^\dagger - \hat{b})$ and perform operator canonical transformation $\hat{b} \rightarrow \hat{b} + \phi_\eta/\sqrt{2}$ and $\hat{b}^\dagger \rightarrow \hat{b}^\dagger + \bar{\phi}_\eta/\sqrt{2}$ in the corresponding Lindblad equation to arrive at Eq. (5.29).

One way to solve Eq. (5.29) is to employ the Glauber-Sudarshan coherent state representation [99] of the density matrix,

$$\hat{\rho}(t) = \int d[\bar{\phi}, \phi] e^{-|\phi|^2} \mathcal{P}_{\text{GS}}(\bar{\phi}, \phi, t) |\phi\rangle\langle\phi|. \quad (5.30)$$

In the present example $\mathcal{P}_{\text{GS}}(\bar{\phi}, \phi, t)$ happens to be positive everywhere and thus may be associated with the probability distribution. We now recall properties of the coherent states

$$\hat{b}|\phi\rangle = \phi|\phi\rangle; \quad \hat{b}^\dagger|\phi\rangle = \partial_\phi|\phi\rangle; \quad \langle\phi|\hat{b}^\dagger = \bar{\phi}\langle\phi|; \quad \langle\phi|\hat{b} = \partial_{\bar{\phi}}\langle\phi|, \quad (5.31)$$

which follow from the fact that $|\phi\rangle = e^{\phi\hat{b}^\dagger}|0\rangle$ and $\langle\phi| = \langle 0|e^{\bar{\phi}\hat{b}}$. Substituting Eq. (5.30) into Eq. (5.29) and performing integrations by parts one finds

$$\partial_t \mathcal{P}_{\text{GS}} = [(\kappa + i\Delta)\partial_\phi\phi + (\kappa - i\Delta)\partial_{\bar{\phi}}\bar{\phi}] \mathcal{P}_{\text{GS}} + 2\kappa n_B \partial_{\bar{\phi}}^2 \mathcal{P}_{\text{GS}} \quad (5.32)$$

This may be viewed as a Fokker-Planck equation for the probability distribution in the phase space. Notice that the dissipative terms, $\propto \kappa$, are of potential nature $\kappa [\partial_\phi V_{\bar{\phi}} + \partial_{\bar{\phi}} V_\phi] \mathcal{P}$, where the potential is $V(\phi, \bar{\phi}) = \bar{\phi}\phi$. On the other hand, the dynamical terms, $\sim i\Delta$, generates rotation in the phase space. Anticipating that the stationary distribution depends only on the radius (i.e. action) in the phase space, but not on the angle, one finds Boltzmann-like distribution with n_B playing the role of temperature

$$\mathcal{P}_{\text{GS}}(\bar{\phi}, \phi) = \frac{1}{n_B} \exp \left\{ -\frac{|\phi|^2}{n_B} \right\} \quad (5.33)$$

where we have enforced normalization $\text{Tr} \hat{\rho} = \int d[\bar{\phi}, \phi] \mathcal{P}_{\text{GS}}(\bar{\phi}, \phi) = 1$. One thus finds for the stationary density matrix in the coherent state basis

$$\hat{\rho} = \frac{1}{n_B} \int d[\bar{\phi}, \phi] \exp \left\{ -e^{\omega_0/T} |\phi|^2 \right\} |\phi\rangle\langle\phi|. \quad (5.34)$$

This expression can be translated into the number state basis with the help of the identity $|\phi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \phi^n |n\rangle / \sqrt{n!}$, Eq. (2.5). Performing straightforward integration over $d[\bar{\phi}, \phi]$ using Eq. (2.9), one finds (see problem 5.11.1 for an alternative derivation of this result)

$$\hat{\rho} = \sum_{n=0}^{\infty} \mathcal{P}_n |n\rangle\langle n|; \quad \mathcal{P}_n = \frac{e^{-n\omega_0/T}}{n_B + 1} \quad (5.35)$$

This is the equilibrium thermal density matrix for the oscillator, describing fluctuations around the driven classical path in the phase space. The linear drive of a harmonic oscillator does not result in a non-equilibrium distribution. In the next section we will see that this is not the case for a parametric drive. One can employ Eq. (5.35) to evaluate moments of the occupation number $\hat{n} = \hat{b}^\dagger \hat{b}$, for example, $\langle \hat{n} \rangle = \text{Tr} \{ \hat{\rho} \hat{n} \} = n_B$, while the higher moments are given by Eq. (2.64).

In the unshifted frame the Glauber-Sudarshan stationary function takes the form $\mathcal{P}_{\text{GS}} \propto \exp \{ |\phi - \phi_\eta|^2 / n_B \}$. For a zero temperature bath it reduces to the twodimensional delta-function, $\mathcal{P}_{\text{GS}} = \delta(\phi - \phi_\eta) \delta(\bar{\phi} - \bar{\phi}_\eta)$. As a result, the stationary density matrix acquires a pure coherent state form:

$$\hat{\rho} = e^{-|\phi_\eta|^2} |\phi_\eta\rangle \langle \phi_\eta|. \quad (5.36)$$

An alternative approach to deal with the local quadratic action (5.28) is to perform the Hubbard-Stratonovich transformation ⁴ of the $e^{-2\kappa(2n_B+1) \int dt |\phi^q|^2}$ term with a complex field $\xi(t)$. Subsequent integration over ϕ^q leads to the Langevin equations for the classical field components:

$$\partial_t \phi^{\text{cl}} = -(\kappa + i\Delta) \phi^{\text{cl}} - i\xi(t); \quad \partial_t \bar{\phi}^{\text{cl}} = -(\kappa - i\Delta) \bar{\phi}^{\text{cl}} + i\bar{\xi}(t) \quad (5.37)$$

The noise correlator is given by

$$\langle \xi(t) \bar{\xi}(t') \rangle = 2\kappa(2n_B + 1) \delta(t - t') \quad (5.38)$$

The corresponding Fokker-Planck equation, Section 4.5, for the probability distribution function, $\mathcal{P}(\bar{\phi}^{\text{cl}}, \phi^{\text{cl}}, t)$, takes the form: ⁵

$$\partial_t \mathcal{P} = [(\kappa + i\Delta) \partial_{\phi^{\text{cl}}} \phi^{\text{cl}} + (\kappa - i\Delta) \partial_{\bar{\phi}^{\text{cl}}} \bar{\phi}^{\text{cl}}] \mathcal{P} + 2\kappa(2n_B + 1) \partial_{\bar{\phi}^{\text{cl}} \phi^{\text{cl}}}^2 \mathcal{P} \quad (5.39)$$

Its normalized stationary solution is

$$\mathcal{P}(\bar{\phi}^{\text{cl}}, \phi^{\text{cl}}) = \frac{1}{2n_B + 1} \exp \left\{ -\frac{|\phi^{\text{cl}}|^2}{2n_B + 1} \right\}, \quad (5.40)$$

which implies, for example, $\langle \phi^{\text{cl}}(t) \bar{\phi}^{\text{cl}}(t) \rangle = 2n_B + 1$.

Comparing the Fokker-Planck equation (5.39) and its stationary solution (5.40) to the Glauber-Sudarshan, (5.32), (5.33), one observes that they coincide exactly ⁶ in the high-temperature limit, where $n_B \gg 1$. Yet they are extremely different in the opposite limit, $T \ll \omega_0$, where n_B is exponentially small. Does it mean that at least one of these approaches is wrong at low temperatures? Fortunately both are right. They simply address statistics of different observables. The Glauber-Sudarshan stationary solutions (5.33), (5.35) of the Lindblad equation provide statistics of the number operator $\hat{n} = \hat{b}^\dagger \hat{b}$, while the Langevin-Fokker-Planck approach deals with a different operator, $\hat{F} = \hat{b}^\dagger \hat{b} + \hat{b} \hat{b}^\dagger$. This situation is discussed in detail in

⁴ To this end one writes Gaussian integral

$$e^{-2\kappa(2n_B+1) \int dt |\phi^q|^2} = \int \mathbf{D}[\bar{\xi}(t), \xi(t)] e^{-\int dt [|\xi|^2/2\kappa(2n_B+1) + i\bar{\xi}\phi^q + i\bar{\phi}^q \xi]}$$

The action becomes linear in $\phi^q, \bar{\phi}^q$ and the corresponding integrations enforce delta-functions of classical equations for $\bar{\phi}^{\text{cl}}, \phi^{\text{cl}}$.

⁵ A quick and instructive way to write it down is to follow the recipe formulated earlier in Eq. (4.23). To this end one introduces notations $p_\phi = \bar{\phi}^q$ and $p_{\bar{\phi}} = -\phi^q$ and rewrites the action (5.28) in the Hamiltonian way: $S = i \int dt [p_\phi \partial_t \phi^{\text{cl}} + p_{\bar{\phi}} \partial_t \bar{\phi}^{\text{cl}} - H(p_\phi, p_{\bar{\phi}}, \phi^{\text{cl}}, \bar{\phi}^{\text{cl}})]$. One can then "quantize" this action by first ordering the Hamiltonian, i.e. moving quantum components to the left of classical (if there are multiple quantum components, they ought to be symmetrized) and turning momenta into operators as $p_\phi \rightarrow \hat{p}_\phi = -\partial_{\phi^{\text{cl}}}$ and $p_{\bar{\phi}} \rightarrow \hat{p}_{\bar{\phi}} = -\partial_{\bar{\phi}^{\text{cl}}}$. The Fokker-Planck equation is the corresponding imaginary time "Schrödinger" equation: $\partial_t \mathcal{P} = \hat{H}(\hat{p}_\phi, \hat{p}_{\bar{\phi}}, \phi^{\text{cl}}, \bar{\phi}^{\text{cl}}) \mathcal{P}$.

⁶ The factor of two differences in front of the second derivative term may be absorbed by a trivial rescaling of the ϕ^{cl} field, which amounts to adopting the definition $\phi^{\text{cl}} = (\phi^+ + \phi^-)/2$, instead of Eq. (5.24).

Section 2.9, where it is shown that the two correspond to discrete and continuous regularizations of the generating function. They generate distinct, but equivalent sets of statistical moments ⁷ (cf. Eqs. (2.64) and (2.70)).

The stationary solutions (5.33) or (5.40) are unique. They are given by a mixed thermal state (unless $T = 0$, i.e. $n_B = 0$ and thus $\gamma_2 = 0$, leading to a pure stationary state (5.36)). To access truly non-equilibrium dynamics one needs to follow the time-dependent evolution of either Eq. (5.32), or (5.39). Alternatively (and frequently more informative) one may look for multiple-time correlation functions in the stationary state. To execute this program in the Lindblad formalism, one has to go from the Schrödinger picture, Eq. (5.29), to the Heisenberg one, which provides for the Lindbladian evolution of operators. This is achieved through the adjoint Lindbladian super-operator, $\mathcal{L}^\dagger$, and the corresponding adjoint evolution super-operator [96]. Due to the irreversibility of the Lindbladian evolution, this procedure is less straightforward than the more familiar one, leading from the Von Neumann equation to the Heisenberg operator evolution. We will not take this route here.

Instead, we notice that in the equivalent formulation in terms of the Keldysh action, the multi-time correlation functions are readily available. In particular, for the harmonic system, described by the action (5.28), the steady-state two-point correlation functions are given by

$$\langle \phi^{\text{cl}}(t) \bar{\phi}^{\text{q}}(t') \rangle = \theta(t - t') \left\langle \left[\hat{b}(t), \hat{b}^\dagger(t') \right] \right\rangle = i\tilde{G}^{\text{R}}(t, t') = \theta(t - t') e^{(-\kappa - i\Delta)(t - t')} \quad (5.41a)$$

$$\langle \phi^{\text{q}}(t) \bar{\phi}^{\text{cl}}(t') \rangle = -\theta(t' - t) \left\langle \left[\hat{b}(t), \hat{b}^\dagger(t') \right] \right\rangle = i\tilde{G}^{\text{A}}(t, t') = -\theta(t' - t) e^{(\kappa - i\Delta)(t - t')} \quad (5.41b)$$

$$\langle \phi^{\text{cl}}(t) \bar{\phi}^{\text{cl}}(t') \rangle = \left\langle \hat{b}(t), \hat{b}^\dagger(t') \right\rangle = i\tilde{G}^{\text{K}}(t, t') = F e^{-i\Delta(t - t') - \kappa|t - t'|} \quad (5.41c)$$

where $F = (2n_B + 1) = \coth \omega_0/2T$ and, as always, $\langle \phi^{\text{q}}(t) \bar{\phi}^{\text{q}}(t') \rangle = 0$. The timedependent operators, $\hat{b}(t)$, $\hat{b}^\dagger(t)$, here are defined in the standard Heisenberg picture, which assumes unitary evolution with the full Hamiltonian, namely the one that explicitly includes the bath degrees of freedom. The averaging, $\langle \dots \rangle$, is over the stationary density matrix (5.35).

The tilde on top of the Green functions is a reminder that those are correlation functions of the rotating wave operators. The original Heisenberg operators $\hat{b}(t)$ and $\hat{b}^\dagger(t)$ take the following form:

$$\hat{b}(t) = e^{-i\omega_p t} \phi_0 / \sqrt{2} + \delta \hat{b}(t); \quad \hat{b}^\dagger(t) = e^{i\omega_p t} \bar{\phi}_0 / \sqrt{2} + \delta \hat{b}^\dagger(t) \quad (5.42)$$

where the Green functions of $\delta \hat{b}$ operators in the stationary state are

$$i\tilde{G}^{\text{R}}(t - t') = \theta(t - t') \left\langle \left[\delta \hat{b}(t), \delta \hat{b}^\dagger(t') \right] \right\rangle = \theta(t - t') e^{(-\kappa - i\omega_0)(t - t')} \quad (5.43a)$$

$$i\tilde{G}^{\text{K}}(t - t') = \left\langle \left\{ \delta \hat{b}(t), \delta \hat{b}^\dagger(t') \right\} \right\rangle = F e^{-i\omega_0(t - t') - \kappa|t - t'|} \quad (5.43b)$$

Their Fourier transforms are

⁰⁷ In fact (5.33) and (5.40) representations of the thermal state are two points in the continuous family of the quasi-probability distributions,

$$W(\bar{\phi}, \phi, p) = \int d[\bar{\xi}, \xi] \text{Tr} \left\{ \hat{\rho} e^{(\hat{b}^\dagger - \bar{\phi})\xi - \bar{\xi}(\hat{b} - \phi)} \right\} e^{p|\xi|^2/2}$$

labeled by $p \leq 1$, [99]. Glauber-Sudarshan (5.33) corresponds to $p = 1$, known to be a generator of moments of normally ordered operators. The Fokker-Planck (5.40) $-p = 0$, which generates moments of the symmetrized products. The anti-normal ordered moments are generated by $p = -1$ Husimi function; see problem 5.11.2. Generic quasi-probability representation of the thermal state is a Gaussian with the dispersion $2n_B + 1 - p$. I am indebted to Foster Thompson and Sebastian Diehl for discussing this point.

$$G^{R(A)}(\epsilon) = \frac{1}{\epsilon - \omega_0 \pm i\kappa}, \quad G^K(\epsilon) = F(G^R - G^A) = \frac{-2i\kappa F}{(\epsilon - \omega_0)^2 + \kappa^2}. \quad (5.44)$$

The multi-point functions are given by a suitable application of the Wick theorem. Unlike their unitary counterparts, Eq. (2.47), the correlation functions decay exponentially in time with the inverse decay time κ . This behavior reflects the real parts of the complex eigenvalues of the Lindbladian super-operator.

One may also discuss the evolution of the distribution function $F(\epsilon, t)$ (which is the Wigner transform of the two-time-point function $F(t, t')$, defined through $G^K = G^R \circ F - F \circ G^A$) of a driven dissipative oscillator, which is away from its steady state. To this end we write the kinetic equation in the form of Eqs. (6.45), (6.47):

$$\partial_t F(t) = i\Sigma^K + F(t) (\text{Im } \Sigma^R - \text{Im } \Sigma^A) = 2\kappa (2n_B + 1 - F(t)), \quad (5.45)$$

where we used the rotating-wave approximation, Eq. (5.6), for the components of the bath-induced self-energy, $\Sigma^K = -2i\kappa (2n_B + 1)$ and $\text{Im } \Sigma^{R(A)} = \mp\kappa$. According to the kinetic equation (5.45), any initial distribution function, $F(\epsilon, t')$, exponentially approaches the steady-state value $2n_B + 1$ with the rate 2κ . Notice that this rate is twice larger than the rate of correlations decay in the steady state, Eqs. (5.41). An alternative way to derive kinetic equation (5.45) is discussed in problem 5.11.3.

11.5.5 5.5 Quantum Heating

The previous section dealt with a stable linear system. It exhibits a unique stationary state, localized in the phase space. Any initial state exponentially approaches this stationary state. This is not the only scenario, however. Linear systems may be driven out of stability toward an exponentially runaway behavior. Eventually the instability is curtailed by nonlinearities, which will be considered in the subsequent sections. Here we demonstrate that, upon approaching such classical instability, there are strong quantum fluctuations, known as quantum heating.

To be specific we consider a parametrically driven harmonic oscillator with a modulated resonance frequency. The corresponding classical Hamiltonian is $H = P^2/2 + (\omega_0^2 + 8\lambda\omega_0 \cos 2\omega_p t) X^2/2$. In the secondary quantized representation it takes the form (up to inessential terms)

$$\hat{H}_{2p} = \omega_0 \hat{b}^\dagger \hat{b} + 2\lambda (\hat{b}^\dagger \hat{b}^\dagger + \hat{b} \hat{b}) \cos 2\omega_p t \quad (5.46)$$

We will refer to it as the two-photon drive, as opposed to the one-photon drive of Eq. (5.2a). This Hamiltonian is supplemented with the coupling to the bath, exactly as in Eq. (5.2b).

Closely following Section 5.1, we now (i) adopt rotating-wave approximation; (ii) pass to the coherent state representation, and (iii) integrate out the bath degrees of freedom. This leads to the time-local action (5.28), supplemented with the quadratic drive term

$$S = \int dt (\bar{\phi}^{\text{cl}}, \bar{\phi}^{\text{q}}) \begin{pmatrix} 0 & i\partial_t - \Delta - i\kappa \\ i\partial_t - \Delta + i\kappa & 2i\kappa (2n_B + 1) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi^{\text{cl}} \\ \phi^{\text{q}} \end{pmatrix} - 2\lambda (\bar{\phi}^{\text{q}} \bar{\phi}^{\text{cl}} + \phi^{\text{q}} \phi^{\text{cl}}). \quad (5.47)$$

The corresponding Lindblad equation is of the form of Eq. (5.29) with the quadratic rotating-wave two-photon Hamiltonian:

$$\hat{H}'_{2p} = \Delta \hat{b}^\dagger \hat{b} + \lambda (\hat{b}^\dagger \hat{b}^\dagger + \hat{b} \hat{b}) \quad (5.48)$$

with $\Delta = \omega_0 - \omega_p$.

What is the physics behind the local in time dissipative action (5.47), or equivalently the corresponding Lindblad equation? The Hamiltonian (5.48) may be diagonalized by the canonical Bogoliubov transformation (problem 2.10.2),

$$\hat{b} = \cosh \alpha \hat{\mathbf{b}} + \sinh \alpha \hat{\mathbf{b}}^\dagger; \quad \hat{b}^\dagger = \cosh \alpha \hat{\mathbf{b}}^\dagger + \sinh \alpha \hat{\mathbf{b}} \quad (5.49)$$

where $[\hat{\mathbf{b}}, \hat{\mathbf{b}}^\dagger] = 1$ and $\tanh 2\alpha = -2\lambda/\Delta$. It brings the Hamiltonian to the form (up to a constant)

$$\hat{H}'_{2p} = \Omega \hat{\mathbf{b}}^\dagger \hat{\mathbf{b}}; \quad \Omega^2 = \Delta^2 - 4\lambda^2 \quad (5.50)$$

Its ground state, $|0\rangle$, is found from the condition $\hat{\mathbf{b}}|0\rangle = 0$ and is given by the coherent state of pairs $|0\rangle \propto \exp\left\{-\tanh \alpha \hat{b}^\dagger \hat{b}^\dagger/2\right\} |0\rangle$. Notice that it is a superposition of only even-particle number states. All the other eigenstates $|\mathbf{n}\rangle \propto (\hat{\mathbf{b}}^\dagger)^n |0\rangle$ also have a definite parity, which alternates between even and odd.

One notices, however, that this procedure makes sense only for not-too-strong drive amplitude, $2|\lambda| < \Delta$, when $\Omega^2 > 0$. We will show in what follows that for a stronger drive the harmonic system is classically unstable and thus a nonlinearity must be added to stabilize it. Here we focus on the effect of a weakly coupled bath below the instability threshold. To this end we write the dissipative part of the Lindblad operator (5.29) in the Bogoliubov rotated representation:

$$\begin{aligned} & 2\kappa (n_B + 1) \left(\hat{b} \hat{\rho} \hat{b}^\dagger - \frac{1}{2} \{ \hat{b}^\dagger \hat{b}, \hat{\rho} \} \right) + 2\kappa n_B \left(\hat{b}^\dagger \hat{\rho} \hat{b} - \frac{1}{2} \{ \hat{b} \hat{b}^\dagger, \hat{\rho} \} \right) \\ &= 2\kappa [(n_B + 1) \cosh^2 \alpha + n_B \sinh^2 \alpha] \left(\hat{\mathbf{b}} \hat{\rho} \hat{\mathbf{b}}^\dagger - \frac{1}{2} \{ \hat{\mathbf{b}}^\dagger \hat{\mathbf{b}}, \hat{\rho} \} \right) \\ &+ 2\kappa [(n_B + 1) \sinh^2 \alpha + n_B \cosh^2 \alpha] \left(\hat{\mathbf{b}}^\dagger \hat{\rho} \hat{\mathbf{b}} - \frac{1}{2} \{ \hat{\mathbf{b}} \hat{\mathbf{b}}^\dagger, \hat{\rho} \} \right) + \dots \end{aligned} \quad (5.51)$$

where $\dots$ stands for terms with two $\hat{\mathbf{b}}$, or two $\hat{\mathbf{b}}^\dagger$ operators. These latter terms are fast rotated as $e^{\pm i2\Omega t}$ and thus average out to zero. Comparing this expression with the Lindbladian (5.29), one can define an effective occupation number for the $\Omega \hat{\mathbf{b}}^\dagger \hat{\mathbf{b}}$ oscillator:

$$n_B^{\text{eff}} + 1 = (n_B + 1) \cosh^2 \alpha + n_B \sinh^2 \alpha; \quad n_B^{\text{eff}} = (n_B + 1) \sinh^2 \alpha + n_B \cosh^2 \alpha \quad (5.52)$$

Therefore, one can describe the Bogoliubov oscillator by its effective temperature

$$e^{\hbar\Omega/T^{\text{eff}}} = \frac{n_B^{\text{eff}} + 1}{n_B^{\text{eff}}} = \frac{(2n_B + 1) \cosh 2\alpha + 1}{(2n_B + 1) \cosh 2\alpha - 1}, \quad (5.53)$$

where $\cosh 2\alpha = \Delta/\Omega$. Close to the instability, where $\Omega \ll \Delta$, one finds

$$T^{\text{eff}} \approx \frac{\hbar\Delta}{2} (2n_B + 1) \quad (5.54)$$

This shows that even at strictly zero bath temperature, $T = 0$ and thus $n_B = 0$, there is a finite effective temperature for the $\Omega \hat{\mathbf{b}}^\dagger \hat{\mathbf{b}}$ Bogoliubov oscillator. It therefore never resides in its ground state $|0\rangle$, but reaches a quasi-equilibrium state with the relative occupation of the excited states $|\mathbf{n}\rangle$ given by $e^{-\hbar n \Omega/T^{\text{eff}}}$. The effective temperature, being proportional to $\hbar$, is of the pure quantum nature. This remarkable observation was first made by M. Dykman and colleagues [100, 101, 102] and called quantum heating. The physics of this phenomenon [100, 101, 102] is

that the quasi-energy states of the periodically driven system are superpositions of the Fock states of the non-driven one. The $T = 0$ dissipation induces only downward transitions among the latter. However, in terms of the former there are both downward and upward transitions. Therefore, the non-equilibrium driven system exhibits an effective temperature, $T^{\text{eff}} > 0$, even for $T = 0$. Notice that, although the coupling to the bath plays a crucial role, the coupling constant, κ , does not affect T^{eff} (for $\kappa \ll \Delta$). However, it determines the time scale of equilibration toward the effective thermal state.

Before addressing nonlinearities, let us briefly discuss classical stability of the parametrically driven oscillator. To this end we look at the semiclassical equations of motion for the Keldysh action (5.47). They are obtained from $\delta S / \delta \bar{\phi}^{\text{cl}}|_{\phi^{\text{cl}}=0} = 0$ and its complex conjugated partner:

$$i\partial_t \begin{pmatrix} \phi^{\text{cl}} \\ \bar{\phi}^{\text{cl}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Delta - i\kappa & 2\lambda \\ -2\lambda & -\Delta - i\kappa \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi^{\text{cl}} \\ \bar{\phi}^{\text{cl}} \end{pmatrix}. \quad (5.55)$$

Diagonalizing the 2×2 matrix of the right-hand side, one finds that as long as

$$4\lambda^2 < \Delta^2 + \kappa^2 \quad (5.56)$$

is satisfied, $\phi^{\text{cl}} = 0$ is the stable point of these equations. In the opposite limit, $\phi^{\text{cl}} = 0$ is exponentially unstable and $\phi^{\text{cl}}(t)$ runs to infinity. We have found that, although a finite dissipation strength shifts the stability boundary, there is always the instability, if the driving force is strong enough.

Treatment of linear systems may be extended to multiple degrees of freedom, that is, $\hat{b} \rightarrow \hat{b}_a$, where $a = 1, \dots, M$. In this case the parameters become $M \times M$ matrices: Hermitian $\hat{\Delta}_{ab}$, positive-definite $\hat{\kappa}_{ab}$, and complex symmetric $\hat{\lambda}_{ab}$. The right-hand side of Eq. (5.55) turns to a $2M \times 2M$ block-matrix, and the stability criteria is given by zero of its determinant.

11.5.6 5.6 Quantum Activation

The instability of the parametrically driven harmonic oscillator, discussed in Section 5.5, is stabilized by either oscillator's nonlinearity (e.g. quartic), or nonlinear dissipation. Both of these scenarios contain some important lessons to be learned. Here we focus on the former one, while the latter is presented in Sections 5.7 and 5.9. The rotated wave Hamiltonian of the nonlinear parametrically driven oscillator, linearly coupled to the bath, is given by (cf. Eqs. (5.3), (5.48))

$$\hat{H}_{2p} = \Delta \hat{b}^\dagger \hat{b} + \frac{g}{2} \hat{b}^\dagger \hat{b}^\dagger \hat{b} \hat{b} + \lambda (\hat{b}^\dagger \hat{b}^\dagger + \hat{b} \hat{b}) \quad (5.57a)$$

$$\hat{H}_{\text{bath}} = \sum_s \omega_s \hat{a}_s^\dagger \hat{a}_s; \quad \hat{H}_{\text{int}} = \sum_s \frac{g_s}{\sqrt{2\omega_s}} (\hat{a}_s^\dagger \hat{b} e^{-i\omega_p t} + \hat{b}^\dagger \hat{a}_s e^{i\omega_p t}). \quad (5.57b)$$

Upon integrating out the bath, the corresponding local action is given by Eq. (5.47) with the nonlinear terms identical to those in Eq. (5.8). It is equivalent to the Lindblad equation (5.29) with the Hamiltonian $\hat{H}_{2p}$, Eq. (5.57a).

To analyze this setup we start from the semiclassical equations of motion: $\delta S / \delta \bar{\phi}^{\text{cl}}|_{\phi^{\text{cl}}=0} = 0$ and $\delta S / \delta \phi^{\text{cl}}|_{\phi^{\text{cl}}=0} = 0$, where the action is given by Eq. (5.47):

$$i\partial_t \phi = \partial_{\bar{\phi}} V(\phi, \bar{\phi}) - i\kappa \phi; \quad i\partial_t \bar{\phi} = -\partial_{\phi} V(\phi, \bar{\phi}) - i\kappa \bar{\phi}, \quad (5.58)$$

where we have omitted the superscript "cl" for brevity and the effective potential, $V(\phi, \bar{\phi})$, is given by

$$V(\phi, \bar{\phi}) = \Delta \bar{\phi} \phi + \frac{g}{4} (\bar{\phi} \phi)^2 + \lambda (\phi^2 + \bar{\phi}^2). \quad (5.59)$$

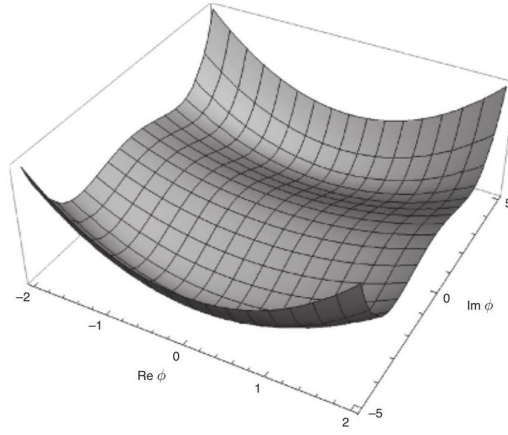


Figure 5.1 Effective potential of the parametric-driven oscillator, $V(\phi, \bar{\phi})$, Eq. (5.59), for $2\lambda > \Delta$.

For $2\lambda < \Delta$ it has a single minimum at $\phi = \bar{\phi} = 0$, corresponding to the stable regime of the parametric harmonic oscillator. For $2\lambda > \Delta$ (and small κ) the linear stability is lost and the effective potential develops two symmetric minima at $\phi = \pm\phi_0$, where $\phi_0 = i\sqrt{2(2\lambda - \Delta)/g}$, Fig. 5.1. These two minima correspond to parametrically induced oscillations with the amplitude $|\phi_0|$ and two opposite phases relative to the driving force.

Classically both these two minima are stable at $T = 0$. At $T > 0$ there are activated transitions between the two states, restoring the symmetry of the stationary distribution function. Physically such transitions are the phase slips of the parametric oscillations. Quantum mechanically the symmetry is restored even at $T = 0$. That is, the stationary state involves a superposition of oscillations with the two phases. In the absence of coupling to the bath it is achieved by quantum tunneling. The corresponding tunneling rate may be evaluated by the analytical continuation to the imaginary time [103]. However, in the presence of any (non-exponentially weak) coupling the dominant switching mechanism is not the quantum tunneling. Instead, the quantum heating mechanism, Section 5.5, leads to activated transitions between the two wells of Fig. 5.1. Dykman and colleagues called it quantum activation [100, 101, 102] and showed that it always dominates over the tunneling.

To highlight relations with the quantum heating we begin with the linearized problem. To this end we focus on a local vicinity of one of the two potential minima, say $\phi = \phi_0$, write $\phi(t) = \phi_0 + \delta\phi(t)$, and expand the potential to the second order in $\delta\phi$. This way we find:

$$V(\delta\phi, \delta\bar{\phi}) \approx V(\phi_0) + \frac{1}{2}(\delta\bar{\phi}, \delta\phi) \begin{pmatrix} 4\lambda - \Delta & \Delta \\ \Delta & 4\lambda - \Delta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta\phi \\ \delta\bar{\phi} \end{pmatrix}. \quad (5.60)$$

The quadratic form here may be diagonalized by the Bogoliubov rotation (cf. Eq. (5.49))

$$\delta\phi(t) = \cosh \alpha \zeta(t) + \sinh \alpha \bar{\zeta}(t); \quad \delta\bar{\phi}(t) = \cosh \alpha \bar{\zeta}(t) + \sinh \alpha \zeta(t) \quad (5.61)$$

where $\tanh 2\alpha = -\Delta/(4\lambda - \Delta)$. This brings the local potential to the canonical form of the harmonic oscillator, $V(\zeta, \bar{\zeta}) \approx V(\phi_0) + \Omega \bar{\zeta} \zeta$, where $\Omega^2 = 8\lambda(2\lambda - \Delta)$. The corresponding linearized non-dissipative action in terms of $(\zeta^{\text{cl}}, \zeta^{\text{q}})$ takes the simple form

$$S = \int dt (\bar{\zeta}^{\text{cl}}, \bar{\zeta}^{\text{q}}) \begin{pmatrix} 0 & i\partial_t - \Omega \\ i\partial_t - \Omega & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \zeta^{\text{cl}} \\ \zeta^{\text{q}} \end{pmatrix} \quad (5.62)$$

where $\phi^{\text{q}}(t) = \cosh \alpha \zeta^{\text{q}}(t) + \sinh \alpha \bar{\zeta}^{\text{q}}(t)$ and the same for the bar-fields. (Indeed the Bogoliubov transformation (5.61) may be performed separately on the forward and backward branches and thus the classical and quantum components ought to transform in the same way)).

We now examine how the Bogoliubov transformation (5.61) acts on the dissipative terms in the action (5.47). Upon the rotation of the classical and quantum components, one arrives at

$$S_{\text{diss}} \approx \int dt (\bar{\zeta}^{\text{cl}}, \bar{\zeta}^{\text{q}}) \begin{pmatrix} 0 & -i\kappa \\ i\kappa & 2i\kappa (2n_B^{\text{eff}} + 1) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \zeta^{\text{cl}} \\ \zeta^{\text{q}} \end{pmatrix} \quad (5.63)$$

where we have disregarded terms with two bar-fields and two non-bar-fields, since they are fast rotated as $e^{\pm i2\Omega t}$ and average out to zero. The effective occupation number and the effective temperature are defined in exactly the same way⁸ as in Eqs. (5.52), (5.53) with the only difference that $\cosh 2\alpha = (4\lambda - \Delta)/\Omega$. Introducing a dimensionless parameter $\mu \equiv \Delta/2\lambda < 1$, one thus finds [101]

$$\frac{2\lambda}{T^{\text{eff}}} = \frac{1}{2\sqrt{1-\mu}} \log \frac{(2n_B + 1)(2 - \mu) + 2\sqrt{1-\mu}}{(2n_B + 1)(2 - \mu) - 2\sqrt{1-\mu}} \quad (5.64)$$

Close to the bifurcation point, where $1 - \mu \ll 1$, one recovers Eq. (5.54). This shows that the effective quantum temperature is continuous across the bifurcation transition.

To make a quantitative progress beyond the harmonic approximation, one may take advantage of the relative weakness of the dissipation, $\kappa \ll \lambda$. This ensures that solutions of the equations of motion (5.58) are close to the dissipationless Hamiltonian trajectories given by the lines of constant effective potential

$V(\phi, \bar{\phi}) = \text{const.}$ This motivates the canonical transformation to the action-angle coordinates $(\phi, \bar{\phi}) \rightarrow (I, \theta)$.⁹ In these coordinates the effective potential is a function of the action variable only, $V(\phi, \bar{\phi}) \rightarrow V(I)$, and the dissipation-less equations of motion acquire the simple form: $\partial_t I = 0$ and $\partial_t \theta = \partial_I V(I) = \omega(I)$. One can thus take advantage of the timescale separation between the fast angular motion (which is only weakly affected by the dissipation) and the slow motion of the action variable. The latter is entirely due to the coupling to the bath.

To derive the effective slow dynamics of the action variable it is convenient to return to the forward-backward Keldysh action (5.23), where the Hamiltonian part is $H^\pm = V(\phi^\pm, \bar{\phi}^\pm)$ and the Lindbladian part is given by Eqs. (5.25). One passes now to the action-angle coordinates separately on the forward and backward branches of the contour, $(\phi^\pm, \bar{\phi}^\pm) \rightarrow (I^\pm, \theta^\pm)$ and performs the Keldysh rotation $I^{\text{cl}} = (I^+ + I^-)/2$; $I^{\text{q}} = I^+ - I^-$ and $\theta^{\text{cl}} = (\theta^+ + \theta^-)/2$; $\theta^{\text{q}} = \theta^+ - \theta^-$. The Hamiltonian part of the action (5.23) acquires the following form (neglecting full time derivatives):

$$\begin{aligned} \bar{\phi}^+ i \partial_t \phi^+ - \bar{\phi}^- i \partial_t \phi^- V^+ + V^- &= I^+ \partial_t \theta^+ - I^- \partial_t \theta^- - V(I^+) + V(I^-) \\ &= I^{\text{cl}} \partial_t \theta^{\text{q}} + I^{\text{q}} \partial_t \theta^{\text{cl}} - V\left(I^{\text{cl}} + \frac{I^{\text{q}}}{2}\right) + V\left(I^{\text{cl}} - \frac{I^{\text{q}}}{2}\right) \approx I^{\text{cl}} \partial_t \theta^{\text{q}} + I^{\text{q}} [\partial_t \theta^{\text{cl}} - \omega(I^{\text{cl}})] \end{aligned} \quad (5.65)$$

where $\omega(I^{\text{cl}}) = \partial_I V(I^{\text{cl}})$ and we restricted ourselves to the first order in I^{q} . Integration over I^{q} enforces the classical equation of motion, $\partial_t \theta^{\text{cl}} = \omega(I^{\text{cl}})$, resulting in the fast angular rotation $\theta^{\text{cl}}(t) = \omega(I^{\text{cl}})t$. Since this is the fast degree of freedom, we shall disregard both quantum (coming from the higher orders in I^{q}) and bath-induced fluctuations of θ^{cl} (we will fully keep, though, fluctuations of the slow degree of freedom, I^{cl}). This amounts to putting $I^{\text{q}} = 0$ in all subsequent calculations.

We turn now to the dissipative terms in the action (5.23), given by Eqs. (5.25). To this end we utilize periodicity of the angular degree of freedom to write (cf. footnote 9)

$$\phi^\pm = \sum_{r=-\infty}^{\infty} c_r(I^\pm) e^{-ir\theta^\pm} \approx \sum_{r=-\infty}^{\infty} c_r(I) e^{-ir(\theta^{\text{cl}} \pm \theta^{\text{q}}/2)}, \quad (5.66)$$

⁰⁸ A straightforward way to establish it is to use forward and backward fields $\phi^\pm$ and employ Eq. (5.23).

where we put $I^q = 0$ and use $I^{\text{cl}} = I$ for brevity hereafter. Complex functions $c_r(I)$ are Fourier coefficients of the time-periodic trajectory $\phi(t)$, which is a solution of $i\partial_t\phi = \partial_{\bar{\phi}}V(\phi, \bar{\phi})$ with the constant $V(\phi, \bar{\phi}) = V(I)$. We now substitute this expression, along with its complex conjugated $\bar{\phi}^\pm$, into Eqs. (5.25) and average over the fast rotating angle θ^{cl} . This way, one finds for

$$\begin{aligned} \phi^+ \bar{\phi}^- &= \sum_{r,r'} c_r(I) \bar{c}_{r'}(I) e^{i(r'-r)\theta^{\text{cl}} + i(r'+r)\theta^q/2} \rightarrow \sum_r |c_r(I)|^2 e^{-ir\theta^q}; \\ \phi^+ \bar{\phi}^+ &= \sum_{r,r'} c_r(I) \bar{c}_{r'}(I) e^{i(r'-r)\theta^{\text{cl}} + i(r'-r)\theta^q/2} \rightarrow \sum_r |c_r(I)|^2 \\ \bar{\phi}^+ \phi^- &\rightarrow \sum_r |c_r(I)|^2 e^{ir\theta^q}; \quad \phi^- \bar{\phi}^- \rightarrow \sum_r |c_r(I)|^2. \end{aligned}$$

Finally it is convenient to rename the quantum angle as $p_I = i\theta^q$. This allows one to have the effective equations of motion in purely real notations and is very close in spirit to the change of variables in Eq. (4.18).

Putting everything together, we have succeeded to reduce the microscopic action (5.23) to the following effective action:

$$iS_{\text{eff}}[p_I, I] = - \int dt [p_I \partial_t I - H_{\text{eff}}(p_I, I)] \quad (5.67)$$

The kinetic term $p_I \partial_t I$ comes from Eq. (5.65), and $H_{\text{eff}}(p_I, I)$ comes from the Lindblad quantum jump operators (5.25):

$$H_{\text{eff}}(p_I, I) = \gamma_1 h(-p_I, I) + \gamma_2 h(p_I, I); \quad h(p_I, I) = \sum_{r=-\infty}^{\infty} [e^{rp_I} - 1] |c_r(I)|^2 \quad (5.68)$$

As before, $\gamma_{1(2)}$ are the rates of the down(up) transitions with the relative magnitude $\gamma_1/\gamma_2 = e^{\omega_0/T}$. We have arrived thus at the action of a reaction (chemical kinetics) model [103], discussed in Section 4.11; compare Eqs. (4.78) and (4.79). The action variable, I , plays the role of a number of excitation quanta. Its canonical pair, p_I , upon quantization takes the form $p_I \rightarrow -\partial_I$ and therefore e^{rp_I} downshifts the action by an integer number r . The integerness of the action, I , is, of course, a manifestation of the Bohr-Sommerfeld quantization. The r -step up-down transitions between the quantum states are induced by the bath. Their rates are proportional to the Lindbladian constants, γ_a , and weighted by the Fourier power spectrum of the classical trajectory, $|c_r(I)|^2$.

As an example let's consider an equilibrium oscillator with $V(\phi, \bar{\phi}) = V(|\phi|^2)$. Similarly to the harmonic oscillator (see footnote 9), in this case $c_r(I) = \sqrt{I} \delta_{r,1}$, and thus

$$H_{\text{eff}} = [\gamma_1 (e^{-p_I} - 1) + \gamma_2 (e^{p_I} - 1)] I = [\gamma_1 - \gamma_2 e^{p_I}] (e^{-p_I} - 1) I. \quad (5.69)$$

Equations (5.67) and (5.69) are completely equivalent to the Master equation (5.93) for the diagonal elements of the density matrix. The Hamiltonian (5.69) admits three zero-energy lines, $I = 0$, $p_I = 0$, and $p_I = \log(\gamma_1/\gamma_2) = \omega(I)/T$. The corresponding phase portrait is depicted in Fig. 5.2. The stationary probability to reach an action I is given by $\mathcal{P}(I) \propto e^{S(I)}$, where $S(I)$ is the shaded area,

⁰⁹ For, e.g. harmonic oscillator this transformation is accomplished by $\phi = \sqrt{I}e^{-i\theta}$ and $\bar{\phi} = \sqrt{I}e^{i\theta}$, while $V(\phi, \bar{\phi}) = \omega_0 \bar{\phi}\phi = \omega_0 I$. For a generic potential, $V(\phi, \bar{\phi})$, the transformation takes the form of Eq. (5.66).

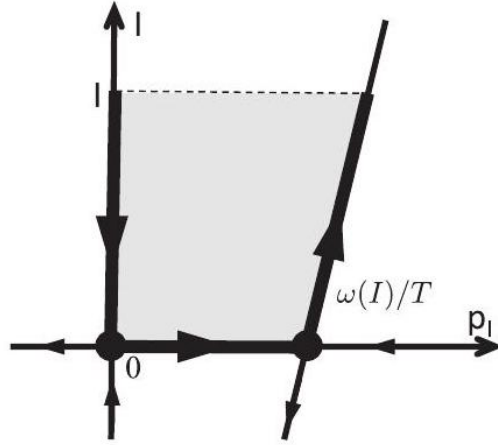


Figure 5.2 Phase portrait of the effective Hamiltonian (5.69) for an equilibrium oscillator with $V(\phi, \bar{\phi}) = \Delta \bar{\phi} \phi + \frac{g}{4}(\bar{\phi} \phi)^2$. The probability to reach an action I is given by the exponentiated area of the shaded region.

$S(I) = -\int_0^I p_I dI = -\int_0^I (\omega(I)/T) dI = -(V(I) - V(0))/T$, where we used the fact that $\omega(I) = \partial_I V(I)$. This is, of course, the equilibrium Boltzmann distribution.

The semiclassical evolution along the vertical line, $p_I = 0$, describes the meanfield relaxation of the action. It is given by

$$\partial_t I = \left. \frac{\partial H_{\text{eff}}}{\partial p_I} \right|_{p_I=0} = (\gamma_2 - \gamma_1) \sum_{r=-\infty}^{\infty} r |c_r(I)|^2 = (\gamma_2 - \gamma_1) I = -2\kappa I. \quad (5.70)$$

Thus the action relaxation, $I(t) \propto e^{-2\kappa t}$, is consistent with the equilibration rate, Eq. (5.45), of the distribution in linear systems. Equation (5.70) is more general, however, since it is not limited to the linear models. Indeed quite generally, $\sum_r r |c_r(I)|^2 = \int dt \bar{\phi} i \partial_t \phi = i \oint \bar{\phi} d\phi = I$.

For a parametrically driven oscillator, Eq. (5.59), the classical trajectories $\phi(t)$ are given by the elliptic functions. Their Fourier coefficients for $|r| \gg 1$ decay as $c_r(I) \propto \exp\{-r p_>(I)/2\}$ for $r > 0$ and $c_r(I) \propto \exp\{-|r| p_<(I)/2\}$ for $r < 0$, where $p_>(<)(I)$ are related to the poles of the elliptic function in the upper (lower) half-plane of the complex time. In the present problem they are related as $p_<(I) = 3p_>(I)$, which may be traced to the times of reaching infinite ϕ , moving in the imaginary time direction according to Eqs. (5.58).¹⁰ As a result, the function $h(-p_I, I)$ is only convergent within the interval $-p_> < p_I < p_<$ and reaches positive infinity at both of its boundaries. Since $h(-p_I, I) = 0$ for $p_I = 0$, there must be at least one other value of p_I within the convergence interval where $h(-p_I, I) = 0$. For example, for $\Delta = 0$, it happens to be $p_I = 2p_>$, Fig. 5.3(a).

It is convenient to plot the phase portrait of the effective Hamiltonian (5.68) in the rescaled coordinates $(p_I/p_>(I), I)$. At zero temperature, $\gamma_2 = 2\kappa n_B = 0$, and

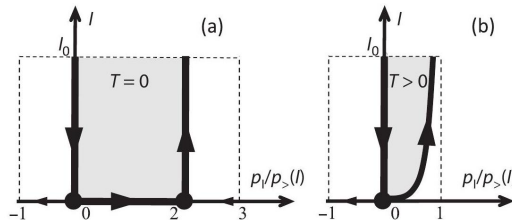


Figure 5.3 Phase portraits of the effective Hamiltonian (5.68) for (a) $T = 0$ (i.e. $\gamma_2 = 0$); (b) $T > 0$. Bold lines are zero energy trajectories. Vertical dashed lines are boundaries of

¹⁰It is worth noticing that, being proportional to the imaginary part of the second period of the elliptic function, $p_>(I)$ diverges logarithmically upon approaching the bottom of the potential, $p_>(I) \propto -\log I$. On the other hand, the first period, $\omega^{-1}(I)$, diverges at the saddle point of the potential, $\omega^{-1}(I) \propto -\log(I_0 - I)$, where I_0 is the area enclosed by the separatrix line, $V(\phi, \bar{\phi}) = 0$.

convergence of the sum in Eq. (5.68). The line $I = 0$ corresponds to the bottom of the two wells in Fig. 5.1, the top line $I = I_0$ corresponds to the saddle point $V = 0$ — this is the place where a trajectory can switch between the two wells. The probability of the switching is given by the exponentiated action (5.67) on the trajectory encircling the shaded regions.

the effective Hamiltonian, $H_{\text{eff}}(p_I, I) = 2\kappa h(-p_I, I)$, is defined within the interval $-p_> < p_I < 3p_>$; see Fig. 5.3(a). For a small, but finite temperature both $h(-p_I, I)$ and $h(p_I, I)$ should be considered and thus the interval of convergence immediately shrinks to $-p_> < p_I < p_>$. One may see that the new zero-energy line appears in this case, Fig. 5.3(b), and the activation probability is given by the exponentiated action (5.67) calculated along this line. This leads to a peculiar phenomenon of the zero temperature fragility [101], when the result of the $T = 0$ calculation is different from the $T \rightarrow 0$ one. This signifies the emergence of a new (extremely small) temperature scale where the semiclassical approximation breaks down. The phenomenon may be traced back to the divergence of $h(p_I, I)$ at $p_I = p_>$. This divergence is due to the upward quantum transitions with $r \rightarrow \infty$. Therefore, the "long-ranged" (in the quantization number) transitions are responsible for the low-temperature quantum activation of the phase slips in the parametrically driven oscillator [101]. Such long-ranged transitions occur due to the nonlinearity of the potential (5.59). As a consequence, the zero temperature fragility of the quantum activation is absent in the harmonic approximation.

11.5.7 5.7 Dark Space

Here we discuss an alternative mechanism of limiting the instability of the parametrically driven oscillator. Instead of the Hamiltonian quartic nonlinearity, considered in the previous section, here we focus on the nonlinear dissipation. The latter results from the two-photon coupling to the bath. It allows us to illustrate a concept of the dark space. This is the situation when there is more than one density matrix, which does not evolve under the Lindbladian evolution (5.13), that is, there are multiple solutions of the $\mathcal{L}[\hat{\rho}] = 0$ equation. Such solutions form the so-called "dark" space, which is immune to any perturbation and thus may be useful for quantum information storage.

To motivate the construction we recall that a harmonic oscillator, linearly coupled to a $T = 0$ bath, admits a unique dark state (5.36). This state is pure and is given by $|\phi_\eta\rangle\langle\phi_\eta|$. In the limit of the vanishingly small drive amplitude, $\eta \sim \phi_\eta \rightarrow 0$, it is simply the pure ground state $|0\rangle\langle 0|$. This is easy to anticipate since the ground state is annihilated by the only quantum jump operator $\hat{L}_1 = \hat{b}$ (indeed, at $T = 0$, the rate of $\hat{L}_2 = \hat{b}^\dagger$ is zero). This observation motivates choosing a quantum jump operator, which annihilates more than one state. The simplest example is provided by $\hat{L} = \hat{b}^2$, which annihilates both the ground state, $|0\rangle$ and the first excited state, $|1\rangle$.

With this in mind we investigate a model, where both the drive and the dissipation involve only two-photon processes (cf. Eq. (5.2)):

$$\hat{H}_{2p} = \omega_0 \hat{b}^\dagger \hat{b} + 2\lambda (\hat{b}^\dagger \hat{b}^\dagger + \hat{b} \hat{b}) \cos 2\omega_p t; \quad (5.71a)$$

$$\hat{H}_{\text{bath}} = \sum_s \omega_s \hat{a}_s^\dagger \hat{a}_s; \quad \hat{H}_{\text{int}} = \sum_s \frac{g_s}{\sqrt{2\omega_s}} (\hat{a}_s^\dagger \hat{b} \hat{b} + \hat{b}^\dagger \hat{b}^\dagger \hat{a}_s). \quad (5.71b)$$

We have omitted a nonlinearity for brevity, since it is anyways generated by the interactions with the bath. Adopting the rotating wave approximation and integrating out the bath degrees of freedom for the $T = 0$ bath, one arrives at the following action:

$$\begin{aligned}
&= \int dt (\bar{\phi}^{\text{cl}}, \bar{\phi}^{\text{q}}) \begin{pmatrix} 0 & i\partial_t - \Delta \\ i\partial_t - \Delta & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi^{\text{cl}} \\ \phi^{\text{q}} \end{pmatrix} - 2\lambda (\bar{\phi}^{\text{q}}\bar{\phi}^{\text{cl}} + \phi^{\text{q}}\phi^{\text{cl}}) \\
&+ i\kappa_2 \int dt [\bar{\phi}^{\text{q}}\bar{\phi}^{\text{cl}} (\phi^{\text{cl}}\phi^{\text{cl}} + \phi^{\text{q}}\phi^{\text{q}}) - \phi^{\text{q}}\phi^{\text{cl}} (\bar{\phi}^{\text{cl}}\bar{\phi}^{\text{cl}} + \bar{\phi}^{\text{q}}\bar{\phi}^{\text{q}}) + 2\bar{\phi}^{\text{q}}\bar{\phi}^{\text{cl}}\phi^{\text{q}}\phi^{\text{cl}} + 2\phi^{\text{q}}\phi^{\text{cl}}\bar{\phi}^{\text{q}}\bar{\phi}^{\text{cl}}]
\end{aligned} \tag{5.72}$$

The first line here represents the unitary evolution with the quadratic rotating-wave Hamiltonian, $\hat{H}'_{2p}$, (5.48). The second line in Eq. (5.72) represents dissipation with the friction coefficient $\kappa_2 = J(2\omega_0)/2$, given by the spectral function of the bath. It originates¹¹ from $i\kappa_2 \int dt [\bar{L}^{\text{q}}L^{\text{cl}} - L^{\text{q}}\bar{L}^{\text{cl}} + \bar{L}^{\text{q}}L^{\text{q}} + L^{\text{q}}\bar{L}^{\text{q}}]$, where $L^{\text{q}} = \sqrt{2}\phi^{\text{q}}\phi^{\text{cl}}$ and $L^{\text{cl}} = (\phi^{\text{cl}}\phi^{\text{cl}} + \phi^{\text{q}}\phi^{\text{q}})/\sqrt{2}$. Comparing this line with the Keldysh-Lindblad action (5.23), one notices that it encodes Lindblad evolution with the single quantum jump operator, $\hat{L} = \hat{b}\hat{b}^\dagger$, and $\gamma = 2\kappa_2$. We thus conclude that the action (5.72) is the functional representation of the following Lindblad equation:

$$\partial_t \hat{\rho} = -i [\hat{H}'_{2p}, \hat{\rho}] + 2\kappa_2 \left(\hat{b}\hat{b}^\dagger \hat{\rho} \hat{b}^\dagger \hat{b} - \frac{1}{2} \{ \hat{b}^\dagger \hat{b}^\dagger \hat{b} \hat{b}, \hat{\rho} \} \right) \tag{5.73}$$

with the rotated wave Hamiltonian (5.48).

We already know from Section 5.5 that the unitary evolution exhibits the instability for the drive amplitude exceeding the critical value, $\lambda > \Delta/2$. However, the instability is arrested by the two-photon bath coupling, Eq. (5.71b). To understand how it works consider a static classical stationary point of the action (5.72) given by $\delta S / \delta \bar{\phi}^{\text{q}}|_{\phi^{\text{q}}=0} = 0$ and its complex conjugated partner:

$$(-\Delta + i\kappa_2 |\phi^{\text{cl}}|^2) \phi^{\text{cl}} = 2\lambda \bar{\phi}^{\text{cl}}; \quad (-\Delta - i\kappa_2 |\phi^{\text{cl}}|^2) \bar{\phi}^{\text{cl}} = 2\lambda \phi^{\text{cl}} \tag{5.74}$$

Multiplying the two equations, one finds

$$(\Delta^2 - 4\lambda^2 + \kappa_2^2 |\phi^{\text{cl}}|^4) |\phi^{\text{cl}}|^2 = 0 \tag{5.75}$$

It shows that for $\lambda < \Delta/2$, the only static semiclassical solution is (trivially symmetric) $\phi^{\text{cl}} = 0$. This is the regime, which quantized description is closely related to Eq. (5.50). In the opposite limit, $\lambda > \Delta/2$, the symmetric solution $\phi^{\text{cl}} = 0$ is unstable. Instead, the symmetry-broken solutions are stabilized with $|\phi_0^{\text{cl}}|^2 = \sqrt{4\lambda^2 - \Delta^2}/\kappa_2$. An inspection of Eqs. (5.74) shows that there are exactly two such solutions with $\phi_0^{\text{cl}} = \pm |\phi_0^{\text{cl}}| e^{-i\alpha/2}$, where $\tan \alpha = \sqrt{4\lambda^2 - \Delta^2}/\Delta$. Notice that in the limit $\Delta \rightarrow 0$ the two solutions approach $\phi_0^{\text{cl}} = \pm \sqrt{2i\lambda/\kappa_2}$.

This indicates that in the presence of dissipation, there are two distinct stationary solutions of the Lindblad equation (5.73). In the limit $\lambda = 0$ those are nothing but $|0\rangle\langle 0|$ and $|1\rangle\langle 1|$, which may be directly checked by substitution into Eq. (5.73) (notice that $|0\rangle\langle 1|$ and $|1\rangle\langle 0|$ are also stationary only if $\Delta = 0$). As functions of λ , the two stationary solutions evolve, maintaining their even and odd character in the particle number. At $\lambda > \Delta/2$ they sharply (for small κ_2) cross over to being close to the coherent states with $\phi = \pm \phi_0^{\text{cl}}/\sqrt{2}$ (see footnote 6), where $\pm \phi_0^{\text{cl}}$ are the two solutions of the saddle-point equations (5.74). Yet, since there are no true phase transitions in 0D, the actual stationary solutions are rather symmetric and antisymmetric combinations of these two coherent states.¹²

¹¹ This way of writing the dissipative action conforms with the ordering prescription of footnote 5. Substituting now $\phi^{\text{q}} \rightarrow \partial_{\bar{\phi}}$ and $\bar{\phi}^{\text{q}} \rightarrow -\partial_{\phi}$, one obtains the equation for the Wigner function.

¹² To actually see this dynamics one may transform the Lindblad equation (5.73) into a differential form, for example, Glauber-Sudarshan or Husimi, and investigate its stationary solutions. The most convenient one is probably the Wigner symmetric form, which may be directly read out from the Keldysh action (5.72) using

We have shown that the model generically exhibits two stationary states with the opposite particle number parity. This is not good news from the point of view of quantum information. Indeed, the two stationary states may act as a classical, but not a quantum bit. The latter requires the full space of a quantum two-level system, namely $|\uparrow\rangle\langle\uparrow|, |\downarrow\rangle\langle\downarrow|, |\downarrow\rangle\langle\uparrow|$ and $|\uparrow\rangle\langle\downarrow|$ – the fourfold degenerate dark space. In our driven-dissipative system, this is only realized at strictly zero detuning, $\Delta = 0$. In this particular case the evolution equation (5.73) may be rewritten¹³ as a purely dissipative one with the new jump operator $\hat{L} = \hat{b}\hat{b} - \phi_0^2$ and no Hamiltonian part:

$$\partial_t \hat{\rho} = 2\kappa_2 \left((\hat{b}\hat{b} - \phi_0^2) \hat{\rho} (\hat{b}^\dagger \hat{b}^\dagger - \bar{\phi}_0^2) - \frac{1}{2} \{ (\hat{b}^\dagger \hat{b}^\dagger - \bar{\phi}_0^2) (\hat{b}\hat{b} - \phi_0^2), \hat{\rho} \} \right), \quad (5.76)$$

where $\phi_0^2 = i\lambda/\kappa_2$. Since $(\hat{b}\hat{b} - \phi_0^2)|\pm\phi_0\rangle = 0$, where $|\pm\phi_0\rangle$ are the two coherent states, we conclude that there are four stationary states of this Lindbladian: $|\phi_0\rangle\langle\phi_0|, |-\phi_0\rangle\langle-\phi_0|$, as well as $|\phi_0\rangle\langle-\phi_0|$ and $|-\phi_0\rangle\langle\phi_0|$. The first two of them are precisely the ones we found in the semiclassical treatment in the limit $\Delta \rightarrow 0$. They are descendents of the two generic stationary states. The latter two exist only for $\Delta = 0$; the corresponding eigenvalues of the Lindbladian super-operator, $\hat{\mathcal{L}}$, acquire nonzero values as soon as $\Delta \neq 0$. They thus lead to a finite dephasing rate, which is, however, exponentially small for a weak dissipation:

$$\frac{\hbar}{\tau_{\text{dephasing}}} \propto \Delta e^{-2\lambda/\kappa_2}. \quad (5.77)$$

We derive this result in Section 5.9 using a semiclassical approach. Therefore, the model does realize a qubit dark space, but it is not protected from a dephasing (albeit exponentially weak) due to a nonzero detuning, Δ . Ideas of how to utilize topology to achieve better protection from the decoherence were put forward in Refs. [104, 105].

11.5.8 5.8 Symmetries of Dissipative Evolution

To systematically understand the degeneracy of dark spaces of a dissipative evolution, one needs to discuss the underlying symmetries. In the unitary case the

Table 5.1 Symmetries of OD systems with one-photon (1-ph) and two-photon (2-ph) drive and coupling to the bath.

	1-ph drive (5.2a)	2-ph drive (5.71a)
1-ph coupling (5.2b)	none: $[\hat{H}'_p, \hat{P}] \neq 0$	weak: $[\hat{H}'_{2p}, \hat{P}] = \{\hat{L}_a, \hat{P}\} = 0$
2-ph coupling (5.71b)	none: $[\hat{H}'_p, \hat{P}] \neq 0$	strong: $[\hat{H}'_{2p}, \hat{P}] = [\hat{L}_a, \hat{P}] = 0$

the prescription in footnote 5. This way one finds $\partial_t \mathcal{P} = \partial_\phi J_\phi + \partial_{\bar{\phi}} J_{\bar{\phi}}$, where

$$J_\phi = \kappa_2 \left[\bar{\phi} (\phi^2 + \partial_{\bar{\phi}\bar{\phi}}^2) + 2\bar{\phi}\phi\partial_{\bar{\phi}} \right] \mathcal{P} + i(2\lambda\bar{\phi} + \Delta\phi)\mathcal{P}$$

and we omitted superscript "cl" for brevity. The resulting Wigner equation is of the third order (Glauber-Sudarshan is second order, while Husimi is fourth order). They all ought to have the same number of stationary solutions, though. For $\lambda = 0$ those are $\mathcal{P} = e^{-|\phi|^2}$ and $\mathcal{P} = |\phi|^2 e^{-|\phi|^2}$, corresponding to $|0\rangle\langle 0|$ and $|1\rangle\langle 1|$ states. If also $\Delta = 0$, then there are two extra stationary solutions $\mathcal{P} = \bar{\phi} e^{-|\phi|^2}$ and $\mathcal{P} = \phi e^{-|\phi|^2}$, corresponding to $|0\rangle\langle 1|$ and $|1\rangle\langle 0|$ states.

¹³ This is a manifestation of the general property of the Lindblad equation that the jump operators are defined up to a constant. Namely the transformations

$$\hat{L}_a \rightarrow \hat{L}_a - C_a; \quad \hat{H} \rightarrow \hat{H} - \frac{i}{2} \sum_a \gamma_a (C_a \hat{L}_a^\dagger - \bar{C}_a \hat{L}_a)$$

leave the Lindblad equation (5.11) invariant. Here C_a are complex constants.

symmetries are associated with operators that commute with the system's Hamiltonian. For a dissipative evolution of a system with a bath integrated out, the situation is more subtle. One needs to distinguish between strong and weak symmetries [106]. A case in point is bosonic parity, which in the unitary case is associated with the parity operator, $\hat{P} = e^{i\pi\hat{b}^\dagger\hat{b}}$. The latter has an eigenvalue $+1$ for even states and -1 for odd states: $\hat{P}|\pm\rangle = \pm|\pm\rangle$, where $(\pm)$ denote even and odd states correspondingly.

A strong symmetry is the one that is respected on the microscopic level. That is, the elementary processes of the system-bath interactions preserve parity. Hamiltonian (5.71) is an example of the strong parity symmetry, (5.2b) is not. An immediate consequence of this (and thus a sufficient condition of a strong symmetry) is that both systems' Hamiltonian and all jump operators commute with the symmetry operator:

$$[\hat{H}'_{2p}, \hat{P}] = [\hat{L}_a, \hat{P}] = 0 \quad (5.78)$$

A weak symmetry is absent on the microscopic level, but appears in an effective description after the bath is integrated. Hamiltonians (5.2b) and (5.46) provide an example of the weak parity symmetry. In this case the individual jump operators do not respect parity, $[\hat{L}_a, \hat{P}] \neq 0$, but within the Lindblad equation, where there are always two jump operators acting on the density matrix, the parity is conserved. A sufficient condition for this to happen is

$$[\hat{H}'_{2p}, \hat{P}] = \{\hat{L}_a, \hat{P}\} = 0 \quad (5.79)$$

This is indeed what happens in our examples: $\{\hat{b}, e^{i\pi\hat{b}^\dagger\hat{b}}\} = \{\hat{b}^\dagger, e^{i\pi\hat{b}^\dagger\hat{b}}\} = 0$. Hamiltonian (5.2a) does not obey neither weak nor strong symmetry, since it does not commute with the parity operator. This information is collected in Table 5.1.

To appreciate the consequences of strong and weak symmetries one needs to understand how they manifest themselves on the level of the super-operator. Here we follow the discussion and notations of Refs. [107, 108]. The super-operator version of the parity operator is denoted as $\hat{\mathcal{P}}$ (do not confuse it with a probability distribution, denoted by the same letter). It acts as $\hat{\mathcal{P}}[\hat{\rho}] = \hat{P}\hat{\rho}\hat{P}^\dagger$. In the case of a weak symmetry, the super-parity commutes with the Lindbladian, $[\hat{\mathcal{L}}, \hat{\mathcal{P}}] = 0$. Therefore, all density matrices may be classified as having $+1$ or -1 super-parity. The super-parity $+1$ have the structure $|\pm\rangle\langle\pm|$, while the super-parity -1 have the structure $|\pm\rangle\langle\mp|$. Notice that all density matrices with the super-parity -1 must have zero trace. Due to $[\hat{\mathcal{L}}, \hat{\mathcal{P}}] = 0$, the Lindbladian super-operator acquires a block-diagonal structure in the super-parity subspaces $\hat{\mathcal{L}} = \text{diag} \{ \hat{\mathcal{L}}_+, \hat{\mathcal{L}}_- \}$. Only $\hat{\mathcal{L}}_+$ operates in the sub-space of trace-one operators, while $\hat{\mathcal{L}}_-$ operates in the sub-space of trace-zero operators. As a result, only $\hat{\mathcal{L}}_+$ admits a zero eigenvalue (i.e. stationary) density matrix eigen-operator. Thus in the case of a weak symmetry one generically expects a unique stationary state - not a dark space.

In case of a strong symmetry, there are two symmetry super-operators: $\hat{\mathcal{P}}_l$ and $\hat{\mathcal{P}}_r$. They act from the left and right correspondingly: $\hat{\mathcal{P}}_l[\hat{\rho}] = \hat{P}\hat{\rho}$ and $\hat{\mathcal{P}}_r[\hat{\rho}] = \hat{\rho}\hat{P}^\dagger$. They both commute with the Lindbladian super-operator, $[\hat{\mathcal{L}}, \hat{\mathcal{P}}_l] = [\hat{\mathcal{L}}, \hat{\mathcal{P}}_r] = 0$, and thus their eigenvalues resolve $|+\rangle\langle+|$ from $|-\rangle\langle-|$ and similarly $|+\rangle\langle-|$ from $|-\rangle\langle+|$. As a result, the Lindbladian super-operator is split further onto four subblocks, $\hat{\mathcal{L}} = \text{diag} \{ \hat{\mathcal{L}}_{++}, \hat{\mathcal{L}}_{--}, \hat{\mathcal{L}}_{+-}, \hat{\mathcal{L}}_{-+} \}$. Two of these four blocks act on trace-one operators. As a result, there are at least two distinct stationary density matrices: the even one $|+\rangle\langle+|$ and the odd one $|-\rangle\langle-|$. Those form the two-dimensional dark space, encountered in the previous section.

The dimensionality of the dark space may be further increased if a weak or a strong symmetry is spontaneously broken. As discussed in Section 5.5, a sufficiently strong two-photon excitation drives the system unstable. The instability is arrested by a two-photon bath coupling, Section 5.7, with the "friction" coefficient κ_2 . For any finite κ_2 the 0D system does

not allow for a broken symmetry. Yet, in the limit $\kappa_2 \rightarrow 0$ (and the driving amplitude above the threshold (5.56)), the symmetry is indeed broken (as apparent e.g. from Eq. (5.77)). In this limit weakly symmetric systems exhibit a twofold degenerate dark space, while strongly symmetric ones exhibit a fourfold degenerate one. In the special case $\kappa = \Delta = 0$, the strongly symmetric system (accidentally) breaks the symmetry and gains the fourfold qubit degenerate space even for a finite κ_2 . For a small nonzero detuning Δ the symmetry is restored by instantons, Section 5.9, and the qubit is decoherent with the exponentially small rate (5.77).

One may wonder if it is possible to engineer dark spaces with the degeneracy other than two or four. The answer is affirmative [109], if there is a set of strong symmetry operators, which realize a projective representation of a certain discrete group. The simplest example is provided by the Abelian group $\mathbb{Z}_m \times \mathbb{Z}_m$. Its projective representation is given by two non-commuting unitary operators, $\hat{P}_1$ and $\hat{P}_2$, such that

$$\hat{P}_1 \hat{P}_2 = e^{-2\pi i/m} \hat{P}_2 \hat{P}_1 \quad (5.80)$$

and $\hat{P}_1^m = \hat{P}_2^m = \hat{1}$. Here $e^{-2\pi i/m}$ is an example of 2-cocycle with the period m . If a Hamiltonian and all jump operators commute with both $\hat{P}_1$ and $\hat{P}_2$, there is a strong symmetry,¹⁴ which guarantees an m -dimensional dark space. If, in addition, the Hamiltonian is absent (analog of $\Delta = 0$ case in Section 5.7), the dark space is m^2 -fold degenerate. Reference [109] provides an example of such a construction with a fractional quantum Hall liquid on a surface of a torus, at a filling fraction $\nu = 1/m$. The operators $\hat{P}_1$ and $\hat{P}_2$ insert one flux quanta through the two principal periods of the torus.

11.5.9 5.9 Lindbladian Instantons

Here we address the issue of symmetry restoration and tunneling in the Lindbladian dynamics [110]. We take the two-photon drive with the two-photon dissipation model (5.71) of Section 5.7 to illustrate the construction. In the rotating-wave approximation the model is reduced to the Lindblad equation (5.73), which admits the strong parity symmetry. As a result, generically there are two dark states with the definite parity $|+\rangle\langle+|$ and $|-\rangle\langle-|$. The symmetry is broken at a special point of zero detuning, $\Delta = 0$, where the evolution may be written as a purely dissipative one, given by Eq. (5.76). Here there are four steady states, which can be written as pure coherent states: $|\phi_0\rangle\langle\phi_0|$, $|- \phi_0\rangle\langle- \phi_0|$, and $|\phi_0\rangle\langle- \phi_0|$, $|- \phi_0\rangle\langle\phi_0|$, where $\phi_0^2 = i\lambda/\kappa_2$. None of these pure states, taken separately, has a definite parity. One can form, however, even/odd states as $|\pm\rangle = |\phi_0\rangle \pm |- \phi_0\rangle$ and then the two stationary states with super-parity $+1$ take the form $|\pm\rangle\langle\pm|$. These states are adiabatically connected with two stationary states at $\Delta \neq 0$. The two states with super-parity -1 , $|\pm\rangle\langle\mp|$, are only stationary at $\Delta = 0$. The unitary perturbation in the form $\hat{\mathcal{H}}[\hat{\rho}] = -i [\Delta \hat{b}^\dagger \hat{b}, \hat{\rho}]$ introduces a super-matrix element between these two super-parity -1 states (but not between states with opposite super-parity, since the perturbation commutes with the super-parity operator, $[\hat{\mathcal{H}}, \hat{\mathcal{P}}] = 0$). This matrix element leads to repulsion between the corresponding eigenvalues of the Lindbladian super-operator making them nonzero (in fact, imaginary in the first order in $\hat{\mathcal{H}}$). Being a close analog of the usual quantum mechanical tunneling, this mechanism restores the strong parity symmetry.

Our goal is to calculate the corresponding matrix element and thus nonzero eigenvalues of the Lindbladian. The latter provide the dephasing rate of the qubit. The problem is that, since the super-operator, $\hat{\mathcal{L}}$, is non-Hermitian, its left eigenfunctions are not complex conjugated of the right ones. While we know the latter,

¹⁴This condition is actually too strong. If there are multiple jump operators, $\hat{L}_a$, it is enough to require that they mutually transform as $\hat{P}_{1,2} \hat{L}_a = \mathcal{U}_{ab}^{(1,2)} \hat{L}_b \hat{P}_{1,2}$, where $\mathcal{U}^{(1,2)}$ are two unitary matrices (not operators) rotating between different jump operators.

to calculate the former one needs to deal with the adjoint super-operator, $\hat{\mathcal{L}}^\dagger$. To overcome this, we employ the field-theory formulation and argue that the corresponding matrix element is given by the functional integral with fixed initial and final points in the phase-space [100]. In the limit of small dissipation, $\kappa_2 \ll \lambda$ (and thus $|\phi_0| \gg 1$) the functional integral is dominated by stationary - instanton - field configurations, which may be found by solving appropriate semiclassical equations of motion.

To execute this program we start from the action (5.72), which we reproduce here in the $\Delta = 0$ limit for convenience:

$$S = \int dt [\bar{\phi}^q i \partial_t \phi^{cl} + \bar{\phi}^{cl} i \partial_t \phi^q - 2\lambda (\bar{\phi}^q \bar{\phi}^{cl} + \phi^q \phi^{cl})] \quad (5.81)$$

$$+ i\kappa_2 \int dt [\bar{\phi}^q \bar{\phi}^{cl} (\phi^{cl} \phi^{cl} + \phi^q \phi^q) - (\bar{\phi}^{cl} \bar{\phi}^{cl} + \bar{\phi}^q \bar{\phi}^q) \phi^q \phi^{cl} + 4\bar{\phi}^q \bar{\phi}^{cl} \phi^q \phi^{cl}]$$

Notice that the action possesses the two symmetries:

$$\phi^{cl,q} \rightarrow -\phi^{cl,q}; \quad \phi^{cl} \leftrightarrow \phi^q \quad (5.82)$$

The first one simultaneously reverses the sign of the classical and the quantum components, while the second one exchanges the two. These are the consequences of the presence of the strong parity symmetry, which dictates invariance of the action with respect to two independent symmetry transformations $\phi^+ \rightarrow -\phi^+$ and $\phi^- \rightarrow -\phi^-$. Upon Keldysh rotation, $\phi^{cl,q} = (\phi^+ \pm \phi^-)/\sqrt{2}$; this leads to the symmetries (5.82). The second of them, $\phi^{cl} \leftrightarrow \phi^q$, shows that one can't expect solutions with the quantum component being smaller than the classical one.

The corresponding stationary field configurations are obtained by taking independent variations with respect to $\bar{\phi}^q, \phi^q$ and $\bar{\phi}^{cl}, \phi^{cl}$. This way, one obtains

$$\begin{aligned} i\partial_t \phi &= 2\lambda \bar{\phi} - i\kappa_2 [\bar{\phi}\phi\phi + \bar{\phi}\phi^q\phi^q - 2\bar{\phi}^q\phi^q\phi + 4\bar{\phi}\phi\phi^q] \\ -i\partial_t \bar{\phi} &= 2\lambda \phi + i\kappa_2 [\bar{\phi}\bar{\phi}\bar{\phi} + \bar{\phi}^q\bar{\phi}^q\bar{\phi} - 2\bar{\phi}\bar{\phi}^q\bar{\phi}^q - 4\bar{\phi}^q\bar{\phi}\bar{\phi}] \\ i\partial_t \phi^q &= 2\lambda \bar{\phi}^q - i\kappa_2 [\bar{\phi}^q\phi^q\phi^q + \bar{\phi}^q\phi\phi - 2\bar{\phi}\phi\phi^q + 4\bar{\phi}^q\phi^q\phi] \\ -i\partial_t \bar{\phi}^q &= 2\lambda \phi^q + i\kappa_2 [\bar{\phi}^q\bar{\phi}^q\phi^q + \bar{\phi}\bar{\phi}\phi^q - 2\bar{\phi}^q\bar{\phi}\phi - 4\bar{\phi}\bar{\phi}^q\phi^q] \end{aligned}$$

where we have omitted superscript "cl" but kept "q". Nominally $\bar{\phi}^q$ denotes a complex conjugated of ϕ^q , namely $\bar{\phi}^q = \phi^{q*}$. However, the saddle-point equations do not respect this structure (because of the last terms on their right-hand sides). This means that to reach the saddle point the integration contours should be deformed in the complex planes of ϕ^q and $\bar{\phi}^q$, understood as two independent complex variables. In other words: both $\text{Re } \phi^q$ and $\text{Im } \phi^q$ integration contours are independently deformed into respective complex planes. This unpleasant feature may be repaired by renaming $\phi^q = \bar{\chi}$ and $\bar{\phi}^q = -\chi$ with the understanding that $\bar{\chi} = \chi^*$ - a complex conjugated of χ . With this substitution equations for $\bar{\phi}$ and $\bar{\chi}$ indeed become

complex conjugated of those for ϕ and χ , correspondingly. ¹⁵ The latter equations take the following form:

$$i\partial_t \phi = 2\lambda \bar{\phi} - i\kappa_2 [\bar{\phi}\phi\phi + \bar{\phi}\bar{\chi}\bar{\chi} + 2\bar{\chi}\chi\phi + 4\bar{\chi}\bar{\phi}\phi] \quad (5.83a)$$

$$i\partial_t \chi = 2\lambda \bar{\chi} + i\kappa_2 [\bar{\chi}\chi\chi + \bar{\chi}\bar{\phi}\bar{\phi} + 2\bar{\phi}\phi\chi + 4\bar{\phi}\bar{\chi}\chi] \quad (5.83b)$$

We now look for stationary points of these equations. Some of them we already know; see Eqs. (5.74), (5.75) and the discussion following them. Those are found in the classical limit,

$\phi^q = \bar{\chi} = 0$, where Eq. (5.83a) takes the form $2\lambda\bar{\phi} - i\kappa_2\bar{\phi}\phi\phi = 0$. It has two solutions: $\phi = \pm\sqrt{2\lambda/i\kappa_2}$. Similarly in the pure quantum subspace, where $\phi = 0$, Eq. (5.83b) takes the form $2\lambda\bar{\chi} + i\kappa_2\bar{\chi}\chi\chi = 0$, which has two solutions: $\chi = \pm\sqrt{2i\lambda/\kappa_2}$. This motivates one to introduce new variables (P, X) as

$$\chi = \sqrt{\frac{2i\lambda}{\kappa_2}}P; \quad \phi = \sqrt{\frac{2\lambda}{i\kappa_2}}X \quad (5.84)$$

where the classical and quantum stationary points take the form $(0, \pm 1)$ and $(\pm 1, 0)$, correspondingly, in (P, X) notations. Since all the stationary points belong now to the plane of real (P, X) , one may try to look for instanton solutions of Eqs. (5.83) within this invariant subspace. Substituting (5.84) with real (P, X) into Eq. (5.83), one finds

$$\dot{X} = X - X^3 - 3P^2X - 4PX^2 = \partial_P H(P, X) \quad (5.85a)$$

$$\dot{P} = -P + P^3 + 3X^2P + 4XP^2 = -\partial_X H(P, X) \quad (5.85b)$$

where we have rescaled the (real) time as $2\lambda t \rightarrow t$ and denoted $\dot{X} = \partial_t X$ and $\dot{P} = \partial_t P$. Here the effective Hamiltonian is

$$H(P, X) = XP - X^3P - P^3X - 2X^2P^2 = XP(1 - X - P)(1 + X + P) \quad (5.86)$$

The system's dynamics may be read out from the phase portrait of the Hamiltonian (5.86), depicted in Fig. 5.4. It exhibits two classically stable points $(0, \pm 1)$, which are quasi-classical representations of $|\pm\phi_0\rangle$ stationary states. The matrix element, which provides for repulsion of the super-parity -1 states, is associated with the path leading from one classically stable point to the other. According to Fig. 5.4, such a path starts at $(0, 1)$, proceeds through the quantum stationary point $(1, 0)$, then returns to the classical manifold $P = 0$ at $(0, 0)$ and finally follows classically allowed motion toward $(0, -1)$. Since the equations of motion have the Hamiltonian form, they conserve the "energy," $H(P, X) = 0$, along the instanton trajectory. The only contribution to the action is coming from the $\int dt P \partial_t X = \int P dX$ term. It is proportional to the area of the shaded triangle in Fig. 5.4. Employing Eq. (5.84)

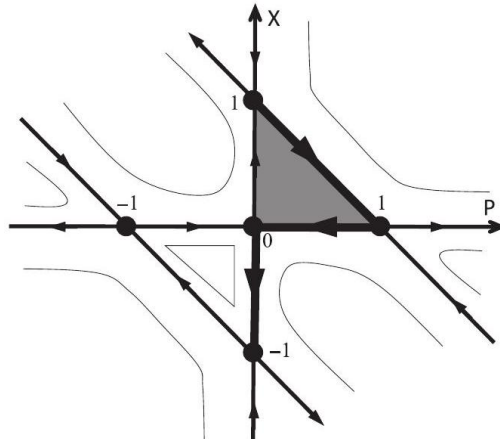


Figure 5.4 Phase portrait of the effective Hamiltonian (5.86) in the (P, X) plane. Notice its symmetries: $(P, X) \rightarrow (-P, -X)$ and $X \leftrightarrow P$; compare Eq. (5.82). Bold lines are lines of zero energy $P = 0$, $X = 0$, and $X = \pm 1 - P$. The instanton trajectory starts at $(0, 1)$ and goes through $(1, 0)$, $(0, 0)$ and finally arrives at $(0, -1)$. It thus accomplishes a switch between the

⁰¹⁵ This is very similar to the analytical continuation $X^q = P/2i$, done in classical stochastic dynamics to arrive at real-valued Hamiltonian dynamics in the phase space (P, X^{cl}) ; see Eq. (4.18).

two classically stable points $(0, \pm 1)$. The shaded area gives the instanton action.

and using that along the instanton path $P = 1 - X$, one finds the following for the action (5.81):

$$S_{\text{inst}} = i \int [\bar{\phi}^a d\phi^{\text{cl}} - \phi^a d\bar{\phi}^{\text{cl}}] = -i \int [\chi d\phi + \bar{\chi} d\bar{\phi}] = -2i \frac{2\lambda}{\kappa_2} \int_1^0 (1 - X) dX = i \frac{2\lambda}{\kappa_2}.$$

We thus conclude that the matrix element of $\hat{\mathcal{H}}$ between the two states with the super-parity -1 is given by $i\Delta e^{iS_{\text{inst}}}$ [110]. This leads to the qubit dephasing rate quoted in Eq. (5.77).

11.5.10 5.10 Optomechanical Cooling

Here we consider an effect of a strong drive, which is far detuned from the system's resonance frequency. The case in point is a mechanical oscillator with frequency ω_M , driven by an optical laser with the frequency $\omega_p \gg \omega_M$ [111, 112, 113, 114]. A schematic example is shown in Fig. 5.5a, where the laser is pumping an optical cavity, close to its eigenmode, ω_0 , while one of the cavity's mirrors may oscillate mechanically with the frequency ω_M . The mechanical vibrations modulate the cavity's resonance frequency $\omega_0 \rightarrow \omega_0(1 + X(t)/L)$, where $X(t)$ is the mirror's displacement and L is the cavity length. The corresponding quantum Hamiltonian of coupled optical, $\hat{b}, \hat{b}^\dagger$, and mechanical, $\hat{B}, \hat{B}^\dagger$, oscillators takes the form

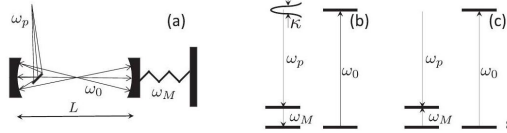


Figure 5.5 (a) A schematic representation of an optical cavity with an eigenmode frequency ω_0 , coupled to a mechanical oscillator with the frequency ω_M . (b) Cooling transitions described by the interaction Hamiltonian (5.91). The pumping frequency ω_p is chosen to fall within the spectral width, κ , of the optical cavity mode. (c) Heating transitions with two absorbed (or emitted) quanta, not included in Eq. (5.91). Probability of these transitions is suppressed by the relative factor $(\kappa/2\omega_M)^2 \ll 1$.

$$\hat{H}_{\text{om}} = \omega_0 \hat{b}^\dagger \hat{b} + \omega_M \hat{B}^\dagger \hat{B} + i g \hat{b}^\dagger \hat{b} (\hat{B}^\dagger - \hat{B}) + 2i\eta (\hat{b}^\dagger - \hat{b}) \cos \omega_p t, \quad (5.88)$$

where $g \sim L^{-1}$ and the last term represent the driving laser with the amplitude $\propto \eta$. We also assume that the optical cavity is coupled (leakage) to a continuum of bulk electromagnetic modes, $\hat{a}_s, \hat{a}_s^\dagger$, exactly as in Eq. (5.2b). Such coupling results in a finite spectral width, κ , of the cavity mode, discussed in detail in Sections 5.1 and 5.4. For the purpose of cooling the mechanical oscillator we consider the case where $\kappa \ll \omega_M \ll \omega_p \lesssim \omega_0$ and

$$|\omega_0 - \omega_M - \omega_p| \lesssim \kappa; \quad \omega_0 + \omega_M - \omega_p \gg \kappa, \quad (5.89)$$

which will be explained shortly.

After a time $\sim \kappa^{-1}$ the resonator reaches a steady-state balancing between the pumping and the leakage. Neglecting for a moment the nonlinear coupling term, the dynamics of the resonator mode in the steady state is fully described by Eqs. (5.42)-(5.44). Namely,

$$\hat{b}(t) = \frac{i\eta e^{-i\omega_p t}}{\omega_0 - \omega_p - i\kappa} + \delta\hat{b}(t); \quad \hat{b}^\dagger(t) = -\frac{i\eta e^{i\omega_p t}}{\omega_0 - \omega_p + i\kappa} + \delta\hat{b}^\dagger(t) \quad (5.90)$$

where Gaussian correlations of $\delta\hat{b}(t)$ and $\delta\hat{b}^\dagger(t)$ are given by Eqs. (5.43) and (5.44). We now substitute this into the nonlinear interaction term in Eq. (5.88) and focus on terms linear in the laser amplitude η (other contributions are of a lesser interest). This way we arrive at the effective interaction Hamiltonian

$$\hat{H}_{\text{int}} = g' \delta\hat{b}^\dagger \hat{B} e^{-i\omega_p t} + \bar{g}' \hat{B}^\dagger \delta\hat{b} e^{i\omega_p t}, \quad (5.91)$$

where $g' = g\eta/(\omega_0 - \omega_p - i\kappa) \approx g\eta/\omega_M$ (cf. Eq. (5.89)). This Hamiltonian represents processes depicted in Fig. 5.5b, where the external drive stimulates emission of the mechanical oscillation quantum ω_M with the simultaneous absorption of the cavity quantum ω_0 (and the inverse processes). There are also terms with $g'\delta\hat{b}^\dagger\hat{B}^\dagger e^{-i\omega_p t} + \bar{g}'\hat{B}\delta\hat{b}e^{i\omega_p t}$, depicted in Fig. 5.5c, representing stimulated emission or absorption of both quanta. These latter processes are far from the resonance, due to the second inequality in (5.89), and thus are much less important. The Hamiltonian (5.91) represents interactions of the mechanical oscillator with the thermal "bath" of the leaky cavity modes, exactly as in Eq. (5.3b).

One can now integrate out the cavity modes, $\delta\hat{b}^\dagger$ and $\delta\hat{b}$, using Eq. (5.44). This way, one arrives at the dissipative action for the mechanical degree of freedom of the form of Eq. (5.4). It is characterized by the dissipation constant $2\kappa^{\text{eff}} = |g'|^2 \text{Im } G^A(\omega_M + \omega_p) = |g'|^2 \kappa / [(\omega_M + \omega_p - \omega_0)^2 + \kappa^2] \approx g^2\eta^2/\omega_M^2\kappa$ and the effective occupation number $n^{\text{eff}} = (e^{(\omega_M + \omega_p)/T} - 1)^{-1}$. The last observation is particularly important. It shows that the effective temperature, T^{eff} , of the mechanical oscillator with frequency ω_M is

$$e^{\omega_M/T^{\text{eff}}} = \frac{n^{\text{eff}} + 1}{n^{\text{eff}}} \approx e^{\omega_0/T}; \quad T^{\text{eff}} = T \frac{\omega_M}{\omega_0} \ll T \quad (5.92)$$

This temperature is reached after a time $(\kappa^{\text{eff}})^{-1}$. To avoid overheating of the cavity, this time should be longer than the cavity equilibration time, κ^{-1} , dictating $\kappa > g\eta/\omega_M$.

The physics behind the optomechanical cooling is apparent from Fig. 5.5b. The resonance condition requires emission of the mechanical quantum and absorption of the optical one. For $T \ll \omega_0$ the optical fluctuations are rare: $\langle \delta\hat{b}^\dagger\delta\hat{b} \rangle = n_B \ll 1$. Thus the optical absorption is much more likely than the emission, with the ratio $(n_B + 1)/n_B \gg 1$. Therefore, the mechanical mode undergoes many more stimulated emission processes than absorption ones, with the same ratio. As a result, there is a decrease in energy drift for the mechanical mode, even though $\omega_M < T$. The corresponding Lindblad equation takes the form of Eq. (5.29) with $\Delta \rightarrow \omega_M$, $\kappa \rightarrow \kappa^{\text{eff}}$, and $n_B \rightarrow n^{\text{eff}}$. It leads to the steady-state thermal population of the mechanical modes with $T^{\text{eff}} \ll T$. For the cooling to be effective, it is important that the simultaneous mechanical and optical absorptions, Fig. 5.5c, are off-resonance and thus occur very rarely. This is insured by the relatively narrow width of the optical "bath" spectral density $\kappa \ll \omega_M$, which allows for the two inequalities (5.89) to be consistent.

11.5.11 5.11 Problems

5.11.1 Master Equation in the Number Basis

Consider the Lindblad equation (5.29) in the number state basis. Show that diagonal matrix elements $\mathcal{P}_n(t) = \langle n|\hat{\rho}(t)|n \rangle$ satisfy a closed Master equation

$$\partial_t \mathcal{P}_n = 2\kappa(n_B + 1)[(n + 1)\mathcal{P}_{n+1} - n\mathcal{P}_n] + 2\kappa n_B[n\mathcal{P}_{n-1} - (n + 1)\mathcal{P}_n] \quad (5.93)$$

where $n_B = (e^{\omega_0/T} - 1)^{-1}$. Show that Eq. (5.35) provides a stationary solution for this equation. This is the Fokker-Planck equation for the stochastic action (5.67) with the effective Hamiltonian (5.69), which we have derived using the action-angle representation.

5.11.2 Husimi Function

The Husimi function is defined as

$$\mathcal{Q}(\bar{\phi}, \phi, t) = e^{-|\phi|^2} \langle \phi | \hat{\rho} | \phi \rangle. \quad (5.94)$$

It is normalized as $\int d[\bar{\phi}, \phi] \mathcal{Q}(\bar{\phi}, \phi, t) = \text{Tr} \hat{\rho} = 1$. Starting from the Lindblad equation (5.29) and employing Eq. (5.31), derive the evolution equation for the Husimi function. Show that its stationary solution is

$$\mathcal{Q}(\bar{\phi}, \phi) = \frac{1}{n_B + 1} \exp \left\{ -\frac{|\phi|^2}{n_B + 1} \right\}. \quad (5.95)$$

Calculate the Husimi function for the density matrix (5.35) and compare it to the preceding stationary solution.

5.11.3 Kinetic Equation

According to Eq. (5.41c), $\langle \phi^{\text{cl}}(t) \bar{\phi}^{\text{cl}}(t) \rangle = F(t)$ is the equal time expectation value of the classical fields. It may be understood as $F(t) = \int d[\bar{\phi}, \phi] \phi \bar{\phi} \mathcal{P}(\bar{\phi}, \phi, t)$, where the probability distribution, $\mathcal{P}(\bar{\phi}, \phi, t)$, satisfies the Fokker-Planck equation (5.39). Derive a closed evolution equation for $F(t)$.

Solution: Multiplying the Fokker-Planck equation (5.39) by $\phi^{\text{cl}} \bar{\phi}^{\text{cl}}$ and integrating over the phase plane, one finds (show that rotational terms, $\sim i\Delta$, drop out)

$$\partial_t F = \kappa \int d[\bar{\phi}, \phi] \phi \bar{\phi} \left[\partial_{\phi}(\phi \mathcal{P}) + \partial_{\bar{\phi}}(\bar{\phi} \mathcal{P}) + 2(2n_B + 1) \partial_{\phi\bar{\phi}}^2 \mathcal{P} \right] = 2\kappa(2n_B + 1 - F)$$

where in the last equality we employed integration by parts and normalization $\int d[\bar{\phi}, \phi] \mathcal{P} = 1$. We have found the kinetic equation (5.45) for the distribution function.

5.11.4 Bloch Equations

Consider a two-level system (e.g. spin 1/2) with a 2×2 density matrix satisfying the Lindblad equation

$$\begin{aligned} \partial_t \hat{\rho} = & i[\hat{\rho}, \vec{B} \cdot \hat{\vec{\sigma}}] + 2\kappa(n_B + 1) \left(\hat{\sigma}_- \hat{\rho} \hat{\sigma}_+ - \frac{1}{2} \{ \hat{\sigma}_+ \hat{\sigma}_-, \hat{\rho} \} \right) \\ & + 2\kappa n_B \left(\hat{\sigma}_+ \hat{\rho} \hat{\sigma}_- - \frac{1}{2} \{ \hat{\sigma}_- \hat{\sigma}_+, \hat{\rho} \} \right), \end{aligned}$$

where $\hat{\vec{\sigma}} = (\hat{\sigma}_1, \hat{\sigma}_2, \hat{\sigma}_3)$ are the Pauli matrices and $\hat{\sigma}_{\pm} = (\hat{\sigma}_1 \pm i\hat{\sigma}_2)/2$. The density matrix may be written as $\hat{\rho}(t) = \frac{1}{2} [\hat{\sigma}_0 + \vec{m}(t) \cdot \hat{\vec{\sigma}}]$, where $\vec{m}(t) = \text{Tr}\{\hat{\rho}(t) \hat{\vec{\sigma}}\}$ is the magnetization vector with $\vec{m} \cdot \vec{m} \leq 1$. Rewrite the Lindblad equation as equations for components of the magnetization vector $\vec{m}(t)$. These equations are known as Bloch equations.

Solution:

$$\partial_t m_{1,2} = 2[\vec{B} \times \vec{m}]_{1,2} - \frac{m_{1,2}}{T_2}; \quad \partial_t m_3 = 2[\vec{B} \times \vec{m}]_3 - \frac{m_3 - \langle m_3 \rangle}{T_1}$$

where $T_2^{-1} = \kappa(2n_B + 1)$, $T_1^{-1} = 2\kappa(2n_B + 1)$ and $\langle m_3 \rangle = -(2n_B + 1)^{-1}$.

12 Relatively Well-known Models of Non-Equilibrium Systems by Kamenev

12.1 Bosonic Fields

In this chapter we generalize the formalism of Chapter 2 for the case of complex and real interacting bosonic fields. We then develop a perturbative diagrammatic technique and use it to derive the quantum kinetic equation.

12.1.1 6.1 Complex Bosonic Fields

Consider a box of size L filled with bosonic particles of mass m . The singleparticle states within the box are labeled by the wavenumber vector $\mathbf{k} = (2\pi/L)\mathbf{n}$, where the vector $\mathbf{n} = (n_x, n_y, n_z)$ has integer components $n_\mu = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ (we have assumed periodic boundary conditions in all directions). The corresponding energies are given by $\omega_{\mathbf{k}} = \mathbf{k}^2/(2m)$. One may associate bosonic creation and annihilation operators $\hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger$ and $\hat{b}_{\mathbf{k}}$, obeying the commutation relations $[\hat{b}_{\mathbf{k}}, \hat{b}_{\mathbf{k}'}^\dagger] = \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}$, with each of these single-particle states. The kinetic energy part of the Hamiltonian written in terms of such operators takes the form

$$\hat{H}_0 = \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}}. \quad (6.1)$$

Assuming some initial density matrix, for example, $\hat{\rho}_0 = \exp \left\{ -\beta (\hat{H}_0 - \mu \hat{N}) \right\}$, where the number operator is $\hat{N} = \sum_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}}$, one may write the Keldysh partition function $Z = 1$ (see Eq. (2.13)), as a functional integral over the closed time contour (Fig. 2.1). The coherent states are parametrized by a set of complex numbers $\phi_j(\mathbf{k})$, labeled by the discrete time index j along with the state index $\mathbf{k}$. Transforming to continuum notation and performing the Keldysh rotation according to Eq. (2.39) for each state $\mathbf{k}$, one obtains the two sets of complex fields $\phi^{\text{cl}}(\mathbf{k}, t)$ and $\phi^{\text{q}}(\mathbf{k}, t)$. The partition function acquires the form

$$Z = \int \mathbf{D} [\phi^{\text{cl}}, \phi^{\text{q}}] e^{iS_0[\phi^{\text{cl}}, \phi^{\text{q}}]}, \quad (6.2)$$

where the integration measure is given by

$$\mathbf{D} [\phi^{\text{cl}}, \phi^{\text{q}}] = \frac{1}{\text{Tr} \{\hat{\rho}_0\}} \prod_{\mathbf{k}} \prod_{j=1}^N \frac{d(\text{Re } \phi_j^{\text{cl}}(\mathbf{k})) d(\text{Im } \phi_j^{\text{cl}}(\mathbf{k})) d(\text{Re } \phi_j^{\text{q}}(\mathbf{k})) d(\text{Im } \phi_j^{\text{q}}(\mathbf{k}))}{\pi} \quad (6.3)$$

and the limit $N \rightarrow \infty$ is understood. The Keldysh action of the free complex Bose field is written, employing Eqs. (2.51) and (2.52), as

$$S_0 [\phi^{\text{cl}}, \phi^{\text{q}}] = \sum_{\mathbf{k}} \int_{-\infty}^{\infty} dt (\bar{\phi}^{\text{cl}}, \bar{\phi}^{\text{q}}) \begin{pmatrix} 0 & i\partial_t - \omega_{\mathbf{k}} - i0 \\ i\partial_t - \omega_{\mathbf{k}} + i0 & 2i0F(\omega_{\mathbf{k}}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi^{\text{cl}} \\ \phi^{\text{q}} \end{pmatrix} \quad (6.4)$$

where $\phi^{\text{cl}, \text{q}} = \phi^{\text{cl}, \text{q}}(\mathbf{k}, t)$. The $\pm i0$ indicates the retarded/advanced nature of the off-diagonal operators and specifies how the corresponding inverted operators are to be understood. The q–q Keldysh component is a pure regularization for the free field. Unlike the cl – cl component, it becomes finite (and in general non-local with respect to time and state indices) once the interactions between the particles are included. We kept it explicitly here to remind us that it determines the way the quadratic form in the action is inverted.

The corresponding free (bare) Green function is defined as

$$G_0^{\alpha\beta}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', t, t') = -i \int \mathbf{D} [\phi^{\text{cl}}, \phi^{\text{q}}] \phi^{\alpha}(\mathbf{k}, t) \bar{\phi}^{\beta}(\mathbf{k}', t') e^{iS_0[\phi^{\text{cl}}, \phi^{\text{q}}]} \quad (6.5)$$

and according to the rules of the Gaussian integration is given by the inverse of the quadratic form in the action

$$G_0^{\alpha\beta}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', t, t') = \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \begin{pmatrix} G_0^{\text{K}}(\mathbf{k}, t - t') & G_0^{\text{R}}(\mathbf{k}, t - t') \\ G_0^{\text{A}}(\mathbf{k}, t - t') & 0 \end{pmatrix} \quad (6.6)$$

The three nonzero components of the Green function are

$$G_0^R(\mathbf{k}, t) = -i\theta(t)e^{-i\omega_{\mathbf{k}}t} \xrightarrow{\text{FT}} (\epsilon - \omega_{\mathbf{k}} + i0)^{-1} \quad (6.7a)$$

$$G_0^A(\mathbf{k}, t) = i\theta(-t)e^{-i\omega_{\mathbf{k}}t} \xrightarrow{\text{FT}} (\epsilon - \omega_{\mathbf{k}} - i0)^{-1} \quad (6.7b)$$

$$G_0^K(\mathbf{k}, t) = -iF(\omega_{\mathbf{k}})e^{-i\omega_{\mathbf{k}}t} \xrightarrow{\text{FT}} -2\pi iF(\epsilon)\delta(\epsilon - \omega_{\mathbf{k}}) \quad (6.7c)$$

In equilibrium the distribution function is $F(\epsilon) = \coth(\epsilon - \mu)/(2T)$. Here we also quoted the Fourier transforms with respect to the time argument for all three components.

It is sometimes convenient to perform the linear change of variables in the functional integral to introduce the coordinate space representation for the two complex bosonic fields

$$\phi^\alpha(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}} \phi^\alpha(\mathbf{k}, t)e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \quad (6.8)$$

In terms of these fields the bare bosonic action (6.4) takes the form

$$S_0 = \int d\mathbf{r} \int_{-\infty}^{\infty} dt (\bar{\phi}^{\text{cl}}, \bar{\phi}^{\text{q}}) \begin{pmatrix} 0 & i\partial_t + \frac{\nabla_{\mathbf{r}}^2}{2m} - V^{\text{cl}} \\ i\partial_t + \frac{\nabla_{\mathbf{r}}^2}{2m} - V^{\text{cl}} & 2i0F \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi^{\text{cl}} \\ \phi^{\text{q}} \end{pmatrix} \quad (6.9)$$

where we have added an external classical potential $V^{\text{cl}} = V^{\text{cl}}(\mathbf{r}, t)$ in accordance with Eq. (2.66). In the absence of such an external potential, the correlators of the coordinate space bosonic fields are given by the Fourier transform of the Green function (6.6), (6.7)

$$\langle \phi^\alpha(\mathbf{r}, t) \bar{\phi}^\beta(\mathbf{r}', t') \rangle = iG_0^{\alpha\beta}(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t - t') = i \sum_{\mathbf{k}} G_0^{\alpha\beta}(\mathbf{k}, t - t') e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \quad (6.10)$$

12.1.2 6.2 Interactions

Let us now include interactions between bosonic particles through a pairwise interaction potential $U(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$. The corresponding normally ordered Hamiltonian takes the form

$$\hat{H}_{\text{int}} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{k}, \mathbf{k}'} U(\mathbf{q}) \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}'}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}} \hat{b}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} \quad (6.11)$$

where $U(\mathbf{q})$ is the Fourier transform of the interaction potential. In the case of dilute atomic gases the interaction potential may be thought of as being shortranged, that is, momentum-independent, $U(\mathbf{q}) = g$, where the interaction constant may be expressed through the s-wave scattering length a_s as $g = 4\pi a_s/m$ [115]. The corresponding term in the action takes the form

$$S_{\text{int}} = -\frac{g}{2} \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{k}, \mathbf{k}'} \int_{\mathcal{C}} dt \bar{\phi}(\mathbf{k}, t) \bar{\phi}(\mathbf{k}', t) \phi(\mathbf{k}' + \mathbf{q}, t) \phi(\mathbf{k} - \mathbf{q}, t)$$

Going to the coordinate space representation, one finds

$$S_{\text{int}} = -\frac{g}{2} \int d\mathbf{r} \int_{\mathcal{C}} dt (\bar{\phi}\phi)^2 = -\frac{g}{2} \int d\mathbf{r} \int_{-\infty}^{+\infty} dt [(\bar{\phi}^+ \phi^+)^2 - (\bar{\phi}^- \phi^-)^2] \quad (6.12)$$

It is important to remember that there are no interactions in the distant past, $t = -\infty$ (while they are present in the future, $t = +\infty$). The interactions are supposed to be adiabatically switched on and off on the forward and backward branches correspondingly. Therefore, the interactions modify only those matrix elements of the evolution operator, Eq. (2.17), that are

away from $t = -\infty$. It

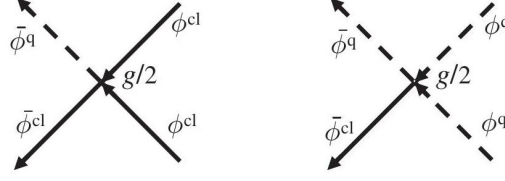


Figure 6.1 Graphic representation of the two interaction vertices of the $|\phi|^4$ theory. There are also two complex conjugated vertices with a reversed direction of all arrows.

is also worth remembering that in the discrete time form the $\bar{\phi}$ fields are taken one time step δ_t after the ϕ fields along the contour $\mathcal{C}$. Performing the Keldysh rotation, Eq. (2.39), one finds

$$S_{\text{int}} [\phi^{\text{cl}}, \phi^{\text{q}}] = -\frac{g}{2} \int d\mathbf{r} \int_{-\infty}^{+\infty} dt [\bar{\phi}^{\text{cl}} \bar{\phi}^{\text{q}} \phi^{\text{cl}} \phi^{\text{cl}} + \bar{\phi}^{\text{cl}} \bar{\phi}^{\text{q}} \phi^{\text{q}} \phi^{\text{q}} + \text{c.c.}] \quad (6.13)$$

where c.c. stands for the complex conjugate of the first two terms. The interaction action, Eq. (6.13), obviously satisfies the normalization condition, Eq. (2.53). Diagrammatically, the action (6.13) generates two types of vertex depicted in Fig. 6.1: one with three classical fields (full lines) and one quantum field (dashed line) and the other with one classical field and three quantum fields (as well as two complex conjugated vertices, obtained by reversing the direction of the arrows).

Let us demonstrate that the addition of the interaction term to the action does not violate the normalization identity, $Z = 1$. To this end, one may expand $\exp(i S_{\text{int}})$ in powers of g and then average term by term with the help of the Gaussian action (6.9). To show that the normalization, $Z = 1$, is intact, one needs to show that $\langle S_{\text{int}} \rangle = \langle S_{\text{int}}^2 \rangle = \dots = 0$. Applying the Wick theorem, Eq. (2.21), one finds for the term linear in g

$$\langle S_{\text{int}} \rangle = -\frac{g}{2} \int d\mathbf{r} dt \langle \bar{\phi}^{\text{cl}} \bar{\phi}^{\text{q}} \phi^{\text{cl}} \phi^{\text{cl}} + \bar{\phi}^{\text{cl}} \bar{\phi}^{\text{cl}} \phi^{\text{cl}} \phi^{\text{q}} + \bar{\phi}^{\text{q}} \bar{\phi}^{\text{cl}} \phi^{\text{q}} \phi^{\text{q}} + \bar{\phi}^{\text{q}} \bar{\phi}^{\text{q}} \phi^{\text{q}} \phi^{\text{cl}} \rangle$$

The first two terms upon application of the Wick theorem lead to diagrams of the type of Fig. 6.2(a):

$$\langle \bar{\phi}^{\text{cl}} \bar{\phi}^{\text{q}} \phi^{\text{cl}} \phi^{\text{cl}} + \bar{\phi}^{\text{cl}} \bar{\phi}^{\text{cl}} \phi^{\text{cl}} \phi^{\text{q}} \rangle = -2 [G_0^{\text{R}}(t, t) + G_0^{\text{A}}(t, t)] G_0^{\text{K}}(t, t) = 0$$

where we have suppressed the space arguments and focused only on the time ones and the factor of two originates from the two combinatorial possibilities to make Wick's contractions. This expression vanishes due to the identity (2.44). The last two terms in $\langle S_{\text{int}} \rangle$ trivially vanish because $\langle \phi^{\text{q}} \bar{\phi}^{\text{q}} \rangle = 0$.

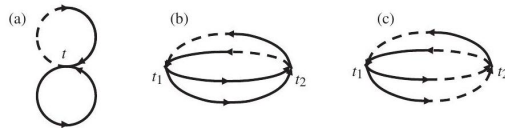


Figure 6.2 Diagrams for the first- (a) and second- (b), (c) order interaction corrections to the partition function Z . As explained in the text, they do not change the normalization identity $Z = 1$.

There are two families of terms that are second order in g and contain not more than four quantum fields (terms with six quantum fields unavoidably lead to $q - q$ contractions and therefore vanish). They contain

$$\langle \bar{\phi}_1^{\text{q}} \bar{\phi}_1^{\text{cl}} \phi_1^{\text{cl}} \phi_1^{\text{cl}} \times \phi_2^{\text{q}} \phi_2^{\text{cl}} \bar{\phi}_2^{\text{cl}} \phi_2^{\text{cl}} \rangle = 2G_0^{\text{R}}(t_2, t_1) G_0^{\text{A}}(t_2, t_1) [G_0^{\text{K}}(t_1, t_2)]^2,$$

Fig. 6.2(b), and

$$\langle \bar{\phi}_1^q \bar{\phi}_1^{\text{cl}} \phi_1^{\text{cl}} \phi_1^{\text{cl}} \times \phi_2^q \phi_2^{\text{cl}} \bar{\phi}_2^q \phi_2^q \rangle = 2G_0^{\text{R}}(t_2, t_1) G_0^{\text{A}}(t_2, t_1) [G_0^{\text{R}}(t_1, t_2)]^2,$$

Fig. 6.2(c), where $\phi_{1,2}^\alpha = \phi^\alpha(\mathbf{r}_{1,2}, t_{1,2})$. Both of these terms are zero, because $G_0^{\text{R}}(t_2, t_1) \sim \theta(t_2 - t_1)$, while $G_0^{\text{A}}(t_2, t_1) \sim G_0^{\text{R}}(t_1, t_2)^* \sim \theta(t_1 - t_2)$, and thus their product has no support in the time domain. One may be concerned that $G_0^{\text{R}}(t_2, t_1)$ and $G_0^{\text{A}}(t_2, t_1)$ are simultaneously nonzero on the diagonal $t_1 = t_2$. The contribution of the diagonal to the double integral over $dt_1 dt_2$, however, is of the order $\sim \delta_t^2 N \rightarrow 0$, when $N \rightarrow \infty$. It is easy to see that, for exactly the same reasons, all higher-order terms in g vanish and thus the fundamental normalization is indeed intact (at least in the perturbative expansion). However, the observables and correlation functions are affected by the interactions. We demonstrate it in what follows on the example of the Green functions.

12.1.3 6.3 Dyson Equation

We define the full or dressed Green function as the correlator of the fields averaged with the weight, which includes both the bare action S_0 and the interaction action:

$$G^{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, t') = -i \int \mathbf{D}[\bar{\phi}\phi] \phi^\alpha(\mathbf{r}, t) \bar{\phi}^\beta(\mathbf{r}', t') e^{i(S_0 + S_{\text{int}})}, \quad (6.14)$$

here $\alpha, \beta = (\text{cl}, q)$ and the action is given by Eqs. (6.9) and (6.13). To evaluate the full Green function one may expand the exponent in powers of S_{int} . The functional integration with the remaining Gaussian action S_0 is then performed using the Wick theorem. This procedure leads to an infinite series of terms which are convenient to represent by Feynman diagrams. Each of these diagrams has two external "legs": an

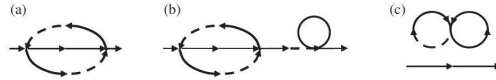


Figure 6.3 Examples of diagrams for the dressed Green function: (a) an irreducible diagram of second order in g ; (b) a reducible diagram of third order, which contains two irreducible blocks; (c) a disconnected diagram of first order.

$$\hat{G} = \hat{G}_0 + \hat{G}_0 \hat{\Sigma} \hat{G}_0 + \hat{G}_0 \hat{\Sigma} \hat{G}_0 \hat{\Sigma} \hat{G}_0 + \dots = \hat{G}_0 + \hat{G}_0 \hat{\Sigma} \hat{G},$$

Figure 6.4 Diagrammatic series for the dressed Green function $\hat{G}$, rearranged into the Dyson series. The self-energy blocks contain the sum of all irreducible diagrams. incoming, staying for the contraction $\langle \phi^\alpha(x) \bar{\phi}^\gamma(x_1) \rangle = iG_0^{\alpha\gamma}(x, x_1)$, and an outgoing, representing $\langle \phi^\delta(x_2) \bar{\phi}^\beta(x') \rangle = iG_0^{\delta\beta}(x_2, x')$, where we introduced a combined notation $x = \mathbf{r}, t$. The interior of a diagram, which is a matrix in Keldysh indices γ, δ as well as in space-time coordinates x_1, x_2 , contains a number of internal four-leg vertices, each carrying a factor of $g/2$. Integration over space-time coordinates of all internal vertices as well as summation over Keldysh indices is assumed. Examples of the diagrams are given in Fig. 6.3.

One can now define irreducible diagrams as those which cannot be cut into two disconnected parts by cutting a single line in the interior of the diagram. The diagram in Fig. 6.3(a) is irreducible, while the one in Fig. 6.3(b) is reducible. The diagram in Fig. 6.3(c) is a disconnected one. The disconnected diagrams contain all the same building blocks as in Fig. 6.2 and thus are zero, as explained previously.¹ Rearranging the order of terms in the perturbative expansion, one may formally sum up the inner parts of all irreducible diagrams and call the resulting object the self-energy $\Sigma^{\gamma\delta}(x_1, x_2)$. The full series may be written then (see Fig. 6.4) as

$$\hat{G} = \hat{G}_0 + \hat{G}_0 \circ \hat{\Sigma} \circ \hat{G}_0 + \hat{G}_0 \circ \hat{\Sigma} \circ \hat{G}_0 \circ \hat{\Sigma} \circ \hat{G}_0 + \dots = \hat{G}_0 + \hat{G}_0 \circ \hat{\Sigma} \circ \hat{G}, \quad (6.15)$$

where the circular multiplication sign implies convolution of the space-time coordinates as well as a 2×2 Keldysh matrix multiplication. The only difference compared with the standard diagrammatic expansion [2, 4, 6] is the presence of the 2×2 matrix structure. The fact that the series is arranged as a sequence of matrix products is no surprise. Indeed, the Keldysh index, $\alpha = (\text{cl}, \text{q})$, is just one more index in addition to time, space, spin, and others. Therefore, as with any other

index, there is a summation over all of its intermediate values, hence the matrix multiplication. The concrete form of the self-energy matrix, $\hat{\Sigma}$, is specific to the Keldysh technique and is discussed in what follows in some detail.

Multiplying both sides of Eq. (6.15) by $\hat{G}_0^{-1}$ from the left, one obtains an equation for the exact dressed Green function, $\hat{G}$,

$$(\hat{G}_0^{-1} - \hat{\Sigma}) \circ \hat{G} = \hat{1}, \quad (6.16)$$

where $\hat{1}$ is the unit matrix. This equation is named after Dyson. The very nontrivial feature of the Keldysh technique is that the self-energy matrix, $\hat{\Sigma}$, possesses the same causality structure as $\hat{G}_0^{-1}$, Eq. (2.51), namely

$$\hat{\Sigma} = \begin{pmatrix} 0 & \Sigma^A \\ \Sigma^R & \Sigma^K \end{pmatrix}, \quad (6.17)$$

where $\Sigma^{R(A)}$ are mutually Hermitian conjugated lower (upper) triangular matrices with respect to the two time indices, while Σ^K is an anti-Hermitian matrix

$$\Sigma^R(x_1, x_2) = [\Sigma^A(x_2, x_1)]^* \sim \theta(t_1 - t_2); \quad \Sigma^K(x_1, x_2) = -[\Sigma^K(x_2, x_1)]^*. \quad (6.18)$$

This fact will be explicitly demonstrated in what follows. Since both $\hat{G}_0^{-1}$ and $\hat{\Sigma}$ have the same causality structure, one concludes that the dressed Green function, $\hat{G}$, also possesses the causality structure, like Eq. (2.40). As a result, the Dyson equation acquires the form

$$\begin{pmatrix} 0 & [G_0^A]^{-1} - \Sigma^A \\ [G^R]_0^{-1} - \Sigma^R & -\Sigma^K \end{pmatrix} \circ \begin{pmatrix} G^K & G^R \\ G^A & 0 \end{pmatrix} = \hat{1}, \quad (6.19)$$

where one took into account that $[G_0^{-1}]^K$ is a pure regularization ($\sim i0F$) and thus may be omitted in the presence of a nonzero self-energy component Σ^K . Employing the specific form of $[G_0^{R(A)}]^{-1}$, Eq. (6.9), one obtains for the retarded (advanced) component

$$\left(i\partial_t + \frac{1}{2m} \nabla_{\mathbf{r}}^2 - V^{\text{cl}}(\mathbf{r}, t) - \Sigma^{R(A)} \right) \circ G^{R(A)}(x, x') = \delta(t - t') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (6.20)$$

Provided the self-energy component $\Sigma^{R(A)}$ is known (in some approximation), Eq. (6.20) constitutes a closed equation for the retarded (advanced) component of the dressed Green function.

For the space-time translationally invariant system, $V^{\text{cl}} = 0$, such that $\hat{G}(x, x') = \hat{G}(x - x')$, this equation may be solved explicitly with the help of the Fourier transform, leading to

$$G^{R(A)}(\mathbf{k}, \epsilon) = \left(\epsilon - \frac{\mathbf{k}^2}{2m} - \Sigma^{R(A)}(\mathbf{k}, \epsilon) \right)^{-1}. \quad (6.21)$$

⁰¹ Cancellation of disconnected diagrams is a direct consequence of the normalization identity $Z = 1$. Notice that in equilibrium theory the disconnected diagrams are not zero and serve to compensate for the denominator e^{iL} , Eq. (1.5), [2, 4].

Employing Eq. (6.18), one observes that $\text{Re } \Sigma^R(\mathbf{k}, \epsilon) = \text{Re } \Sigma^A(\mathbf{k}, \epsilon)$ and $\text{Im } \Sigma^R(\mathbf{k}, \epsilon) = -\text{Im } \Sigma^A(\mathbf{k}, \epsilon) \leq 0$. The real part of the retarded (advanced) selfenergy provides renormalization of the particle's dispersion relation. That is, the relation $\epsilon = \mathbf{k}^2/(2m)$ should be substituted by the solution of the equation $\epsilon - \mathbf{k}^2/(2m) - \text{Re } \Sigma^{R(A)}(\mathbf{k}, \epsilon) = 0$. On the other hand, the imaginary part of the self-energy has the meaning of the inverse lifetime a particle spends in a given (renormalized) eigenstate $\mathbf{k}$ of the noninteracting system.

We turn now to the Keldysh component of the Dyson equation. As before, it is convenient to parametrize the Keldysh component of the Green function as

$$G^K = G^R \circ F - F \circ G^A \quad (6.22)$$

(compare with Eq. (2.49)), where $F(x, x')$ is a Hermitian matrix in the space-time domain. The Keldysh, namely $(2, 1)$ matrix component, of the Dyson equation (6.19) then takes the form $([G_0^R]^{-1} - \Sigma^R) \circ (G^R \circ F - F \circ G^A) = \Sigma^K \circ G^A$. Multiplying it from the right by $([G_0^A]^{-1} - \Sigma^A)$ and employing Eq. (6.20), one finds $F \circ ([G_0^A]^{-1} - \Sigma^A) - ([G_0^R]^{-1} - \Sigma^R) \circ F = \Sigma^K$. This may be written as

$$F \circ [G_0^A]^{-1} - [G_0^R]^{-1} \circ F = \Sigma^K - (\Sigma^R \circ F - F \circ \Sigma^A). \quad (6.23)$$

Since $[G_0^R]^{-1}(x', x) = [G_0^A]^{-1}(x', x) = \delta(x' - x)(i\partial_t + \nabla_{\mathbf{r}}^2/(2m) - V^{\text{cl}}(x))$, where the regularization $\pm i0$ may be omitted in this context, one finally finds

$$-\left[\left(i\partial_t + \frac{1}{2m}\nabla_{\mathbf{r}}^2 - V^{\text{cl}}(x)\right); F\right] = \Sigma^K - (\Sigma^R \circ F - F \circ \Sigma^A), \quad (6.24)$$

where the symbol $[\circ,]$ stands for the commutator. With the help of integration by parts, it may be understood as $[\partial_t^\circ, F] = (\partial_t + \partial_{t'})F(x, x')$, on the other hand $[\nabla_{\mathbf{r}}^2, F] = (\nabla_{\mathbf{r}}^2 - \nabla_{\mathbf{r}'}^2)F(x, x')$ and $[V; F] = (V(x) - V(x'))F(x, x')$. This equation is the quantum kinetic equation for the distribution matrix $F(x, x')$. Schematically, its left-hand side forms the kinetic term, while the right-hand side is the collision term or the collision integral. In equilibrium the kinetic term vanishes. This implies, in turn, that the self-energy possesses the same structure as the Green function: $\Sigma^K = \Sigma^R \circ F - F \circ \Sigma^A$. The latter is not the case, however, away from equilibrium.

12.1.4 6.4 Real Bosonic Fields

We briefly repeat now the construction of the interacting field theory for the case of real boson fields, such as, for example, elastic phonons. To this end we consider a toy model of a d -dimensional "quantum membrane." It is formed by a lattice of quantum particles, where a displacement of an i th particle from the corresponding lattice point is denoted as φ_i . For simplicity we consider φ as a scalar, which may be, for example, a transversal deformation of the membrane. We assume that the particles interact through some short-ranged potential, which leads to a bending rigidity κ of the membrane. The corresponding contribution to the energy is $U = (\kappa/2a^4) \sum_{\mathbf{i}} (\nabla^2 \varphi_{\mathbf{i}})^2$, where ∇ is the lattice gradient operation and a is the lattice constant. In essence, the energy is paid for the curvature of the membrane. Furthermore, we also assume that each site experiences a static potential $V(\varphi_i)$, created by, for example, an external substrate. Being expanded around its minimum, such a potential may be written as

$$V(\varphi) = \frac{\omega_0^2}{2}\varphi^2 + \frac{\gamma}{6}\varphi^3 + \dots \quad (6.25)$$

The Keldysh action of an individual quantum particle is given by Eq. (3.4). Generalizing it for the lattice, one finds

$$S[\varphi] = \int_{\mathcal{C}} dt \sum_{\mathbf{i}} \left(\frac{1}{2} \dot{\varphi}_{\mathbf{i}}^2 - \frac{\kappa}{2a^4} (\nabla^2 \varphi_{\mathbf{i}})^2 - V(\varphi_{\mathbf{i}}) \right) \quad (6.26)$$

where $\varphi_{\mathbf{i}} = \varphi_{\mathbf{i}}(t)$ with t running along the closed time contour. We take now the continuum limit by introducing the displacement density field $\varphi(\mathbf{r}, t)$, where $\mathbf{r}$ is the coordinate in the d -dimensional space of the membrane. In terms of this scalar real field the action takes the form

$$S[\varphi] = \int_{\mathcal{C}} dt \int d\mathbf{r} \left[\frac{1}{2} (\dot{\varphi}^2 - \kappa (\nabla_{\mathbf{r}}^2 \varphi)^2 - \omega_0^2 \varphi^2) - \frac{\gamma}{6} \varphi^3 \right] \quad (6.27)$$

Performing the Keldysh rotation according to $\varphi^{\text{cl}, \text{q}} = (\varphi^+ \pm \varphi^-)/2$, one finds for the quadratic part of the action (6.27)

$$S_0 = \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} \int_{-\infty}^{\infty} dt (\varphi^{\text{cl}}, \varphi^{\text{q}}) \begin{pmatrix} 0 & -2(\partial_t^2 + \kappa \nabla_{\mathbf{r}}^4 + \omega_0^2) \\ -2(\partial_t^2 + \kappa \nabla_{\mathbf{r}}^4 + \omega_0^2) & -0[\partial_t, F] \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi^{\text{cl}} \\ \varphi^{\text{q}} \end{pmatrix} \quad (6.28)$$

The matrix in the action is the inverse bare Green function $\hat{D}_0^{-1}$. As before, its Keldysh q-q component is a pure regularization, showing the way the matrix is to be inverted. Neglecting the cubic nonlinearity, the correlator of the real fields is given by the bare Green function

$$D_0^{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, t') = -i \int \mathbf{D}[\varphi^{\text{cl}}, \varphi^{\text{q}}] \varphi^{\alpha}(\mathbf{r}, t) \varphi^{\beta}(\mathbf{r}', t') e^{iS_0[\varphi^{\text{cl}}, \varphi^{\text{q}}]}, \quad (6.29)$$

which possesses the standard causality structure

$$D_0^{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, t') = \begin{pmatrix} D_0^{\text{K}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t - t') & D_0^{\text{R}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t - t') \\ D_0^{\text{A}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t - t') & 0 \end{pmatrix}. \quad (6.30)$$

As discussed in Section 3.1, the matrix $\hat{D}$ is symmetric (unlike the case of the complex field). The Fourier transforms of the three nonzero components of the bare Green function, according to Eq. (3.13), are

$$D_0^{\text{R(A)}}(\mathbf{k}, \epsilon) = \frac{1}{2} \frac{1}{(\epsilon \pm i0)^2 - \omega_{\mathbf{k}}^2} \quad (6.31a)$$

$$D_0^{\text{K}}(\mathbf{k}, \epsilon) = F(\epsilon) [D^{\text{R}}(\mathbf{k}, \epsilon) - D^{\text{A}}(\mathbf{k}, \epsilon)] \quad (6.31b)$$

where the dispersion relation for our model is given by $\omega_{\mathbf{k}}^2 = \kappa \mathbf{k}^4 + \omega_0^2$, but the construction may be generalized to accommodate an arbitrary dispersion $\omega_{\mathbf{k}}$. Due to the symmetry of the Green function the distribution function $F(\epsilon)$ must be an odd function of energy ϵ . It takes the form $F^{\text{eq}}(\epsilon) = \coth(\epsilon/2T)$ in equilibrium.

The cubic unharmonicity of the action (6.27) after the Keldysh rotation leads to the following nonlinear term in the action:

$$S_{\text{int}} = - \int d\mathbf{r} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \left[\gamma (\varphi^{\text{cl}})^2 \varphi^{\text{q}} + \frac{\gamma}{3} (\varphi^{\text{q}})^3 \right] \quad (6.32)$$

The normalization condition (2.53) is again satisfied. Diagrammatically, the cubic nonlinearity generates two types of vertex (Fig. 6.5): one with two classical fields (full lines) and one quantum field (dashed line), and the other with three quantum fields. The former vertex

carries the factor γ , while the latter has $\gamma/3$. Note that for the real field the lines do not have a direction.

Similarly to the case of the complex field, one may check that addition of the interaction action does not affect the normalization identity $Z = 1$. This property is based on the identity $D_0^R(t, t) + D_0^A(t, t) = 0$ and the rule of thumb $D_0^R(t, t') D_0^A(t, t') = 0$, explained in Section 6.2. The Green function, on the other hand, is affected. The effect of nonlinearity on the dressed Green function $\hat{D}(x, x')$ is described by the Dyson equation

$$\left(\hat{D}_0^{-1} - \hat{\Sigma}\right) \circ \hat{D} = \hat{1}, \quad (6.33)$$

where $\hat{\Sigma}(x, x')$ is the self-energy of real bosons, possessing the causality structure, Eq. (6.17), and calculated in the next paragraph to second order in γ . The retarded and advanced components of the Dyson equation take the form

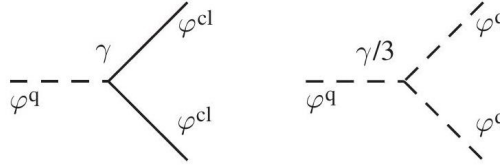


Figure 6.5 Graphic representation of the two interaction vertices of the φ^3 theory. Note the relative factor of one-third between them.

$$-\left(2\partial_t^2 + 2\kappa\nabla_{\mathbf{r}}^4 + 2\omega_0^2 + \Sigma^{R(A)}\right) \circ D^{R(A)}(x, x') = \delta(t - t') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (6.34)$$

The Keldysh component of the Green function is again convenient to parametrize as $D^K = D^R \circ F - F \circ D^A$ (see Eq. (2.49)), where $F(x, x')$ is a Hermitian matrix in the space-time domain. The Dyson equation for the Keldysh component then takes the form of the kinetic equation for the two-point distribution function $F(x, x')$:

$$\left[(2\partial_t^2 + 2\kappa\nabla_{\mathbf{r}}^4 + 2\omega_0^2); F\right] = \Sigma^K - (\Sigma^R \circ F - F \circ \Sigma^A) \quad (6.35)$$

The commutators involved in the kinetic term read $[\partial_t^2, F] = (\partial_t^2 - \partial_{t'}^2) F(x, x')$ and $[\nabla_{\mathbf{r}}^4, F] = (\nabla_{\mathbf{r}}^4 - \nabla_{\mathbf{r}'}^4) F(x, x')$. Finally $[\omega_0^2, F] = 0$; one may allow, though, for some space- and/or time-dependent function $\omega_0(x)$, in the latter case $[\omega_0^2, F] = (\omega_0^2(x) - \omega_0^2(x')) F(x, x')$. The self-energy components on the right-hand side of Eq. (6.35) are calculated in the following sections.

12.1.5 6.5 Self-Energy

Let us demonstrate that the self-energy matrix, $\hat{\Sigma}$, indeed possesses the causality structure, Eq. (6.17). To this end, we consider the real boson field with the $\gamma\varphi^3$ nonlinearity, Eq. (6.32), and perform calculations up to second order in the nonlinearity γ . Employing the two vertices of Fig. 6.5, one finds the following.

(i) The cl – cl component of the self-energy (i.e. the diagram having two classical external legs) is given by the single diagram, depicted in Fig. 6.6(a). The corresponding analytic expression is

$$\Sigma^{\text{cl-cl}}(x, x') = 4i\gamma^2 D_0^R(x, x') D_0^A(x, x') = 0$$

Indeed, the product $D_0^R(t, t') D_0^A(t, t')$ has no support in the time domain (see the discussion in Section 6.2).

(ii) The cl – q (advanced) component is given by the single diagram Fig. 6.6(b). The corresponding expression is

$$\Sigma^A(x, x') = 4i\gamma^2 D_0^A(x, x') D_0^K(x, x'). \quad (6.36)$$

Since $\Sigma^A(t, t') \sim D_0^A(t, t') \sim \theta(t' - t)$, it is, indeed, an advanced (upper triangular) matrix in the time domain. There is a combinatoric factor of 4, associated with the diagram (four ways of choosing external legs $\times 2$ internal permutations $\times 1/(2!)$ for having two identical vertices).

(iii) The q – cl (retarded) component is given by the diagram of Fig. 6.6(c):

$$\Sigma^R(x, x') = 4i\gamma^2 D_0^R(x, x') D_0^K(x, x'), \quad (6.37)$$

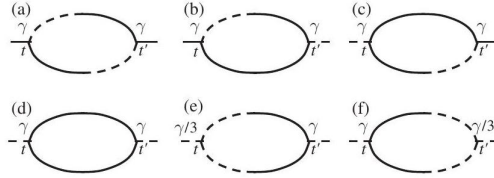


Figure 6.6 Self-energy diagrams for the φ^3 theory.

which is, in fact, the Hermitian conjugation of Eq. (6.36): $\Sigma^R = [\Sigma^A]^\dagger$. Since $\Sigma^R(t, t') \sim D_0^R(t, t') \sim \theta(t - t')$, it is indeed a retarded (lower triangular) matrix.

(iv) The q – q (Keldysh) component is given by the three diagrams, Fig. 6.6(d)-(f). The corresponding expression (sum of these diagrams) is

$$\begin{aligned} \Sigma^K(x, x') &= 2i\gamma^2 [D_0^K(x, x')]^2 + 6i\left(\frac{\gamma}{3}\right) \gamma [D_0^A(x, x')]^2 + 6i\gamma\left(\frac{\gamma}{3}\right) [D_0^R(x, x')]^2 \\ &= 2i\gamma^2 \left([D_0^K(x, x')]^2 + [D_0^R(x, x') - D_0^A(x, x')]^2 \right) \end{aligned} \quad (6.38)$$

The combinatoric factors are 2 for diagram (d) and 6 for (e) and (f). In the last equality the fact that $D_0^R(t, t') D_0^A(t, t') = 0$, due to the absence of support in the time domain, has been used again. Employing the symmetry properties of the Green functions, one finds $\Sigma^K = -[\Sigma^K]^\dagger$. This demonstrates that the self-energy $\hat{\Sigma}$ possesses the same structure as $\hat{D}_0^{-1}$. One may check that this statement is not restricted to second order in γ , but holds in higher orders as well.

12.1.6 6.6 Wigner Transformation

The distribution matrix $F(x_1, x_2) = F(\mathbf{r}_1, t_1, \mathbf{r}_2, t_2)$ is a function of the two spacetime points. It is usually difficult to solve the kinetic equations (6.24) or (6.35) in full generality. One may often take advantage of scale separation between intrinsic microscopic space and time scales and the extrinsic ones, dictated by external perturbations and/or a measurement apparatus. In many instances the latter scales are macroscopic, or at least mesoscopic, and thus are much greater than the former ones. If this is indeed the case, the kinetic theory may be greatly simplified. Most elegantly, it is achieved with the help of the Wigner transformation (WT).

We employ combined notation for space-time $x = \mathbf{r}, t$ and momentum-energy $p = \mathbf{k}, \epsilon$, with $px = \mathbf{k}\mathbf{r} - \epsilon t$. For a two-point function $A(x_1, x_2)$ one may change the variables to the central point coordinate $x = (x_1 + x_2)/2$ and the relative coordinate $x' = x_1 - x_2$, such that $x_{1,2} = x \pm x'/2$. One then performs a Fourier transform, going from the relative coordinate x' to its Fourier image p . As a result, the Wigner transform of the two-point function $A(x_1, x_2)$ is a function of the central coordinate x and the relative momentum p , namely $A(x, p)$, defined as

$$A(x, p) = \int dx' e^{-ipx'} A\left(x + \frac{x'}{2}, x - \frac{x'}{2}\right) \quad (6.39)$$

The WT of $A^\dagger(x_1, x_2) = [A(x_2, x_1)]^*$ is simply $[A(x, p)]^*$. The inverse WT takes the form

$$A(x_1, x_2) = \sum_p e^{ip(x_1 - x_2)} A\left(\frac{x_1 + x_2}{2}, p\right) \quad (6.40)$$

where $\sum_p = \sum_{\mathbf{k}} \int d\epsilon / (2\pi)$.

Let us consider now a two-point function $C = A \circ B$, which means $C(x_1, x_2) = \int dx_3 A(x_1, x_3) B(x_3, x_2)$. According to the preceding definitions, its WT is given by

$$C(x, p) = \int dx' e^{-ipx'} \int dx_3 \sum_{p_1, p_2} e^{ip_1(x + x'/2 - x_3) + ip_2(x_3 - x + x'/2)} A\left(\frac{x + x'/2 + x_3}{2}, p_1\right) B\left(\frac{x_3 + x - x'/2}{2}, p_2\right).$$

We change coordinate variables from x_3, x' to $x_{a,b} = x_3 - x \pm x'/2$ and shift momenta as $p_{a,b} = p_{1,2} - p$ to obtain

$$C(x, p) = \iint dx_a dx_b \sum_{p_a, p_b} e^{i(p_b x_a - p_a x_b)} A\left(x + \frac{x_a}{2}, p + p_a\right) B\left(x + \frac{x_b}{2}, p + p_b\right).$$

We now formally expand the A and B functions in Taylor series in momenta $p_{a,b}$. The corresponding integrals over momenta may be evaluated by employing $\sum_p e^{\pm ipx} p^n = (\mp i)^n \delta^{(n)}(x)$, where $\delta^{(n)}$ denotes the n th derivative of the deltafunction. Subsequently, the integrals over coordinates $x_{a,b}$ also may be evaluated, leading to the formally exact expression

$$C(x, p) = A(x, p) e^{\frac{i}{2}(\overleftarrow{\partial}_x \overleftarrow{\partial}_p - \overleftarrow{\partial}_p \overleftarrow{\partial}_x)} B(x, p) \quad (6.41)$$

where the arrows show the direction of the differentiation, and the scalar products in the exponent are $\partial_x \partial_p = \nabla_{\mathbf{r}} \nabla_{\mathbf{k}} - \partial_t \partial_\epsilon$.

This formally exact result is most useful when the exponential operator on its right-hand side may be expanded and only the few lowest-order terms kept. It is a legitimate procedure when the operator $\partial_x \partial_p$ may be regarded as small, that is, if $(\delta x)(\delta p) \gg 1$, where δx and δp are characteristic scales at which the x and p arguments of the WT functions change. This in turn implies that the two-point functions of interest, say $A(x_1, x_2)$, are relatively slow functions of the central coordinate

$x = (x_1 + x_2)/2$ and relatively fast functions of the distance between the two points $x' = x_1 - x_2$. The ultimate example is translationally invariant functions, for example, $A(x_1 - x_2) = A(x')$, for which $\partial_x = 0$ and therefore only the zeroth-order term in the expansion of the exponent in Eq. (6.41) survives, leading to $C(p) = A(p)B(p)$, which is, of course, the well-known convolution theorem of the Fourier analysis. For the case where dependence on the central coordinate x is slow one finds

$$C = AB + \frac{i}{2} (\partial_x A \partial_p B - \partial_p A \partial_x B) + \dots, \quad (6.42)$$

where the arguments of all the functions are (x, p) . As a result, WT is a tool to approximately substitute convolutions of two-point functions by algebraic products of the Wigner transforms and their derivatives. In the same approximation one finds for the commutator of two-point functions

$$[A, B] \xrightarrow{\text{WT}} i(\partial_x A \partial_p B - \partial_p A \partial_x B) + \dots, \quad (6.43)$$

namely the classical Poisson bracket.

For an algebraic product of two-point functions, as, for example, in Eqs. (6.36)(6.38), $C(x_1, x_2) = A(x_1, x_2) B(x_1, x_2)$, one finds after WT

$$C(x, p) = \sum_q A(x, p - q) B(x, q) \quad (6.44)$$

12.1.7 6.7 Kinetic Term

A one-point function, such as, for example, $V^{\text{cl}}(x)$, should be considered as its own WT, which is momentum p independent. We find thus for the commutator in the kinetic term of Eq. (6.24)

$$[V^{\text{cl}}, F] \xrightarrow{\text{WT}} i\partial_x V^{\text{cl}}(x) \partial_p F(x, p) = i\nabla_{\mathbf{r}} V^{\text{cl}} \nabla_{\mathbf{k}} F - i\partial_t V^{\text{cl}} \partial_{\epsilon} F,$$

where $F(x, p) = F(\mathbf{r}, t, \mathbf{k}, \epsilon)$ is the WT of the two-point function $F(\mathbf{r}_1, t_1, \mathbf{r}_2, t_2)$. We turn now to the other commutators in the kinetic terms on the right-hand sides of the kinetic equations (6.24) and (6.35). The WT of the translationally invariant operator $i\partial_t$ is ϵ ; as a result $[i\partial_t, F] \xrightarrow{\text{WT}} i\partial_{\epsilon} \epsilon \partial_t F = i\partial_t F$, and in a similar way $[-\partial_t^2, F] \xrightarrow{\text{WT}} i\partial_{\epsilon} \epsilon^2 \partial_t F = 2i\epsilon \partial_t F$. Finally, the WT of the operator $-\nabla_{\mathbf{r}}^2$ is $\mathbf{k}^2$ and thus $[-\nabla_{\mathbf{r}}^2, F] \xrightarrow{\text{WT}} -i\nabla_{\mathbf{k}} \mathbf{k}^2 \nabla_{\mathbf{r}} F = -2i\mathbf{k} \nabla_{\mathbf{r}} F$. For a generic dispersion relation $\omega_{\mathbf{k}}$ one finds $[\omega_{\mathbf{k}}^2, F] \xrightarrow{\text{WT}} -2i\omega_{\mathbf{k}} \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \nabla_{\mathbf{r}} F$, where we introduced the group velocity as $\mathbf{v}_{\mathbf{k}} = \nabla_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}}$. As for the right-hand side of Eqs. (6.24) and (6.35), one finds for its WT

$$\Sigma^K - F(\Sigma^R - \Sigma^A) - i\partial_x (\text{Re } \Sigma^R) \partial_p F + i\partial_p (\text{Re } \Sigma^R) \partial_x F,$$

where we took into account that $\Sigma^A(x, p) = [\Sigma^R(x, p)]^*$.

Combining all the pieces together, one finds for the WT of the kinetic equation (6.24) for the complex boson field

$$\left[(1 - \partial_{\epsilon} \text{Re } \Sigma^R) \partial_t + (\partial_t \tilde{V}) \partial_{\epsilon} + \tilde{\mathbf{v}}_{\mathbf{k}} \nabla_{\mathbf{r}} - (\nabla_{\mathbf{r}} \tilde{V}) \nabla_{\mathbf{k}} \right] F = I^{\text{coll}}[F] \quad (6.45)$$

where

$$\tilde{V}(x, p) = V^{\text{cl}}(x) + \text{Re } [\Sigma^R(x, p)]; \quad \tilde{\mathbf{v}}_{\mathbf{k}} = \nabla_{\mathbf{k}} (\omega_{\mathbf{k}} + \text{Re } \Sigma^R) \quad (6.46)$$

and the right-hand side, known as the collision integral, is

$$I^{\text{coll}}[F] = i\Sigma^K(x, p) + 2F(x, p) \text{Im } [\Sigma^R(x, p)] \quad (6.47)$$

Notice that in a static (i.e. $\partial_t = 0$, including spatially nonuniform) situation any function $F(\epsilon)$ that depends only on the energy argument nullifies the left-hand side of the kinetic equation (6.45). As we shall see in the next section, there is one such function, $F^{\text{eq}} = \coth(\epsilon - \mu)/2T$, which also nullifies its right-hand side. This is the equilibrium solution.

To make progress away from equilibrium, one changes the energy argument of the distribution function as

$$F(\mathbf{r}, t, \mathbf{k}, \epsilon) = \tilde{F}(\mathbf{r}, t, \mathbf{k}, \epsilon - \omega_{\mathbf{k}} - \tilde{V}) \quad (6.48)$$

One may check that the distribution function $\tilde{F}$, defined this way, satisfies the equation, which differs from Eq. (6.45) only by the absence of the $(\partial_t \tilde{V}) \partial_{\epsilon}$ term on the left-hand side.

Thus, there is no derivative over the last argument in the equation for $\tilde{F}$. Should the collision integral depend only on the same local value of the renormalized energy $\tilde{\epsilon} = \epsilon - \omega_{\mathbf{k}} - \tilde{V}$, the kinetic equations for different $\tilde{\epsilon}$ s would split and would not talk to each other. Strictly speaking, this is never the case. That is, the collision integral is actually a nonlocal function of $\tilde{\epsilon} = \tilde{\epsilon}(x, p)$ in both the energy and space-time directions. However, in many cases the distribution function $\tilde{F}(\mathbf{r}, t, \mathbf{k}, \tilde{\epsilon})$ is a much slower function of $\tilde{\epsilon}$ than $G^R - G^A$. The latter is a sharply peaked function at $\tilde{\epsilon} = 0$ with the width given by the inverse quasiparticle lifetime $1/\tau_{\text{qp}}$. As long as the characteristic energy scale $\delta\tilde{\epsilon}$ of the distribution function $\tilde{F}(\mathbf{r}, t, \mathbf{k}, \tilde{\epsilon})$ is much larger than it, $\delta\tilde{\epsilon} \gg 1/\tau_{\text{qp}}$, one may approximately disregard the $\tilde{\epsilon}$ dependence of $\tilde{F}$ in the collision integral. Indeed, the distribution function, by its definition Eq. (2.49), always shows up in a product with WT of $G^R - G^A$. Since the latter is a sharp function of the renormalized energy at $\tilde{\epsilon} = 0$, one may approximately put that

$$\tilde{F}(\mathbf{r}, t, \mathbf{k}, \tilde{\epsilon}) \approx \tilde{F}(\mathbf{r}, t, \mathbf{k}, 0) \equiv \tilde{F}(\mathbf{r}, t, \mathbf{k}) \quad (6.49)$$

and write down a closed kinetic equation for the three-argument, or the massshell restricted distribution function $\tilde{F}(\mathbf{r}, t, \mathbf{k})$.² As long as quasiparticles are well defined, that is, $\delta\tilde{\epsilon}\tau_{\text{qp}} \gg 1$, the WT of $G^R - G^A$ remains a sharply peaked function at $\epsilon = \epsilon(\mathbf{r}, t, \mathbf{k})$ satisfying

$$\epsilon - \omega_{\mathbf{k}} - V^{\text{cl}}(\mathbf{r}, t) - \text{Re} \Sigma^R(\mathbf{r}, t, \mathbf{k}, \epsilon) = 0 \quad (6.50)$$

compare Eq. (6.21). As a result, all observables are approximately (in the leading order in $(\delta\tilde{\epsilon}\tau_{\text{qp}})^{-1}$) determined by $\tilde{F}(\mathbf{r}, t, \mathbf{k})$. Such a "mass-shell" distribution function obeys the following closed kinetic equation:

$$\left[\tilde{Z}^{-1} \partial_t + \tilde{\mathbf{v}}_{\mathbf{k}} \nabla_{\mathbf{r}} - (\nabla_{\mathbf{r}} \tilde{V}) \nabla_{\mathbf{k}} \right] \tilde{F}(\mathbf{r}, t, \mathbf{k}) = I^{\text{coll}}[\tilde{F}] \quad (6.51)$$

where $\tilde{Z}^{-1}(\mathbf{r}, t, \mathbf{k}) = 1 - \partial_{\epsilon} \text{Re} \Sigma^R$. It is important that velocity and external potential are renormalized according to Eq. (6.46) and the energy argument $\epsilon = \epsilon(\mathbf{r}, t, \mathbf{k})$ of all functions is taken as the solution of Eq. (6.50).

The "mass-shell" distribution function $\tilde{F}(\mathbf{r}, t, \mathbf{k})$ is essentially a classical object. It may be considered as a time-dependent probability of finding a particle at a given point of the classical phase space $(\mathbf{r}, \mathbf{k})$. The quantum mechanics modifies the dispersion relation along with the effective potential and the quasiparticle weight $\tilde{Z}$ as well as (possibly) the collision integral. The kinetic equation (6.51) provides thus a semiclassical approximation of the full quantum description. It is instructive to compare the kinetic term (i.e. the left-hand side) of Eq. (6.51) with that of the Fokker-Planck equation (4.32). Provided $\tilde{Z} = 1$, both may be written as $\partial_t \dots - \{E, \dots\}$, where the curly brackets stand for the classical Poisson brackets and the classical Hamiltonian is $E(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \omega_{\mathbf{k}} + \tilde{V}(\mathbf{r}, \mathbf{k})$. One observes, therefore, that the mass-shell distribution function $\tilde{F}(\mathbf{r}, t, \mathbf{k})$ has basically the same meaning as the classical probability distribution function $\mathcal{P}(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)$. The right-hand side of the Fokker-Planck equation (4.32), being linear in $\mathcal{P}$, is different from the collision integral (see Section 6.8). The latter is a nonlinear functional of the distribution

⁰² The mass-shell distribution function may be defined as $\tilde{F}(\mathbf{r}, t, \mathbf{k}) = \int d\epsilon F(\mathbf{r}, t, \mathbf{k}, \epsilon) \delta(\epsilon - \omega_{\mathbf{k}} - \tilde{V})$. For free noninteracting particles $G^R - G^A = -2\pi i \delta(\epsilon - \omega_{\mathbf{k}})$, while $G^K = F(G^R - G^A)$ and thus this definition is equivalent to $\tilde{F}(\mathbf{r}, t, \mathbf{k}) = i \int (d\epsilon/2\pi) G^K(\mathbf{r}, t, \mathbf{k}, \epsilon) = i G^K(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t, t)$. It is therefore frequently stated that the mass-shell distribution function is equivalent to the Keldysh Green function at the coinciding time arguments. As explained in Section 2.9, the latter is given by $2n_B(\mathbf{k}) + 1$, where $n_B(\mathbf{k})$ is the occupation number of the state $\mathbf{k}$. This latter relation between the equal-time Keldysh function and the occupation number is generic and remains true even in the interacting case. However, the relation between the equal-time Keldysh function and the mass-shell distribution function $\tilde{F}$ is not. It is restricted to the noninteracting case, where $G^R - G^A = -2\pi i \delta(\epsilon - \omega_{\mathbf{k}})$. It is therefore important to stress that the kinetic equation is written for the mass-shell distribution function

function $\tilde{F}$. This difference originates from the fact that in the classical problems of Chapter 4 the bath was assumed to be passive and independent of the state of the system. In the present context the many-body system serves as a "bath" for itself. This latter "bath," however, is not passive and depends on the local state of the system. Hence the nonlinear character of the collision term. Such a nonlinearity is still a classical phenomenon (though specific transition rates may, of course, incorporate quantum mechanics in an essential way).

Finally, let us formulate the kinetic equation for real boson quasiparticles, such as, for example, elastic phonons. The Wigner transform of the kinetic term of the real boson Dyson equation (6.35) takes the form

$$[\partial_\epsilon (2\epsilon^2 - \text{Re } \Sigma^R) \partial_t + \partial_t \text{Re } \Sigma^R \partial_\epsilon + \nabla_{\mathbf{k}} (2\tilde{\omega}_{\mathbf{k}}^2) \nabla_{\mathbf{r}} - \nabla_{\mathbf{r}} (2\tilde{\omega}_{\mathbf{k}}^2) \nabla_{\mathbf{k}}] F,$$

where $\tilde{\omega}_{\mathbf{k}}^2 = \omega_{\mathbf{k}}^2 + \text{Re } \Sigma^R/2$. Due to the symmetries of the real boson Green functions, the distribution function F obeys

$$F(\mathbf{r}, t, \mathbf{k}, \epsilon) = -F(\mathbf{r}, t, -\mathbf{k}, -\epsilon). \quad (6.52)$$

Changing the energy argument of the distribution function and acknowledging that $\epsilon \approx \pm \tilde{\omega}_{\mathbf{k}}$, one arrives at the three-argument "mass-shell" distribution function

$$F(\mathbf{r}, t, \mathbf{k}, \epsilon) = s \tilde{F}(\mathbf{r}, t, s\mathbf{k}, \epsilon^2 - \tilde{\omega}_{\mathbf{k}}^2) \rightarrow s \tilde{F}(\mathbf{r}, t, s\mathbf{k}, 0), \quad (6.53)$$

where $s = \text{sign}(\epsilon)$. Such a "mass-shell" distribution function obeys the closed kinetic equation

$$[\partial_t + \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \nabla_{\mathbf{r}}] \tilde{F}(\mathbf{r}, t, \mathbf{k}) = I^{\text{coll}}[\tilde{F}], \quad (6.54)$$

where for simplicity we disregarded the dispersion renormalization by the real part of the self-energy. We also took $\epsilon = \omega_{\mathbf{k}} > 0$, which brings the collision integral to the following form:

$$I^{\text{coll}}[\tilde{F}] = \frac{1}{4\omega_{\mathbf{k}}} \left(i\Sigma^K(x, p) + 2F(x, p) \text{Im} [\Sigma^R(x, p)] \right) \Big|_{\epsilon=\omega_{\mathbf{k}}} \quad (6.55)$$

Notice that taking $\epsilon = -\omega_{\mathbf{k}} < 0$ is equivalent to making a $\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}$ substitution in the kinetic equation (6.54).

12.1.8 6.8 Collision Integral

We discuss now the collision integral, using real bosons with cubic nonlinearity, Section 6.5, as an example. The collision integral for complex bosons is considered in Section 8.7. The proper collision integral is given by Eq. (6.55). To be consistent with the approximations adopted in the derivation of the kinetic term presented earlier, we need to restrict ourselves to products of WT only. In particular,

$D_0^K(x, p) \approx F(x, p) [D_0^R(x, p) - D_0^A(x, p)]$. Even though the Green functions here are the bare ones, the distribution function F is not determined by the dynamics of the free bosons. We should allow F to be self-consistently determined by the kinetic part of the Dyson equation. Employing Eqs. (6.36)-(6.38) along with Eq. (6.44), one finds for the corresponding parts of the collision integral

$\tilde{F}(\mathbf{r}, t, \mathbf{k})$ and not for the equal-time Keldysh Green function $G^K(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t, t)$. In particular, in equilibrium $\tilde{F} = \coth(\omega_{\mathbf{k}} - \mu)/2T$ is always a solution of the kinetic equation. On the other hand, the occupation number $n_{\mathbf{B}}(\omega_{\mathbf{k}})$ even in equilibrium may be very different from the Bose (or Fermi) distribution. The most famous example probably comes from the fermionic 1d Luttinger model [116], where the occupation number at $T = 0$ is not a Fermi step-function, but rather a power-law nonanalytic function. This function is not a solution of the kinetic equation; in equilibrium the latter is solved by the Fermi distribution.

$$i\Sigma^K(x, p) = 8\pi^2\gamma^2 \sum_q \Delta(x, p-q)\Delta(x, q)[F(x, p-q)F(x, q) + 1], \quad (6.56a)$$

$$2\text{Im} [\Sigma^R(x, p)] = -8\pi^2\gamma^2 \sum_q \Delta(x, p-q)\Delta(x, q)[F(x, p-q) + F(x, q)], \quad (6.56b)$$

where the right-hand side of the last equation is symmetrized with respect to arguments $p - q = \mathbf{k} - \mathbf{q}, \epsilon - \omega$, and $q = \mathbf{q}, \omega$. Here we defined

$$\Delta(x, p) = \frac{i}{2\pi} [D_0^R(x, p) - D_0^A(x, p)] = \frac{1}{4\omega_{\mathbf{k}}} (\delta(\epsilon - \omega_{\mathbf{k}}) - \delta(\epsilon + \omega_{\mathbf{k}})). \quad (6.57)$$

To include the renormalization of the dispersion relation $\omega_{\mathbf{k}}$ by the real part of the self-energy, one may use here the dressed Green functions D . This corresponds to the so-called self-consistent Born approximation, where the self-energy diagram is evaluated using self-consistently defined Green functions. Such an approximation neglects vertex corrections, which may lead to a renormalization of the interaction parameter $\gamma \rightarrow \Gamma^{\alpha, \alpha', \alpha''}(q, p - q)$, where $\alpha = \text{cl}, q$. In some cases the full Γ may be found from independent considerations; in general, one should write an additional equation for the vertex tensor and solve it in an approximation consistent with that for the self-energy.

Employing Eqs. (6.55) and (6.56), one finds for the collision integral

$$I^{\text{coll}}[F] = \frac{2\pi^2\gamma^2}{\omega_{\mathbf{k}}} \sum_q \Delta(x, p-q)\Delta(x, q) \times [F(x, p-q)F(x, q) + 1 - F(x, p)(F(x, p-q) + F(x, q))] \quad (6.58)$$

The combination of the distribution functions in the square brackets is a very general construction, which repeats itself in higher orders in γ . Thanks to the energy delta-functions incorporated in the $\Delta(x, p)$ symbols and the "magic" identity:

$$\coth(a)\coth(b) + 1 = \coth(a+b)(\coth(a) + \coth(b)) \quad (6.59)$$

the collision integral is identically nullified by the equilibrium Bose distribution $F(\mathbf{r}, t, \mathbf{k}, \epsilon) = F^{\text{eq}}(\epsilon) = \coth(\epsilon - \mu)/2T$, where T and μ are yet unspecified temperature and chemical potential. For real bosons, due to the requirement that F is an odd function of energy, one has to choose $\mu = 0$. As explained after Eq. (6.47), any function $F = F(\epsilon)$ also nullifies the kinetic term in a stationary situation. As a result, the thermal equilibrium distribution function $F^{\text{eq}}(\epsilon)$ solves the kinetic equation. Such a solution is (locally) stable for any temperature (the latter is determined either by an external reservoir, or, for a closed system, from the conservation of total energy). Since the equilibrium distribution obviously nullifies both left- and right-hand sides of Eq. (6.35) the exact equilibrium self-energy satisfies $\Sigma^K = \coth(\epsilon/2T) [\Sigma^R - \Sigma^A]$. Since the bare Green functions obey the same relation, Eq. (2.48), one concludes that in thermal equilibrium the exact dressed Green function satisfies

$$D^K(\mathbf{r}, \mathbf{k}, \epsilon) = \coth \frac{\epsilon}{2T} (D^R(\mathbf{r}, \mathbf{k}, \epsilon) - D^A(\mathbf{r}, \mathbf{k}, \epsilon)). \quad (6.60)$$

This is the statement of the fluctuation-dissipation theorem (FDT). Its consequence is that in equilibrium the Keldysh component does not contain any additional information with respect to the retarded one. Therefore, the Keldysh technique may be, in principle, substituted by a more compact construction - the Matsubara formalism. The latter does not work, of course,

away from equilibrium. Notice that the Green functions may still be space dependent, since the equilibrium implies only stationarity, but not translational invariance in space.

To make progress away from equilibrium, one needs to restrict the two-point function F to the mass-shell function $\tilde{F}$ according to Eq. (6.53). This is possible due to the fact that $\Delta(x, p - q)$ and $\Delta(x, q)$ are sharply peaked at $\epsilon - \omega = \pm\omega_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}$ and $\omega = \pm\omega_{\mathbf{q}}$, while the external argument is to put $\epsilon = \omega_{\mathbf{k}} > 0$. Once the distribution functions are restricted to the "mass-shell," the energy dependence in Eq. (6.58) is explicitly specified by Eqs. (6.53) and (6.57). Thus, one can perform the ω -integration explicitly with the help of the delta-functions and find for the collision integral

$$\begin{aligned}
I^{\text{coll}}[\tilde{F}(\mathbf{k})] = & \frac{\pi\gamma^2}{16\omega_{\mathbf{k}}} \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{\omega_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}\omega_{\mathbf{q}}} \\
& \times \left\{ \delta(\omega_{\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{q}} - \omega_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}) [\tilde{F}(\mathbf{k}-\mathbf{q})\tilde{F}(\mathbf{q}) + 1 - \tilde{F}(\mathbf{k})(\tilde{F}(\mathbf{k}-\mathbf{q}) + \tilde{F}(\mathbf{q}))] \right. \\
& + \delta(\omega_{\mathbf{k}} + \omega_{\mathbf{q}} - \omega_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}) [\tilde{F}(\mathbf{k}-\mathbf{q})\tilde{F}(-\mathbf{q}) - 1 + \tilde{F}(\mathbf{k})(\tilde{F}(\mathbf{k}-\mathbf{q}) - \tilde{F}(-\mathbf{q}))] \\
& \left. + \delta(\omega_{\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{q}} + \omega_{\mathbf{q}-\mathbf{k}}) [\tilde{F}(\mathbf{q}-\mathbf{k})\tilde{F}(\mathbf{q}) - 1 - \tilde{F}(\mathbf{k})(\tilde{F}(\mathbf{q}-\mathbf{k}) - \tilde{F}(\mathbf{q}))] \right\} \quad (6.61)
\end{aligned}$$

where we have suppressed slow space-time argument $\mathbf{r}, t$ in the distribution functions $\tilde{F}(\mathbf{r}, t, \mathbf{k}) \rightarrow \tilde{F}(\mathbf{k})$. There are three types of process allowed by energy conservation. To appreciate the structure of the corresponding terms it is convenient to express their rates through the boson occupation number $n_{\mathbf{q}}$ related to the distribution function as $\tilde{F}(\mathbf{q}) \approx 2n_{\mathbf{q}} + 1$.³ Then the rate of the first process is proportional to $[n_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}n_{\mathbf{q}} - n_{\mathbf{k}}(n_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} + n_{\mathbf{q}} + 1)]$. It states that the state $\mathbf{k}$ may be populated due to the merging of particles from states $\mathbf{q}$ and $\mathbf{k} - \mathbf{q}$ and depopulated due to stimulated emission of $\mathbf{k} - \mathbf{q}$ and $\mathbf{q}$ phonons, or spontaneous emission. The rate of the second process is proportional to $[n_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}(n_{-\mathbf{q}} + n_{\mathbf{k}} + 1) - n_{\mathbf{k}}n_{-\mathbf{q}}]$. Here the state $\mathbf{k}$ may be populated due to stimulated or spontaneous decay of a higher energy state $\mathbf{k} - \mathbf{q}$ and depopulated by merging with a particle in a state $-\mathbf{q}$. Finally, the rate of the third process is proportional to $[n_{\mathbf{q}}(n_{\mathbf{q}-\mathbf{k}} + n_{\mathbf{k}} + 1) - n_{\mathbf{k}}n_{\mathbf{q}-\mathbf{k}}]$ and the physics is the same as in the second process with states $\mathbf{q}$ and $\mathbf{k} - \mathbf{q}$ interchanged.

Within the mass-shell approximation the equilibrium solution of the kinetic equation (6.61) takes the form $\tilde{F}^{\text{eq}}(\mathbf{r}, \mathbf{k}) = \coth \omega_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})/2T$, which is, in general, a function of coordinates and momenta. Since on the mass-shell $\epsilon = \omega_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$, this is consistent with $F^{\text{eq}}(\mathbf{r}, \mathbf{k}, \epsilon) = \coth \epsilon/2T$. The latter statement is exact, while the mass-shell one is only an approximation valid for well-defined quasiparticles.

For the dispersion relation of the quantum membrane $\omega_{\mathbf{k}} = \sqrt{\omega_0^2 + \kappa \mathbf{k}^4}$, the energy conservation law $\omega_{\mathbf{k}} = \omega_{\mathbf{q}} + \omega_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}$ may be satisfied for $k > k_c$, where $k_c^4 = 4\omega_0^2/\kappa$. For smaller momenta $k < k_c$ the cubic nonlinearity alone does not provide relaxation of the distribution function. Therefore, it does not lead to thermalization if the resulting temperature is too small ($T \lesssim 2\omega_0$). On the other hand, if a high-energy $k \gg k_c$ mode is excited, it decays into $\mathbf{q}$ and $\mathbf{k} - \mathbf{q}$ modes with almost perpendicular momenta. To find the corresponding relaxation time we restrict the collision integral to the spontaneous emission part in the first term in Eq. (6.61) and find $\partial_t n_{\mathbf{k}} = -n_{\mathbf{k}}/\tau_{\mathbf{k}}$, where

$$\frac{1}{\tau_{\mathbf{k}}} = \frac{\pi\gamma^2}{8\omega_{\mathbf{k}}} \sum_{\mathbf{q}} \frac{\delta(\omega_{\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{q}} - \omega_{\mathbf{k}-\mathbf{q}})}{\omega_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}\omega_{\mathbf{q}}} = \frac{3}{128\pi} \frac{\gamma^2}{\kappa^2 k^5} \ln \left(\frac{k}{k_c} \right), \quad (6.62)$$

for $d = 3$.

Finally, let us discuss approximations involved in the Wigner transformations. It is a justified procedure as long as $\delta \mathbf{k} \delta \mathbf{r} \gg 1$, where $\delta \mathbf{k}$ is a characteristic microscopic scale of the momentum

dependence of the distribution function, while $\delta\mathbf{r}$ is a characteristic scale of its spatial variations. One may ask if there is a similar requirement in the time domain: $\delta\epsilon\delta t \gg 1$, with $\delta\epsilon$ and δt being the characteristic energy and the time scale, respectively. Such a requirement is very demanding, since typically $\delta\epsilon \approx T$ and at low temperature it would allow us to treat only very slow processes with $\delta t \gg 1/T$. Fortunately, this is not the case. Because of the peaked structure of $\Delta(\mathbf{k}, \epsilon)$, the energy argument ϵ is locked to $\tilde{\omega}_{\mathbf{k}}$ (i.e. to the "mass-shell") and does not have its own dynamics as long as the peak is sharp.

The actual criterion is therefore that $\delta\epsilon$ is much larger than the width of the peak in $\Delta(\mathbf{k}, \epsilon)$. The latter is the inverse quasiparticle lifetime, $1/\tau_{qp}$, and therefore the actual condition is $\tau_{qp} \gg 1/T$. This condition is indeed satisfied in systems with well-defined quasiparticles. Notice that this is exactly the same condition that we employed to justify the restriction of the distribution function to the mass-shell; see Eq. (6.49) and the discussion following it. This is thus a necessary condition for the applicability of the quasi-classical kinetic equation.

12.1.9 6.9 Problems

6.9.1 Diffusion in Energy Space

Consider complex bosons under the influence of some (classical) high-frequency perturbation. For example, one may think about charged particles subject to a spatially uniform ac electric field $\mathbf{E}^{cl}(t) = \partial_t \mathbf{A}^{cl}(t)$. The corresponding interaction vertex with the complex bosons is $\sum_{\mathbf{k}} [\bar{\phi}_{\mathbf{k}}^{cl} (\mathbf{k} \cdot \mathbf{A}^{cl}) \phi_{\mathbf{k}}^q + \text{c.c.}]$. Let us also assume that the distribution function remains isotropic in the momentum space (possibly due to some elastic scattering mechanism leading to a fast isotropization of momentum directions, but not altering particles' energy). By this reason we'll suppress all momentum indexes and focus exclusively on time and energy arguments.

Calculate the self-energy components in the second-order perturbation theory in the ac field. Show that $\Sigma_{t,t'}^{R,A,K} \propto \mathbf{A}(t) G_{t,t'}^{R,A,K} \mathbf{A}(t')$ (index cl is suppressed hereafter). Employ that $G^K = G^R \circ F - F \circ G^A$ and calculate the Wigner transform of the collision integral $I^{coll}[F] \propto \Sigma^K - (\Sigma^R \circ F - F \circ \Sigma^A)$ with the understanding that $\mathbf{A} = \mathbf{A}(t)$, $G^{R,A} = G^{R,A}(\epsilon)$, and $F = F(t, \epsilon)$.

One can now average the resulting collision integral over the fast variations of the applied ac field. Use the fact that $\langle \mathbf{A} \partial_t \mathbf{A} \rangle = 0$ and $\langle \partial_t \mathbf{A} \partial_t \mathbf{A} \rangle = -\langle \mathbf{A} \partial_t^2 \mathbf{A} \rangle = \langle \mathbf{E}^2 \rangle$, where angular brackets denote time averaging, to show that the distribution function obeys the diffusion equation in the energy direction

$$\partial_t F(t, \epsilon) = \partial_\epsilon [\mathcal{D}(\epsilon) \partial_\epsilon F(t, \epsilon)] \quad (6.63)$$

where the energy-dependent diffusion coefficient $\mathcal{D}(\epsilon) \propto \langle \mathbf{E}^2 \rangle \text{Im } G^A(\epsilon)$. Verify that $\mathcal{D}(\epsilon) > 0$. The current in energy space is given by $\mathcal{D} \partial_\epsilon F$, and the only stationary state with no current is the infinite temperature distribution with $\partial_\epsilon F = 0$. Equation (6.63) is useful for describing transient regimes and energy absorption rate; see Section 14.9 for more details.

12.2 Dynamics of Collisionless Plasma

In this chapter we consider a two-component gas of charged particles interacting through long-ranged Coulomb interactions. In most cases those are electrons and ions. For the sake of illustration, however, we shall treat both of them as being bosons. Since we focus on the high-temperature classical limit, the underlying quantum statistics is of almost no importance. We use this model to introduce collective modes, collisionless Landau damping, random phase approximation, and kinetics of particles coupled to the collective modes.

⁰³ As discussed in the footnote after Eq. (6.49), this relation is only approximate, valid to the leading order in $(\delta\tilde{\epsilon}\tau_{qp})^{-1}$.

12.2.1 7.1 Plasma Action

Consider a two-component gas of oppositely charged bosonic particles with masses m_e and m_i . We shall call them "electrons" (e) and "ions" (i), with the understanding that the fermionic nature of one or both of them may be easily incorporated into the same scheme; see Chapter 10 and especially a remark at the end of Section 10.5. First, we focus not on the kinetics of the plasma itself, but rather on the dynamics of electric field waves propagating through it. To this end we start from the Keldysh action for the gas of interacting charged bosons:

$$S = \int_{\mathcal{C}} dt \left[\int d\mathbf{r} \sum_{\nu=e,i} \bar{\phi}_{\nu} \left(i\partial_t + \frac{\nabla_{\mathbf{r}}^2}{2m_{\nu}} \right) \phi_{\nu} - \frac{1}{2} \iint d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \rho(\mathbf{r}, t) U(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \rho(\mathbf{r}', t) \right], \quad (7.1)$$

where $\rho(\mathbf{r}, t) = \bar{\phi}_e(\mathbf{r}, t)\phi_e(\mathbf{r}, t) - \bar{\phi}_i(\mathbf{r}, t)\phi_i(\mathbf{r}, t)$ is the density of electrons minus that of the neutralizing ions. The Coulomb interaction potential and its Fourier transform are

$$U(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}; \quad U(\mathbf{q}) = \frac{4\pi e^2}{\mathbf{q}^2} \quad (7.2)$$

To single out the dynamics of the electric potential, we perform now the HubbardStratonovich transformation of the interaction term:

$$\begin{aligned} \exp \left\{ -\frac{i}{2} \int_{\mathcal{C}} dt \iint d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \rho(\mathbf{r}, t) U(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \rho(\mathbf{r}', t) \right\} &= e^{-\frac{i}{2} \int_{\mathcal{C}} dt \sum_{\mathbf{q}} U(\mathbf{q}) |\rho(\mathbf{q}, t)|^2} \\ &= \int \mathbf{D}[V] e^{\frac{i}{2} \int_{\mathcal{C}} dt \sum_{\mathbf{q}} ([U(\mathbf{q})]^{-1} |V(\mathbf{q}, t)|^2 - \rho^*(\mathbf{q}, t) V(\mathbf{q}, t) - V^*(\mathbf{q}, t) \rho(\mathbf{q}, t))} \\ &= \int \mathbf{D}[V] \exp \left\{ i \int_{\mathcal{C}} dt \int d\mathbf{r} \left((8\pi e^2)^{-1} [\nabla_{\mathbf{r}} V(\mathbf{r}, t)]^2 - \rho(\mathbf{r}, t) V(\mathbf{r}, t) \right) \right\} \end{aligned} \quad (7.3)$$

where we have used the fact that the operator $\mathbf{q}^2$ takes the form $-\nabla_{\mathbf{r}}^2$ in real space. This transformation is nothing but an implementation of the real variable Gaussian integral, discussed in Section 2.3. Here $V(\mathbf{r}, t)$ is a real fluctuating scalar potential defined along the closed time contour. We have introduced thus an additional auxiliary functional integral. The great advantage of this procedure is that the boson fields $\bar{\phi}_v$ and ϕ_v , where $v = e, i$, enter the transformed action only quadratically. As a result, the functional integrals over $\bar{\phi}_v$ and ϕ_v may be calculated explicitly(!), leaving us with the effective action for the scalar potential $S[V]$. The latter contains much of the information we need about dynamics of the plasma modes.

To perform the Gaussian integration over $\bar{\phi}_v$ and ϕ_v , respecting the regularization, we need to go through the procedure described in Chapters 2 and 6. To this end we first split the fields into components residing on the forward and backward branches of the contour and then perform the Keldysh rotation according to Eq. (2.39) for the complex fields $\bar{\phi}_v$ and ϕ_v and according to Eq. (2.61) for the real field V . This brings the Gaussian ϕ_v -action to the form $\sum_v (S_0 [\bar{\phi}_v, \phi_v] \pm S_V [\bar{\phi}_v, \phi_v])$, given by Eqs. (6.4) and (2.66) correspondingly. (Here the plus sign corresponds to electrons and the minus sign to the ions.) The functional integrals may now be performed exactly. This leads to the inverse determinants of the corresponding quadratic forms; compare Eq. (2.68). Rewriting each determinant as the trace of the logarithm, one finds for the effective action of the scalar potential $V(\mathbf{r}, t)$

$$S[V] = \int d\mathbf{x} \left[-\frac{1}{4\pi e^2} (V^{\text{cl}}, V^{\text{q}}) \begin{pmatrix} 0 & \nabla_{\mathbf{r}}^2 \\ \nabla_{\mathbf{r}}^2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V^{\text{cl}} \\ V^{\text{q}} \end{pmatrix} + i \sum_{v=i,e} \text{Tr} \ln (\hat{G}_{0v}^{-1} \mp \hat{V}) \right] \quad (7.4)$$

where the $\hat{V}(\mathbf{r}, t)$ matrix is given by Eq. (2.67). For the fermionic plasma, we would obtain a minus sign in front of the trace logarithm, since the corresponding fermionic integral is given by the determinant of the quadratic form; see Chapter 10. It is important to notice that both species of particles interact with the same collective fields $V^{\text{cl},q}(x)$.

We shall first focus on the classical fluctuationless dynamics of the scalar potential. To this end one needs to expand the action $S[V]$ up to first order in the quantum component of the potential $V^q(\mathbf{r}, t)$. The classical component V^{cl} is not assumed to be small at this stage. Notice that there is no zeroth-order term in the expansion of $\text{Tr} \ln (\hat{G}_{0v}^{-1} \mp \hat{V})$. Indeed, in the absence of V^q the properly regularized ϕ -integral is unity, due to the normalization identity (2.63), even in the presence of an arbitrary V^{cl} . The first-order term in V^q takes the form

$$S[V] = -2 \int dx V^q(x) \left(\frac{\nabla_{\mathbf{r}}^2 V^{\text{cl}}(x)}{4\pi e^2} + \langle \rho(x) \rangle \right), \quad (7.5)$$

where

$$\langle \rho(x) \rangle = \frac{i}{2} \text{Tr} \left\{ \hat{G}_e(x, x; V^{\text{cl}}) - \hat{G}_i(x, x; V^{\text{cl}}) \right\}$$

Here $\hat{G}_v(x, x'; V^{\text{cl}})$ are the operators inverse to $\hat{G}_{0v}^{-1} \mp V^{\text{cl}} \hat{\sigma}_1$. They are therefore solutions of the Dyson equations

$$\left[\hat{G}_{0v}^{-1} \mp V^{\text{cl}} \hat{\sigma}_1 \right] \circ \hat{G}_v = \hat{1} \quad (7.6)$$

which possess the causality structure, Eq. (2.51). Rewriting the Dyson equation for the components of the Green functions, one finds for its retarded parts (cf. Eq. (6.20))

$$\left(i\partial_t^{\text{R}} + \frac{1}{2m_v} \nabla_{\mathbf{r}}^2 \mp V^{\text{cl}}(x) \right) \circ G_v^{\text{R}}(x, x'; V^{\text{cl}}) = \delta(x - x') \quad (7.7)$$

The advanced components obey the same equations with advanced regularization of the time derivative $\partial_t^{\text{R}} \rightarrow \partial_t^{\text{A}}$. We shall assume that the classical electric potential $V^{\text{cl}}(x)$ is a slow function of coordinates on the scale $1/k_T$, where k_T is the characteristic thermal momentum of particles. Under this assumption the Dyson equation is solved using WT, leading to $G_v^{\text{R}}(x, p; V^{\text{cl}}) = [\epsilon - \mathbf{k}^2/2m_v \mp V^{\text{cl}}(x) + i0]^{-1}$. Parametrizing the Keldysh components of the Green functions, by the two-point distribution functions $F_v(x, x')$, going to their WT $F_v(x, p)$, and restricting the latter to the "mass-shells" $\epsilon_v(\mathbf{k}, x) = \mathbf{k}^2/2m_v \pm V^{\text{cl}}(x)$, one arrives at the two kinetic equations for electrons and ions (cf. Eq. (6.51)):

$$\left[\partial_t^{\text{R}} + \mathbf{v}_{\mathbf{k}v} \nabla_{\mathbf{r}} \mp \nabla_{\mathbf{r}} V^{\text{cl}}(\mathbf{r}, t) \nabla_{\mathbf{k}} \right] \tilde{F}_v(\mathbf{r}, t, \mathbf{k}) = 0 \quad (7.8)$$

where $\mathbf{v}_{\mathbf{k}v} = \mathbf{k}/m_v$. We indicated the retarded regularization of the time derivative in the kinetic term here. Indeed, the way we derived the kinetic equation (cf. Eq. (6.23)) was by acting with the retarded (advanced) operator on the distribution function from the left (right). One can show that both of these operations imply the ∂_t^{R} operator acting from the left. If the distribution function approaches a timeindependent constant at the boundary of the phase-space $\mathbf{r}, \mathbf{k} \rightarrow \infty$, the total number of particles of each sort is conserved, $\partial_t \int d\mathbf{r} \sum_{\mathbf{k}} \tilde{F}_v(\mathbf{r}, t, \mathbf{k}) = 0$. It must be fixed by the condition of the global charge neutrality

$$\int d\mathbf{r} \sum_{\mathbf{k}} \left[\tilde{F}_e(\mathbf{r}, t, \mathbf{k}) - \tilde{F}_i(\mathbf{r}, t, \mathbf{k}) \right] = 0 \quad (7.9)$$

The plasma is called collisionless because of the absence of the collision integrals on the right-hand sides of Eq. (7.8). This is a consequence of our assumption that the $V^{\text{cl}}(x)$ is a

slow field. In principle, it also contains fast components, which need to be integrated out. Then the corresponding Dyson equations acquire self-energy parts, originating from such fast components of the potential. The self-energy in turn leads to the collision integral. The effect of such collisions is small, as long as the plasma is sufficiently dilute, $e^2 \rho_0^{1/3} \ll T$, where T is a characteristic kinetic energy of the particles.

Provided solutions of Eqs. (7.7) and (7.8) are known, one may express $\langle \rho(x) \rangle$ through them to obtain a closed expression for the $S[V]$ effective action. This way, one finds

$$\langle \rho(x) \rangle = \frac{i}{2} [G_e^K(x, x; V^{\text{cl}}) - G_i^K(x, x; V^{\text{cl}})] = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} [\tilde{F}_e(x, \mathbf{k}) - \tilde{F}_i(x, \mathbf{k})], \quad (7.10)$$

where we have used the fact that after WT, $G_v^K = (G_v^R - G_v^A) F_v$ and also $G_v^R - G_v^A = -2\pi i \delta(\epsilon - \mathbf{k}^2/2m_v \mp V^{\text{cl}})$ to perform the energy integration.

Once we know to express all the terms in the $S[V]$ action (7.5) through the solutions of the collisionless kinetic equations (7.8), we can close the loop and write down the equation of motion for the scalar potential $V^{\text{cl}}(x)$. To this end notice that the integral over $V^q(x)$ of the exponentiated action (7.5) enforces the functional delta-function of the expression in the round brackets on the right-hand side of Eq. (7.5). This is nothing but the Poisson equation for the classical component of the scalar potential, which in view of Eq. (7.10) takes the form

$$\nabla_{\mathbf{r}}^2 V^{\text{cl}}(x) = -2\pi e^2 \sum_{\mathbf{k}} [\tilde{F}_e(x, \mathbf{k}) - \tilde{F}_i(x, \mathbf{k})]. \quad (7.11)$$

(In our notation V has the dimensionality of energy, i.e. it is e times the electric potential.) The collisionless kinetic equations (7.8), which are coupled through the common potential V^{cl} , obeying the Poisson equation (7.11), are called Vlasov [117] equations. As we have shown here, these equations correspond to the approximation where one keeps only the linear term in V^q . In the following sections we shall also retain terms quadratic in V^q to incorporate fluctuation effects. First, let us investigate Vlasov equations.

12.2.2 7.2 Plasmons and Landau Damping

We shall focus first on the linearized Vlasov equations, assuming that deviations from the equilibrium distribution $\tilde{F}_v^{(1)}(x, \mathbf{k}) = \tilde{F}_v(x, \mathbf{k}) - \tilde{F}_v^{\text{eq}}(\omega_{\mathbf{k}v})$ are small at all times. Here $\omega_{\mathbf{k}v} = \mathbf{k}^2/2m_v$. According to the Poisson equation (7.11), this also implies smallness of the potential V^{cl} . Therefore, in the last term in the kinetic equations (7.8) one may disregard deviations of the distribution function from the equilibrium one. As a result, one obtains the homogeneous linear system of equations

$$\begin{aligned} [\partial_t^R + \mathbf{v}_{\mathbf{k}v} \nabla_{\mathbf{r}}] \tilde{F}_v^{(1)}(x, \mathbf{k}) &= \pm \nabla_{\mathbf{k}} \tilde{F}_v^{\text{eq}}(\omega_{\mathbf{k}v}) \nabla_{\mathbf{r}} V^{\text{cl}}(x); \\ \nabla_{\mathbf{r}}^2 V^{\text{cl}}(x) &= -2\pi e^2 \sum_{\mathbf{k}} [\tilde{F}_e^{(1)}(x, \mathbf{k}) - \tilde{F}_i^{(1)}(x, \mathbf{k})]. \end{aligned}$$

We perform now the Fourier transformation from $x = \mathbf{r}, t$ to $q = \mathbf{q}, \omega$, find $\tilde{F}_v^{(1)}(\mathbf{q}, \omega, \mathbf{k}) = \mp V^{\text{cl}}(q) \mathbf{q} \nabla_{\mathbf{k}} \tilde{F}_v^{\text{eq}} / (\omega + i0 - \mathbf{v}_{\mathbf{k}v} \mathbf{q})$ from the kinetic equation, and substitute it into the Poisson equation. A nontrivial solution of the latter exists only if the following condition is satisfied:

$$\frac{\mathbf{q}^2}{4\pi e^2} + \sum_{v=e,i} \Pi_v^R(\mathbf{q}, \omega) = 0 \quad (7.12)$$

where

$$\Pi_\nu^R(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\mathbf{q} \nabla_{\mathbf{k}} F^{\text{eq}}(\omega_{\mathbf{k}\nu})}{\omega + i0 - \mathbf{v}_{\mathbf{k}\nu} \mathbf{q}} = \sum_{\mathbf{k}} \frac{\mathbf{q} \nabla_{\mathbf{k}} n_B(\omega_{\mathbf{k}\nu})}{\omega + i0 - \mathbf{v}_{\mathbf{k}\nu} \mathbf{q}} \quad (7.13)$$

is the retarded component of the polarization matrix. Here we took into account that $\tilde{F}^{\text{eq}}(\omega_{\mathbf{k}}) = 2n_B(\omega_{\mathbf{k}}) + 1$ and indicated the retarded regularization of the pole, originating from the nature of the ∂_t operator in the kinetic equations. Solutions of Eq. (7.12), $\omega = \omega(\mathbf{q})$, are dispersion relations of the plasma modes, namely combined oscillations of the electric potential and the two distribution functions.

Let us first disregard dynamics of the ions, assuming them to be much heavier than the electrons, $m_i \gg m_e$. In this limit one may put $\Pi_i^R \rightarrow 0$. Focusing on the high-frequency dynamics, one may expand the denominator of Π_e^R in powers of $\mathbf{v}_{\mathbf{k}} \mathbf{q} / \omega$. Performing integration by parts and employing $\nabla_{\mathbf{k}}(\mathbf{v}_{\mathbf{k}} \mathbf{q}) = \mathbf{q} / m_e$, one finds

$$\Pi_e^R(\mathbf{q}, \omega) = -\frac{\mathbf{q}^2}{m_e \omega^2} \sum_{\mathbf{k}} n_B(\omega_{\mathbf{k}}) \left[1 + \frac{3(\mathbf{v}_{\mathbf{k}} \mathbf{q})^2}{\omega^2} + \dots \right].$$

Employing the fact that the average electron density is given by $\rho_0 = \sum_{\mathbf{k}} n_B(\omega_{\mathbf{k}})$ and defining the plasma frequency as $\omega_p = \sqrt{4\pi e^2 \rho_0 / m_e}$, one finds from Eq. (7.12)

$$\omega^2 = \omega_p^2 \left[1 + \frac{\langle \mathbf{v}_{\mathbf{k}}^2 \rangle \mathbf{q}^2}{\omega^2} + \dots \right]$$

where $\langle \mathbf{v}_{\mathbf{k}}^2 \rangle = \sum_{\mathbf{k}} n_B(\omega_{\mathbf{k}}) \mathbf{v}_{\mathbf{k}}^2 / \rho_0$ is the electron mean square thermal velocity. Solving this equation yields the dispersion relation of the longitudinal Langmuir mode also known as the plasmon:

$$\omega_p(\mathbf{q}) = \omega_p \left(1 + \frac{\langle \mathbf{v}_{\mathbf{k}}^2 \rangle \mathbf{q}^2}{2\omega_p^2} + \dots \right) \quad (7.14)$$

At first sight, the expansion over $\mathbf{v}_{\mathbf{k}} \mathbf{q} / \omega$ seems to be perfectly justified at small enough momenta, $q \ll \omega_p / \sqrt{\langle \mathbf{v}_{\mathbf{k}}^2 \rangle}$. However, as was realized by Landau [119], the actual dispersion contains a small negative imaginary part, implying damping of the plasma oscillations. It originates from the retarded regularization of the pole in Eq. (7.13) and the relation

$$\text{Im} \frac{1}{\omega + i0 - \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \mathbf{q}} = -\pi \delta(\omega - \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \mathbf{q}) \quad (7.15)$$

For the case of the classical plasma, where $n_B(\omega_{\mathbf{k}}) = e^{-(\omega_{\mathbf{k}} - \mu_e)/T_e}$ is the Maxwell distribution, one finds

$$\Pi_e^R(\mathbf{q}, \omega) = -\frac{\mathbf{q}^2 \rho_0}{m_e \omega^2} [1 + \dots] - i\pi \rho_0 q \frac{\sum_{k_x} \delta(\omega - k_x q / m_e) \partial_{k_x} e^{-k_x^2 / 2m_e T_e}}{\sum_{k_x} e^{-k_x^2 / 2m_e T_e}} \quad (7.16)$$

where k_x is the direction along the $\mathbf{q}$ vector. Performing the integrations one finds for $q\kappa \ll 1$, where $\kappa = \sqrt{T_e / 4\pi e^2 \rho_0}$ is the Debye-Huckel screening length,

$$\tilde{\omega}_p(\mathbf{q}) = \omega_p \left(1 + \frac{3}{2}(q\kappa)^2 + \dots \right) - i\Gamma(\mathbf{q}); \quad \Gamma(\mathbf{q}) = \sqrt{\frac{\pi}{8}} \frac{\omega_p}{(q\kappa)^3} e^{-\frac{1}{2(q\kappa)^2}}. \quad (7.17)$$

The Landau damping rate Γ is exponentially small at small q . It is not surprising, thus, that the expansion in powers of $\mathbf{q}^2$, Eq. (7.14), missed the effect. As apparent from the derivation, the fact that the plasmon is damped (rather than pumped) is due to the fact that $\partial_{k_x} n_B < 0$ at $v_x = \omega_p / q$. That is, there are more electrons moving slower than the phase velocity of the plasma wave than there are moving faster. As a result, more electrons absorb energy from the

plasmon than supply it. If an inverted population is created with $\partial_{k_x} n_B > 0$, it may lead to an instability of the plasma oscillations.

12.2.3 7.3 Acoustic Modes in Plasma

A closer look at Eq. (7.12) shows that it has more than one solution. In Fig. 7.1 we plotted $\text{Re} \Pi_e^R(\mathbf{q}, \omega)$ as a function of ω at some fixed $\mathbf{q} \ll \kappa^{-1}$. As we saw earlier, at large frequencies it is negative and is given by $-\mathbf{q}^2 \rho_0 / (m_e \omega^2)$. Yet at $\omega = 0$ it is positive and given by $-m_e \sum_{\mathbf{k}} \partial_{k_x} n_B / k_x = \rho_0 / T_e$. There is a point where it changes sign, and for small q there is a solution of the dispersion equation (7.12) close to this point. It is called the electron acoustic mode, since at small q its dispersion relation is linear, $\omega_{ea}(\mathbf{q}) = v_{ea} q$. The corresponding velocity v_{ea} is found from the condition $\text{Re} \Pi_e^R(\mathbf{q}, v_{ea} q) = 0$, namely $\int dk \partial_{k_x} n_B / (m_e v_{ea} - k_x) = 0$,

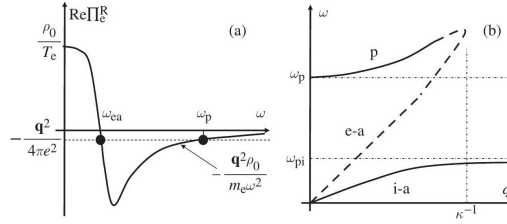


Figure 7.1 (a) Real part of the retarded polarization operator $\Pi_e^R(\mathbf{q}, \omega)$ versus energy ω . Two solutions of Eq. (7.12) correspond to the plasma mode ω_p and the electron acoustic mode ω_{ea} . (b) Collective modes of plasma oscillations: p, plasmons; e-a, electron acoustic; i-a, ion acoustic. Dashed lines show overdamped modes.

where the integral is understood as the principal value. For the Maxwell distribution this yields $v_{ea} \approx 1.3 \sqrt{T_e/m_e}$, that is, it is of the order of the electron thermal velocity [120]. At $\omega \approx \omega_{ea}$ one estimates $\text{Re} \Pi_e^R(\mathbf{q}, \omega) \sim (1 - \omega/v_{ea} q) \rho_0/T$; see Fig. 7.1. Let us look, however, at the imaginary part. With the help of Eq. (7.15) one finds $\text{Im} \Pi_e^R(\mathbf{q}, v_{ea} q) \sim m \rho_0 \partial_{k_x} n_B|_{k_x=m v_{ea}} / \sqrt{m T} \sim \rho_0/T$. Demanding $\Pi_e^R(\mathbf{q}, \omega) = -q^2 / (4\pi e^2) \approx 0$, one finds that the Landau damping of the electron acoustic mode is of the same order as its frequency. The mode is therefore overdamped and the corresponding oscillations can't be excited.

One can have an underdamped acoustic mode in the plasma, if one allows for the heavy ion motion $m_i \gg m_e$ and assumes that the electronic temperature is much higher than the ionic one, $T_e \gg T_i$. Then in the frequency range $q \sqrt{T_i/m_i} \ll \omega \ll q \sqrt{T_e/m_e}$ the electron motion is adiabatic and one may approximate $\text{Re} \Pi_e^R(\mathbf{q}, \omega) \approx \rho_0/T_e$. From the point of view of the ions, this is still a very high frequency and the ionic polarization operator is given by $\text{Re} \Pi_i^R(\mathbf{q}, \omega) \approx -\mathbf{q}^2 \rho_0 / (m_i \omega^2)$. For the real part of the dispersion equation (7.12) one thus finds

$$\frac{\mathbf{q}^2}{4\pi e^2} + \frac{\rho_0}{T_e} - \frac{\mathbf{q}^2 \rho_0}{m_i \omega^2} = 0$$

As a result one obtains the following dispersion relation of the ion acoustic mode:

$$\omega_{ia}^2(\mathbf{q}) = \omega_{pi}^2 \frac{\mathbf{q}^2}{\mathbf{q}^2 + \kappa^{-2}}, \quad (7.18)$$

where $\omega_{pi} = \sqrt{4\pi e^2 \rho_0 / m_i} \ll \omega_p$ is the ionic plasma frequency. At small wavenumbers $\kappa q \ll 1$ the dispersion relation is acoustic, $\omega_{ia}(\mathbf{q}) = v_{ia} q$, where the ion-acoustic velocity is $v_{ia} = \sqrt{T_e/m_i}$. The sound velocity is determined by the electron temperature and the ionic mass. The Landau damping rate of the ion acoustic mode is evaluated in problem 7.7.1. There it is shown that the mode is underdamped if electronic temperature greatly exceeds the ionic one, $T_e \gg T_i$. This is indeed frequently the case in non-equilibrium plasmas, where electrons are quickly heated by an external field, while ions are slow to adjust.

In equilibrium, $T_e = T_i$ the damping rate is basically the same as the mode frequency and it is thus overdamped. The modes of the two-component plasma are schematically summarized in Fig. 7.1(b).

12.2.4 7.4 Random Phase Approximation

We shall develop now an alternative approach to the linearized dynamics of the plasma modes, which will allow us to discuss their fluctuations as well. To this end we go back to the effective action (7.4) and expand it to second order in both V^{cl} and V^{q} field components. To this end it is useful to notice that, due to the normalization identity $Z = 1$, one has $\det [\hat{G}_{0v}^{-1}] = 1$ and therefore $\text{Tr} \ln (\hat{G}_{0v}^{-1} \mp \hat{V}) = \text{Tr} \ln (1 \mp \hat{G}_{0v} \hat{V}) = \text{Tr} \ln (1 \mp \hat{G}_{0v} (\hat{\sigma}_1 V^{\text{cl}} + V^{\text{q}}))$. One expects that the cross-term $\sim V^{\text{q}} V^{\text{cl}}$ in the expansion contains the physics discussed in Sections 7.2 and 7.3.

On the other hand, the quadratic term in V^{q} is going to be responsible for the thermal fluctuations of the plasma modes. Action (7.4) expanded to second order may be written as a quadratic form:

$$S[V] = \iint dx \, dx' \vec{V}(x)^{\text{T}} [\hat{U}_{\text{RPA}}(x, x')]^{-1} \vec{V}(x') \quad (7.19)$$

Its kernel is known as the (inverse) random phase approximation (RPA) interaction potential and is given by

$$\begin{aligned} [\hat{U}_{\text{RPA}}(x, x')]^{-1} &= \hat{U}^{-1} + \hat{\Pi}_{\text{e}} = \frac{\delta(x - x')}{4\pi e^2} \begin{pmatrix} 0 & -\nabla_{\mathbf{r}'}^2 \\ -\nabla_{\mathbf{r}}^2 & 0 \end{pmatrix} \\ &+ \begin{pmatrix} 0 & \Pi_{\text{e}}^{\text{A}}(x, x') \\ \Pi_{\text{e}}^{\text{R}}(x, x') & \Pi_{\text{e}}^{\text{K}}(x, x') \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (7.20)$$

From now on we assume that ions are infinitely heavy and disregard their dynamics (this implies that $\hat{\Pi}_{\text{i}} \rightarrow 0$), focusing exclusively on electrons. The electron polarization matrix $\hat{\Pi}_{\text{e}}(x, x')$ has the standard causality structure of a bosonic self-energy; see Eq. (6.17). Its retarded component is given by

$$\Pi_{\text{e}}^{\text{R}}(x, x') = - \left. \frac{\delta \langle \rho(x) \rangle}{\delta V^{\text{cl}}(x')} \right|_{V^{\text{cl}}=0} = \frac{1}{2i} \text{Tr} \left\{ \hat{G}_0(x, x') \hat{\sigma}_1 \hat{G}_0(x', x) \right\}, \quad (7.21)$$

where the first equality here follows from the comparison of Eqs. (7.20) and (7.5), while the second is a result of the expansion of $\text{Tr} \ln(1 - \hat{G}\hat{V})$ to second order in $\hat{V}$. This is a response function of the average density at a space-time point x on a perturbation of the classical external potential at a point x' . On physical grounds one expects such a response to be retarded, that is, $\Pi_{\text{e}}^{\text{R}}(x, x') \sim \theta(t - t')$. This is the reason for the superscript R. Indeed, straightforward matrix algebra leads to

$$\Pi_{\text{e}}^{\text{R}}(x, x') = \frac{1}{2i} (G_0^{\text{K}}(x, x') G_0^{\text{A}}(x', x) + G_0^{\text{R}}(x, x') G_0^{\text{K}}(x', x)), \quad (7.22)$$

where the retarded nature of $\Pi_{\text{e}}^{\text{R}}(x, x')$ is apparent from the causality properties of the Green functions. To make the structure of the action (7.19) symmetric, we have also introduced $\Pi_{\text{e}}^{\text{A}}(x, x') \sim \theta(t' - t)$. It is given by

$$\Pi_{\text{e}}^{\text{A}}(x, x') = \frac{1}{2i} \text{Tr} \left\{ \hat{G}_0 \hat{G}_0 \hat{\sigma}_1 \right\} = \frac{1}{2i} (G_0^{\text{K}}(x, x') G_0^{\text{R}}(x', x) + G_0^{\text{A}}(x, x') G_0^{\text{K}}(x', x)). \quad (7.23)$$

Finally, the Keldysh component, obtained by the expansion of the action (7.4) to second order in V^q , is

$$\begin{aligned} \Pi_e^K(x, x') = & \frac{1}{2i} \text{Tr} \left\{ \hat{G}_0(x, x') \hat{G}_0(x', x) \right\} = \frac{1}{2i} \left[G_0^K(x, x') G_0^K(x', x) \right. \\ & \left. - (G_0^R(x, x') - G_0^A(x, x')) (G_0^R(x', x) - G_0^A(x', x)) \right], \end{aligned} \quad (7.24)$$

where we have used the fact that due to causality $G_0^R(x, x') G_0^R(x', x) = 0$. (The same is true for the advanced Green functions.)

For a translationally invariant system the components of the polarization matrix $\hat{\Pi}$ can be evaluated using the Fourier transformation and the explicit form of the bare Green functions, Eq. (6.7). This way one finds

$$\Pi_e^{R(A)}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\tilde{F}_e(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \tilde{F}_e(\mathbf{k})}{\omega \pm i0 + \omega_{\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}} \quad (7.25a)$$

$$\Pi_e^K(\mathbf{q}, \omega) = i\pi \sum_{\mathbf{k}} \delta(\omega + \omega_{\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) \left[\tilde{F}_e(\mathbf{k}) \tilde{F}_e(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - 1 \right] \quad (7.25b)$$

where we employed that $G_0^K = \tilde{F}_e (G_0^R - G_0^A)$ and $G_0^R - G_0^A = -2\pi i \delta(\epsilon - \omega_{\mathbf{k}})$ to perform the energy integrations with the help of the delta-function. For an equilibrium plasma $\tilde{F}_e(\mathbf{k}) = F^{\text{eq}}(\omega_{\mathbf{k}}) = \coth(\omega_{\mathbf{k}} - \mu_e)/2T_e$ and one finds FDT relation between the components of the polarization matrix:

$$\Pi_e^K(\mathbf{q}, \omega) = \coth \frac{\omega}{2T_e} \left[\Pi_e^R(\mathbf{q}, \omega) - \Pi_e^A(\mathbf{q}, \omega) \right]. \quad (7.26)$$

Notice that, though the particle distribution function contains a finite chemical potential, μ_e , the distribution function for the real boson field V turns out to have zero chemical potential. This must be the case, of course, for a real field; see Section 6.4.

Going back to the RPA action (7.19), one notices that the fluctuations of the classical component V^{cl} of the scalar potential are especially strong if $[U_{\text{RPA}}^{-1}]^R = U^{-1} + \Pi_e^R \approx 0$. In the Fourier representation, this condition boils down to

$$\frac{\mathbf{q}^2}{4\pi e^2} + \sum_{\mathbf{k}} \frac{n_B(\omega_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) - n_B(\omega_{\mathbf{k}})}{\omega + i0 + \omega_{\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}} = 0 \quad (7.27)$$

where we substituted $F^{\text{eq}}(\omega_{\mathbf{k}}) = 2n_B(\omega_{\mathbf{k}}) + 1$. If $q \ll k_T$, where $k_T = \sqrt{T_e m_e}$ is a typical thermal momentum, one may expand $\omega_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \approx \omega_{\mathbf{k}} + \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \mathbf{q}$, while $n_B(\omega_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) \approx n_B(\omega_{\mathbf{k}}) + \mathbf{q} \nabla_{\mathbf{k}} n_B(\omega_{\mathbf{k}})$ and arrive exactly at the dispersion equation (7.12) of the plasma mode. The unexpanded version (7.27) probably offers a clearer explanation of Landau damping. Indeed, the imaginary part of the retarded polarization operator corresponds to the energy conservation delta-function $\omega_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} = \omega_{\mathbf{k}} + \omega$. Therefore it describes a real (i.e. energy-conserving) transition of a particle with an initial momentum $\mathbf{k}$, which absorbs a quantum of plasma oscillation with momentum $\mathbf{q}$ and energy $\omega = \omega_p(\mathbf{q})$ and ends up in the state $\mathbf{k} + \mathbf{q}$. For small wavevectors $\mathbf{q}$ this is only possible if the initial momentum $\mathbf{k}$ is sufficiently large, so that $\mathbf{v}_{\mathbf{k}} \approx \omega_p/q$, and thus the corresponding initial energy $\mathbf{v}_{\mathbf{k}}^2/2m_e \approx \omega_p^2/(2m_e q^2) = T_e/2(q\kappa)^2$; see Fig. 7.2. The occupation numbers of such high energy states are exponentially small, and therefore so is the number of real transitions. Of course, there are also stimulated transitions, where particles emit energy ω_p into the plasma wave. Those, however, require even higher initial particle energy and their number is correspondingly smaller (in equilibrium). The difference between stimulated emissions and absorptions is described by the factor $n_B(\omega_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) - n_B(\omega_{\mathbf{k}})$ in Eq. (7.27).

In a vicinity of the plasma frequency $\omega \approx \omega_p(\mathbf{q})$ one may use the analysis of Section 7.2 to approximate

$$\begin{aligned} [U_{\text{RPA}}^{(\text{A})}(\mathbf{q}, \omega)]^{-1} &\approx \frac{\mathbf{q}^2}{4\pi e^2} \frac{\omega^2 - \omega_p^2(\mathbf{q}) \pm 2i\Gamma(\mathbf{q})\omega}{\omega_p^2} \\ [U_{\text{RPA}}^{\text{K}}(\mathbf{q}, \omega)]^{-1} &\approx \coth \frac{\omega}{2T_e} \frac{\mathbf{q}^2}{4\pi e^2} \frac{4i\Gamma(\mathbf{q})\omega}{\omega_p^2} \approx \frac{\mathbf{q}^2}{4\pi e^2} \frac{8iT_e\Gamma(\mathbf{q})}{\omega_p^2} \end{aligned} \quad (7.28)$$

where we employed the fact that in the classical plasma $T_e \gg \omega_p$. One can now discuss the Gaussian RPA action (7.19). To this end let us introduce the longitudinal electric field $\mathbf{E} = -\nabla_{\mathbf{r}}V/e$ and rewrite the action (7.19) in terms of its complex spatial Fourier components $\mathbf{E}_{\mathbf{q}}(t) = i\mathbf{q}V(\mathbf{q}, t)/e$:

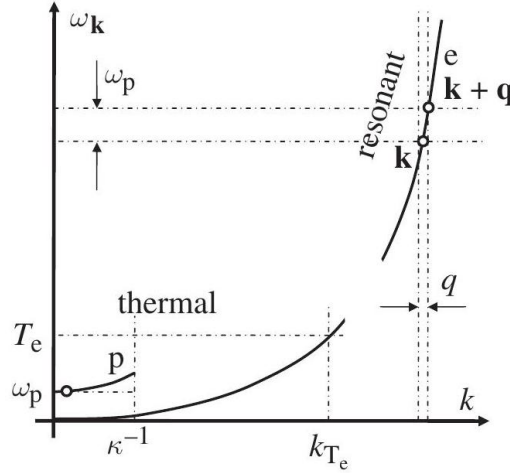


Figure 7.2 Landau damping of a plasmon with momentum $\mathbf{q}$ by the resonant transition of an electron from state $\mathbf{k}$ to state $\mathbf{k} + \mathbf{q}$. The thermal electrons determine the plasmon spectrum $\omega_p(\mathbf{q})$ but do not participate in damping.

$$S[\mathbf{E}] = \sum_{\mathbf{q}} \int \frac{dt}{4\pi\omega_p^2} (\mathbf{E}_{\mathbf{q}}^{\text{cl}}, \mathbf{E}_{\mathbf{q}}^{\text{q}})^* \begin{pmatrix} 0 & -\partial_t^2 - \omega_p^2 + 2\Gamma\partial_t \\ -\partial_t^2 - \omega_p^2 - 2\Gamma\partial_t & 8iT_e\Gamma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{E}_{\mathbf{q}}^{\text{cl}} \\ \mathbf{E}_{\mathbf{q}}^{\text{q}} \end{pmatrix} \quad (7.29)$$

Following Section 4.2, it is convenient to split the term quadratic in the quantum component, $\mathbf{E}_{\mathbf{q}}^{\text{q}}$, with the help of the Hubbard-Stratonovich transformation, using a longitudinal auxiliary field $\mathbf{f}_{\mathbf{q}}(t)$:

$$e^{-\sum_{\mathbf{q}} \int dt \frac{8T_e\Gamma}{4\pi\omega_p^2} |\mathbf{E}_{\mathbf{q}}^{\text{q}}|^2} = \int \mathbf{D}[\mathbf{f}] e^{-(4\pi\omega_p^2)^{-1} \sum_{\mathbf{q}} [(8T_e\Gamma)^{-1} |\mathbf{f}_{\mathbf{q}}|^2 - i(\mathbf{f}_{\mathbf{q}}^* \mathbf{E}_{\mathbf{q}} + \mathbf{E}_{\mathbf{q}}^* \mathbf{f}_{\mathbf{q}})]} \quad (7.30)$$

The remaining action is linear in $\mathbf{E}_{\mathbf{q}}^{\text{q}}$ and $(\mathbf{E}_{\mathbf{q}}^{\text{q}})^*$. The corresponding functional integrals result in the delta-function of the following stochastic equation of motion:

$$\ddot{\mathbf{E}}_{\mathbf{q}}^{\text{cl}} = -\omega_p^2(\mathbf{q})\mathbf{E}_{\mathbf{q}}^{\text{cl}} - 2\Gamma(\mathbf{q})\dot{\mathbf{E}}_{\mathbf{q}}^{\text{cl}} + \mathbf{f}_{\mathbf{q}}(t) \quad (7.31)$$

as well as its complex conjugate. The stochastic force on the right-hand side is Gaussian white noise with zero mean and a second moment given by

$$\langle \mathbf{f}_{\mathbf{q}}^*(t) \mathbf{f}_{\mathbf{q}'}(t') \rangle = 16\pi\omega_p^2 T_e \Gamma(\mathbf{q}) \delta_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'} \delta(t - t') \quad (7.32)$$

The fact that the variance is proportional to the damping is a manifestation of the FDT. According to Eq. (7.31) the electric field exhibits an oscillatory motion at the plasma frequency

$\omega_p(\mathbf{q})$ with viscous friction given by the Landau damping. There is also a corresponding stochastic force exciting the oscillations. In the long-time limit the fluctuations and the dissipation combined lead to a stationary probability

distribution of finding a certain electric field amplitude $|\mathbf{E}_\mathbf{q}^{\text{cl}}|$ and its time derivative $|\dot{\mathbf{E}}_\mathbf{q}^{\text{cl}}|$. Such a distribution obeys the Fokker-Planck equation, which is discussed in Chapter 4. As shown there (see Eq. (4.33)), the stationary solution of the Fokker-Planck equation, corresponding to Eqs. (7.31) and (7.32), is

$$\mathcal{P}\left(|\mathbf{E}_\mathbf{q}^{\text{cl}}|, |\dot{\mathbf{E}}_\mathbf{q}^{\text{cl}}|\right) \propto \exp\left\{-\frac{|\dot{\mathbf{E}}_\mathbf{q}^{\text{cl}}|^2 + \omega_p^2 |\mathbf{E}_\mathbf{q}^{\text{cl}}|^2}{8\pi\omega_p^2 T_e}\right\} \quad (7.33)$$

This is nothing but the classical Maxwell-Boltzmann distribution function, describing the electric field noise. The latter is induced by the thermal fluctuations of the plasma close to the plasma frequency.

12.2.5 7.5 Beyond Linearized Dynamics

The long-wavelength fluctuations of the electronic plasma are dominated by the plasmons, which behave as quasiparticles with the dispersion relation $\omega_p(\mathbf{q})$. Their linearized dynamics is governed by the Keldysh RPA action (7.29). A (moderately) excited plasma may be described by a non-equilibrium distribution function of the plasmons $\tilde{F}_p(x, \mathbf{q})$, which is a slow function of the space-time location x . Our goal is to derive a kinetic equation that describes evolution of such a distribution function. To this end we need to discuss what is the main source of nonlinearity in the plasmon dynamic. One candidate is three- or four-plasmon collisions. The corresponding processes could be obtained by expanding the action (7.4) to the third or fourth powers in the potential V . The three-plasmon collisions cannot lead to real (energy-conserving) processes, due to the energy gap ω_p . Indeed, to split one plasmon into two new ones, one needs at least the energy $2\omega_p$, which an initial long-wavelength plasmon does not have. As a result, three-plasmon collisions are virtual processes, which only lead to a renormalization of the dispersion relation. The four-plasmon collisions can be energy conserving. One may show, though, that the corresponding cross section is small.

Instead, the most important process is interaction of the plasmons with the resonant electrons. On the level of linearized dynamics those are exactly the processes which lead to Landau damping; see Fig. 7.2. At first glance, considering both plasmons and electrons as independent entities looks like double-counting. Indeed, we have derived the plasmon dynamics, for example, Eq. (7.4), by completely integrating out the electronic (and ionic) degrees of freedom. It is useful, however, to step back and acknowledge that different groups of electrons played very different roles in this process. The real part of the polarization operator that leads to the plasmon dispersion relation, namely to the inertial terms $\partial_t^2 + \omega_p^2(\mathbf{q})$ in the plasmon action (7.29), is primarily given by thermal electrons with $k \lesssim k_{Te} = \sqrt{T_e m_e}$. On the other hand, the Landau damping is entirely coming from the fast resonant electrons with $k \sim \sqrt{T_e m_e}/(\kappa q) \gg k_{Te}$. Thus our program is to (i) split the electronic degrees of freedom into slow (thermal) and fast (resonant) ones (see Fig. 7.2); (ii) integrate out slow electrons and arrive at the undamped plasmon dynamics; (iii) treat the resulting long wavelength plasmons and remaining fast electrons as independent degrees of freedom; and (iv) derive coupled kinetic equations for their respective distribution functions $\tilde{F}_p(x, \mathbf{q})$ and $\tilde{F}_e(x, \mathbf{k})$, where $|\mathbf{q}| < \kappa^{-1} \ll k_{Te} < |\mathbf{k}|$.

Kinetic equations for plasmons may be directly read out from the action (7.29). To this end we compare it with the real boson action (6.28) (in the present case

$\omega_p^2(\mathbf{q}) \approx \omega_p^2 + \langle \mathbf{v}_k^2 \rangle \mathbf{q}^2 \rightarrow \omega_p^2 - \langle \mathbf{v}_k^2 \rangle \nabla_{\mathbf{r}}^2$) and treat the imaginary part of the polarization operator $\hat{\Pi}_e$ as the self-energy of the bosonic field (more precisely, $\hat{\Sigma}_p = -(2e^2/\mathbf{q}^2) \text{Im} \hat{\Pi}_e$). The real part of the polarization operator went into the definition of the plasmon dispersion. The corresponding kinetic equation is given by Eq. (6.54) and the collision integral is Eq. (6.55). To write down the latter we need to employ expressions (7.25) for the components of the polarization matrix with the understanding that the electronic distribution function $\tilde{F}_e$ may be a non-equilibrium one. This way, we find

$$[\partial_t + \mathbf{v}_{\mathbf{qp}} \nabla_{\mathbf{r}} - \nabla_{\mathbf{r}} \omega_p(x) \nabla_{\mathbf{q}}] \tilde{F}_p(x, \mathbf{q}) = \frac{2\pi^2 e^2 \omega_p(\mathbf{q})}{\mathbf{q}^2} \sum_{\mathbf{k} > k_{Te}} \delta(\omega_p(\mathbf{q}) + \omega_{\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) \times [\tilde{F}_e(x, \mathbf{k} + \mathbf{q}) \tilde{F}_e(x, \mathbf{k}) - 1 + \tilde{F}_p(x, \mathbf{q}) (\tilde{F}_e(x, \mathbf{k} + \mathbf{q}) - \tilde{F}_e(x, \mathbf{k}))] \quad (7.34)$$

where $\omega_p^2(x) = (2\pi e^2/m_e) \sum_{\mathbf{k}} [\tilde{F}_e(x, \mathbf{k}) - 1]$ and $\mathbf{v}_{\mathbf{qp}} = \nabla_{\mathbf{q}} \omega_p(\mathbf{q}) = \mathbf{q} \langle \mathbf{v}_k^2 \rangle / \omega_p$.

We turn now to the kinetic equation for the fast electron distribution function $\tilde{F}_e$. It is given by Eq. (6.51), while the collision integral is Eq. (6.47). To find the proper self-energy one notices that the interaction of the fast resonant electrons with the plasmon field is described by the action $S_V = \int dx \vec{\phi}_e \hat{V} \vec{\phi}_e$, Eq. (2.66). There is no significant vertex renormalization due to the integrated-out slow electrons. On the other hand, the propagator of the V -field is renormalized and is given by the RPA interaction potential (without Landau damping). Diagrams for the self-energy are plotted in Fig. 7.3, and the corresponding expressions are

$$\Sigma_e^{R(A)}(x, x') = \frac{i}{2} [G_0^K(x, x') U_{\text{RPA}}^{A(R)}(x', x) + G_0^{R(A)}(x, x') U_{\text{RPA}}^K(x', x)]$$

$$\Sigma_e^K(x, x') = \frac{i}{2} [G_0^K(x, x') U_{\text{RPA}}^K(x', x) - (G_0^R - G_0^A)(U_{\text{RPA}}^R - U_{\text{RPA}}^A)]$$

where $U_{\text{RPA}}^{R(A)} = (4\pi e^2 \omega_p^2 / \mathbf{q}^2) [(\omega \pm i0)^2 - \omega_p^2]^{-1}$; compare (7.28), while the Keldysh component is $U_{\text{RPA}}^K = U_{\text{RPA}}^R \circ F_p - F_p \circ U_{\text{RPA}}^A$. Once again we have used the fact that $G_0^{R(A)}(x, x') U_{\text{RPA}}^{R(A)}(x', x) = 0$, due to causality. Performing WT, putting the

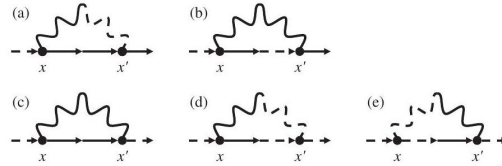


Figure 7.3 Self-energy of the resonant electrons due to interactions with the plasmons: $\Sigma_e^R(x, x')$ is given by diagrams (a) and (b); $\Sigma_e^K(x, x')$ - by diagrams (c)-(e). The straight lines are electronic Green functions G_0 , the wavy lines are RPA plasmon propagators U_{RPA} . Full lines denote classical, and dashed lines quantum "legs."

distribution functions on "mass-shell" according to Eqs. (6.48) and (6.53) for F_e and F_p , respectively, and integrating over the plasmon energy ω with the help of the delta-function, one obtains the kinetic equation

$$[\tilde{Z}^{-1} \partial_t + \tilde{\mathbf{v}}_{\mathbf{ke}} \nabla_{\mathbf{r}} - \nabla_{\mathbf{r}} \text{Re} \Sigma_e^R(x, \mathbf{k}) \nabla_{\mathbf{k}}] \tilde{F}_e(x, \mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{q}} \frac{2\pi^2 e^2 \omega_p(\mathbf{q})}{\mathbf{q}^2} \times \left\{ \delta(\omega_{\mathbf{k}} + \omega_p(\mathbf{q}) - \omega_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) [\tilde{F}_e(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \tilde{F}_p(\mathbf{q}) - 1 + \tilde{F}_e(\mathbf{k}) (\tilde{F}_e(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \tilde{F}_p(\mathbf{q}))] \right. \\ \left. + \delta(\omega_{\mathbf{k}} - \omega_p(\mathbf{q}) - \omega_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}) [\tilde{F}_e(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \tilde{F}_p(\mathbf{q}) + 1 - \tilde{F}_e(\mathbf{k}) (\tilde{F}_e(\mathbf{k} - \mathbf{q}) + \tilde{F}_p(\mathbf{q}))] \right\} \quad (7.35)$$

where we have omitted space-time arguments x on the right-hand side and changed the summation variable $\mathbf{q} \rightarrow -\mathbf{q}$ in the last term. Here $\tilde{Z}^{-1} = 1 - \partial_\epsilon \text{Re} \Sigma_e^R$ and $\tilde{\mathbf{v}}_{\mathbf{k}e} = \mathbf{k}^2/(2m_e) + \nabla_{\mathbf{k}} \text{Re} \Sigma_e^R$. Equations (7.34) and (7.35) provide the kinetic theory of the coupled system of plasmons and resonant high-energy electrons [121, 122, 123, 15]. Despite having collision integrals on the right-hand sides, these equations still describe collisionless plasma. Indeed, their right-hand sides describe only interactions between fast electrons and slow fluctuations of the longitudinal electric field - plasmons. Collisions between the electrons are not included. Unlike the Vlasov equations, which treat the electric field as a deterministic one, Eqs. (7.34) and (7.35) take into account fluctuations of both electron and plasmon degrees of freedom.

To simplify these equations let us introduce non-equilibrium occupation numbers $\tilde{F}_p(x, \mathbf{q}) = 2n_p(x, \mathbf{q}) + 1$ for plasmons and $\tilde{F}_e(x, \mathbf{k}) = 2n_e(x, \mathbf{k}) + 1$ for electrons. Due to the classical nature of the problem $n_p \gg 1$ and $n_e \ll 1$. One may thus neglect terms quadratic in n_e . Restricting ourselves to a spatially uniform situation, we find for the system of coupled kinetic equations

$$\begin{aligned} \partial_t n_p(\mathbf{q}) &= \frac{4\pi^2 e^2 \omega_p}{q^2} \sum_{\mathbf{k} > k_{Te}} \delta_{\omega_p(\mathbf{q}) + \omega_{\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}} [(n_e(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - n_e(\mathbf{k})) n_p(\mathbf{q}) + n_e(\mathbf{k} + \mathbf{q})] \\ \partial_t n_e(\mathbf{k}) &= \sum_{\mathbf{q}} \frac{1/\kappa}{q^2} 4\pi^2 e^2 \omega_p \{ \delta_{\omega_{\mathbf{k}} + \omega_p(\mathbf{q}) - \omega_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}} [n_p(\mathbf{q}) (n_e(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - n_e(\mathbf{k})) + n_e(\mathbf{k} + \mathbf{q})] \\ &\quad + \delta_{\omega_{\mathbf{k}} - \omega_p(\mathbf{q}) - \omega_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}} [n_p(\mathbf{q}) (n_e(\mathbf{k} - \mathbf{q}) - n_e(\mathbf{k})) - n_e(\mathbf{k})] \} \end{aligned}$$

where we put $\tilde{Z} = 1$ for simplicity. Notice that the Maxwell distribution for electrons, $n_e(\mathbf{k}) = e^{-(\omega_{\mathbf{k}} - \mu_e)/T_e}$, and the Planck distribution for plasmons, $n_p(\mathbf{q}) = n_B(\omega_p(\mathbf{q}))$, are equilibrium solutions of the coupled system. One can now use the scale separation between long-wavelength plasmons and fast resonant electrons, that is, $q \lesssim \kappa^{-1} \ll k_{Te} \lesssim k$ to expand in powers of q . While in the equation for n_p first order is sufficient, in the equation for n_e one should expand up to the second one. This procedure leads to

$$\partial_t n_p(t, \mathbf{q}) = -2 [\Gamma(\mathbf{q}; n_e) n_p(t, \mathbf{q}) - L(\mathbf{q}; n_e)] \quad (7.36)$$

$$\partial_t n_e(t, \mathbf{k}) = \nabla_{\mathbf{k}_\mu} [D_{\mu\nu}(\mathbf{k}; n_p) \nabla_{\mathbf{k}_\nu} n_e(t, \mathbf{k}) - \mathbf{j}_\mu(\mathbf{k}) n_e(t, \mathbf{k})] \quad (7.37)$$

where $\mu, \nu = x, y, z$. The plasmon damping coefficient and the fast electron diffusion tensor are given by

$$\Gamma(\mathbf{q}; n_e) = -\frac{2\pi^2 e^2 \omega_p(\mathbf{q})}{q^2} \sum_{\mathbf{k} > k_{Te}} \delta(\omega_p(\mathbf{q}) - \mathbf{v}_{\mathbf{k}e} \mathbf{q}) \mathbf{q}_\mu \nabla_{\mathbf{k}_\mu} n_e(t, \mathbf{k}); \quad (7.38)$$

$$D_{\mu\nu}(\mathbf{k}; n_p) = 4\pi^2 e^2 \sum_{\mathbf{q}} \frac{1/\kappa}{q^2} \delta(\omega_p(\mathbf{q}) - \mathbf{v}_{\mathbf{k}e} \mathbf{q}) \frac{\mathbf{q}_\mu \mathbf{q}_\nu}{q^2} \omega_p(\mathbf{q}) n_p(t, \mathbf{q}). \quad (7.39)$$

These quantities originate from the stimulated emission and absorption of plasmons by the resonant electrons. The spontaneous emission processes give rise to the second terms on the right-hand sides of Eqs. (7.36) and (7.37). They read as

$$L(\mathbf{q}; n_e) = \frac{2\pi^2 e^2 \omega_p(\mathbf{q})}{q^2} \sum_{\mathbf{k} > k_{Te}} \delta(\omega_p(\mathbf{q}) - \mathbf{v}_{\mathbf{k}e} \mathbf{q}) n_e(t, \mathbf{k}) \quad (7.40)$$

$$\mathbf{j}_\mu(\mathbf{k}) = -4\pi^2 e^2 \sum_{\mathbf{q}} \frac{1/\kappa}{q^2} \delta(\omega_p(\mathbf{q}) - \mathbf{v}_{\mathbf{k}e} \mathbf{q}) \omega_p(\mathbf{q}) \mathbf{q}_\mu / q^2 \quad (7.41)$$

These terms are necessary for the equilibrium distributions to be solutions of the kinetic equations. Under the adopted approximations the Maxwell distribution for the fast electrons and the classical equipartition for plasmons $n_p^{\text{eq}}(\mathbf{q}) = T_e/\omega_p(\mathbf{q})$ are such equilibrium solutions of Eqs. (7.36) and (7.37). In equilibrium $\Gamma(\mathbf{q}) = \Gamma(\mathbf{q}; n_e^{\text{eq}})$ is the already familiar linear Landau damping (7.17). It may be modified

if the slope of the electronic distribution $\nabla_{\mathbf{k}} n_e(t, \mathbf{k})$ differs from the equilibrium one (see Section 7.6). The fact that equation (7.37) for the fast electron distribution has the form of the continuity relation reflects conservation of the number of electrons inside the resonant region, $\partial_t \sum_{\mathbf{k}} n_e(t, \mathbf{k}) = 0$ (as opposed to the number of plasmons, which is not conserved). To prove this relation one has to perform integration by parts in Eq. (7.37) and assume that the particle current vanishes in the region of thermal electrons, $\mathbf{J}_{\mu}(\mathbf{k}) = \mathbf{j}_{\mu} n_e - D_{\mu\nu} \nabla_{\mathbf{k}_\nu} n_e = 0$ for $k < k_{T_e}$. This is indeed the case if the nonresonant part of the electron distribution is kept in thermal equilibrium, for example, due to collisions. Under this assumption Eqs. (7.36) and (7.37) also conserve the total momentum as well as the total energy of the combined system of plasmons and the resonant electrons, that is, $\partial_t [\sum_{\mathbf{q}} \mathbf{q} n_p(t, \mathbf{q}) + \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{k} n_e(t, \mathbf{k})] = 0$ and $\partial_t [\sum_{\mathbf{q}} \omega_p(\mathbf{q}) n_p(t, \mathbf{q}) + \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{k}^2/(2m) n_e(t, \mathbf{k})] = 0$.

For distributions that are isotropic in momentum space one may write

$$D_{\mu\nu}(\mathbf{k}; n_p) = \frac{\mathbf{k}_{\mu} \mathbf{k}_{\nu}}{k^2} D_{\parallel}(k) + \left(\delta_{\mu\nu} - \frac{\mathbf{k}_{\mu} \mathbf{k}_{\nu}}{k^2} \right) D_{\perp}(k); \quad \mathbf{j}(\mathbf{k}) = j_{\parallel} \frac{\mathbf{k}}{k} \quad (7.42)$$

Performing the angular integrations, one finds for the corresponding kinetic coefficients

$$\begin{aligned} D_{\parallel}(k) &= \frac{e^2 \omega_p^3 m_e^3}{k^3} \int_{\omega_p m_e/k}^{1/\kappa} \frac{dq}{q} n_p(t, q); \quad \Gamma(q) = \frac{e^2 \omega_p^2 m_e^2}{2q^3} n_e \left(t, \frac{\omega_p m_e}{q} \right); \\ D_{\perp}(k) &= \frac{e^2 \omega_p m_e}{k} \int_{\omega_p m_e/k}^{1/\kappa} q \, dq n_p(t, q) \left(1 - \frac{\omega_p^2 m_e^2}{k^2 q^2} \right); \\ L(q) &= \frac{e^2 \omega_p m_e}{2q^3} \int_{\omega_p m_e/q}^{\infty} k \, dk n_e(t, k); \quad j_{\parallel}(k) = -\frac{e^2 \omega_p^2 m_e^2}{k^2} \ln \frac{k}{\kappa \omega_p m_e}. \end{aligned} \quad (7.43)$$

Notice that if the plasmon occupation number decays slower than $1/q^2$ there is a strong inequality $D_{\perp} \gg D_{\parallel}$, with the former being dependent on details of the cutoff at $q \sim 1/\kappa$. As a result, the fast diffusive relaxation first takes place in the direction perpendicular to $\mathbf{k}$. Diffusive relaxation in the parallel direction is much slower and therefore it is $D_{\parallel}$ which is relevant for kinetics. In equilibrium the parallel diffusion constant is $D_{\parallel}(k) = (e^2 \omega_p^2 T_e m_e^3 / k^3) \ln(k / \kappa \omega_p m_e)$, that is, it depends on the cutoff only logarithmically and is therefore universal. One may check then that $D_{\parallel}(k) \partial_k n_e^{\text{eq}}(k) = j_{\parallel}(k) n_e^{\text{eq}}(k)$ and $\Gamma(q) n_p^{\text{eq}}(q) = L(q)$, as it should be according to Eqs. (7.36) and (7.37).

12.2.6 7.6 Nonlinear Landau Damping

Consider a spatially uniform and momentum isotropic plasma, where the plasmon modes are initially ($t = 0$) excited above the thermal population, $n_p(0) \gg n_p^{\text{eq}}$ for the range of the wavenumbers $q \lesssim \kappa^{-1}$. It is convenient to choose $\sqrt{\omega_p m_e} = \sqrt{k_{T_e}/\kappa}$ as a unit of momentum and $e^2 \sqrt{\omega_p m_e} = \sqrt{2 \text{Ry} \omega_p}$ as a unit of energy, where Ry is the Rydberg constant. In these units $q \ll 1 \ll k$, and the radial part of Eqs. (7.36) and (7.37) with the kinetic coefficients (7.43) takes the form

$$\begin{aligned}
\dot{n}_p(t, q) &= -2\Gamma(q; n_e) n_p(t, q); & \dot{n}_e(t, k) &= k^{-2} \partial_k [k^2 D_{\parallel}(k; n_p) \partial_k n_e(t, k)] \\
\Gamma(q; n_e) &= \frac{1}{2q^3} n_e(t, q^{-1}); & D_{\parallel}(k; n_p) &= \frac{1}{k^3} \int_{1/k}^{1/\kappa} \frac{dq}{q} n_p(t, q)
\end{aligned} \tag{7.44}$$

where we have neglected spontaneous emission terms, since they are of no importance in the strongly non-equilibrium case. One may look for scaling solutions of these equations in the following form: $n_p(t, q) = u_p(t) f_p(q)$ and $n_e(t, k) = u_e(t) f_e(k)$. It is then easy to see that $u_p(t) = u_e(t) = t^{-1}$ and $f_e(k) = k^{-3}$. One then notices that $k \partial_k [3k^{-5} \int_{1/k}^{1/\kappa} (dq/q) f_p(q)] = 1$, from which it follows that $f_p(q) = (5/3)q^{-5} \ln(1/\kappa q)$. Transforming back to physical units, one finds for the corresponding scaling solution of Eqs. (7.44)

$$n_p(t, q) = \frac{5}{3t} \frac{4\pi\rho_0 m}{q^5} \ln \frac{1/\kappa}{q}; \quad n_e(t, k) = \frac{1}{\omega_p t} \frac{4\pi\rho_0}{k^3}. \tag{7.45}$$

Such a solution is only possible once $n_p(t, \kappa^{-1}) < n_p(0)$, that is, $t \geq t_0$, where $t_0 = \rho_0 m \kappa^5 / n_p(0)$. The interval of plasmon momenta where the scaling solution holds is $q_0(t) < q < \kappa^{-1}$, where the boundary $q_0(t)$ is determined by $n_p(t, q_0(t)) = n_p(0)$, that is, $q_0(t) \propto (t n_p(0))^{-1/5}$. The corresponding scaling interval for the resonant electrons is $k_{Te} < k < \omega_p m_e / q_0(t)$. The plasmon occupation numbers for $q < q_0(t)$ stay approximately constant, given by $n_p(0)$, until the time when $q = q_0(t)$. At a later time they decay as $1/t$ according to Eq. (7.45). As time increases past t_0 the scaling interval for plasmons grows toward smaller momenta ("red" shift), while for the resonant electrons it grows toward the larger momenta ("blue" shift). The energy of the plasmon modes in the scaling interval $E_p = \int_{q_0(t)}^{1/\kappa} q^2 dq \omega_p n_p(t, q) \sim t^{-1} q_0^{-2}(t)$, that is, it decreases with time as $E_p \sim t^{-3/5}$ at $t > t_0$. The same is true regarding the energy of the resonant electrons in their respective scaling interval $E_e = \int_{k_{Te}}^{\omega_p m_e / q_0} k^2 dk (k^2/2m) n_e(t, k) \sim t^{-3/5}$. The "missing" energy flows through the upper boundary of the electron scaling interval $\omega_p m_e / q_0(t)$ toward larger momenta. There is a corresponding particle flow through this boundary. Indeed, the total number of resonant electrons in the scaling interval is $N_e = \int_{k_{Te}}^{\omega_p m_e / q_0} k^2 dk n_e(t, k) \propto \rho_0 (\omega_p t)^{-1} \ln(1/\kappa q_0(t))$, that is, it decays as $N_e \sim t^{-1} \ln(t/t_0)$.

One may show that the flux of particles and heat through the upper boundary of the scaling interval precisely accounts for the "missing" electrons and energy. If these high-energy electrons leave the system due to some mechanism

of escape, then the relaxation of an initially non-equilibrium plasmon distribution $n_p(0)$ results in a slow cooling of the plasma. Indeed, the plasmon energy is channeled to the hot resonant electrons. The latter then leave the system, taking away the energy of the non-equilibrium plasmons as well as their own kinetic energy. Thus, after eventual equilibration (e.g. due to collisions) the remaining particles have a lower temperature than that before the plasmon excitation.

The exponents of the scaling solution (7.45) depend on the details of interactions between plasmons and resonant electrons, as well as on the system dimensionality and the dispersion relation of the participating quasiparticles. However, the existence of the scaling interval of momenta and a power-law distribution function within this interval is a very general phenomenon. It was called wave turbulence and found in a great variety of systems [124].

The observation that the plasmon occupation decays as $n_p \sim 1/t$ at long times is rather robust. It is based on the fact that $\dot{n}_p \sim -\nabla_{\mathbf{k}} n_e n_p$ and $\dot{n}_e \sim \nabla_{\mathbf{k}} (n_p \nabla_{\mathbf{k}} n_e)$. Then the solution $n_p \propto n_e \sim 1/t$ is to be expected in a broad range of parameters. It is one of the manifestations of nonlinear Landau damping. In its essence, deviations of the resonant electron distribution

function from the equilibrium one invalidate the exponential plasmon relaxation $n_p \sim e^{-2\Gamma t}$ and transform it to a much slower, power-law decay.

12.2.7 7.7 Problems

7.7.1 Landau Damping of the Ion Acoustic Mode

Consider the ion acoustic plasma mode of Section 7.3. For $\kappa q \ll 1$ its dispersion relation is linear $\omega_{ia}(\mathbf{q}) = v_{ia} q$ with $v_{ia} = \sqrt{T_e/m_i}$. Calculate Landau damping of this mode by electrons, $\Gamma_{ia}^{(e)}(\mathbf{q})$, and by the ions $\Gamma_{ia}^{(i)}(\mathbf{q})$. Show that the electron contribution is always small, $\Gamma_{ia}^{(e)}(\mathbf{q})/v_{ia} q \propto \sqrt{m_e/m_i} \ll 1$. Show that the ion damping is given by

$$\frac{\Gamma_{ia}^{(i)}(\mathbf{q})}{v_{ia} q} \approx \sqrt{\frac{\pi}{8}} \left(\frac{T_e}{T_i} \right)^{3/2} e^{-T_e/2T_i}. \quad (7.46)$$

For $T_e > 10T_i$ the ratio is about $\Gamma_{ia}^{(i)}/v_{ia} q \lesssim 0.1$ and therefore the mode is reasonably underdamped.

To show this evaluate $\text{Im} \Pi_e^R(\mathbf{q}, v_{ia} q)$ and $\text{Im} \Pi_i^R(\mathbf{q}, v_{ia} q)$, using Eqs. (7.15) and (7.16) and solve Eq. (7.12) for the complex valued $\omega = \omega(\mathbf{q})$. The real parts of the polarization operators are explained in Section 7.3. Employ the fact that the occupation number $n_B(k) = e^{\mu_{e,(i)}/T_{e,(i)}} \prod_{v=x,y,x} e^{-k_v^2/2m_{e(i)}T_{e,(i)}}$, along with the normalization $\rho_0 = \sum_{\mathbf{k}} n_B(k)$ for both electrons and ions. This way the x -axis may be chosen along the $\mathbf{q}$ vector and the corresponding x -integral calculated with the help of the delta-function (7.15).

12.3 Kinetics of Bose Condensates

This chapter is devoted to the dynamics of Bose gases in the presence of a condensate. We derive a system of coupled equations for the condensate wavefunction and the distribution function of above-the-condensate quasiparticles. We also discuss quasiparticle fluctuations, which lead to stochastic Langevin forces acting on the condensate.

12.3.1 8.1 Gross-Pitaevskii Equation

The phenomenon of Bose-Einstein condensation is associated with the fact that the largest eigenvalue N_0 of the density matrix operator $\hat{\rho}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ acquires a macroscopically large value [115] $\int d\mathbf{r}' \hat{\rho}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \Phi_0(\mathbf{r}') = N_0 \Phi_0(\mathbf{r})$. We first consider the case where almost all particles belong to the condensate, meaning that $N - N_0 \ll N$, where N is the total number of bosons. This is the case if the gas is sufficiently dilute, $a_s^3 \rho \ll 1$, where a_s is the scattering length, ρ is the density and the system is at equilibrium at a temperature that is much less than the critical temperature of Bose-Einstein condensation, $T \ll T_c$. Under these conditions the condensate wavefunction may be found as a stationary field configuration of the bosonic action $S = S_0 + S_{\text{int}}$ given by Eqs. (6.9) and (6.13):

$$S_0 = \int d\mathbf{r} dt (\bar{\phi}^{\text{cl}}, \bar{\phi}^{\text{q}}) \begin{pmatrix} 0 & i\partial_t + \frac{\nabla_r^2}{2m} - V^{\text{cl}} \\ i\partial_t + \frac{\nabla_r^2}{2m} - V^{\text{cl}} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi^{\text{cl}} \\ \phi^{\text{q}} \end{pmatrix} \quad (8.1)$$

$$S_{\text{int}} = -\frac{g}{2} \int d\mathbf{r} dt [\bar{\phi}^{\text{q}} \bar{\phi}^{\text{cl}} \phi^{\text{cl}} \phi^{\text{cl}} + \bar{\phi}^{\text{cl}} \bar{\phi}^{\text{q}} \phi^{\text{q}} \phi^{\text{q}} + \text{c.c.}] \quad (8.2)$$

where $V^{\text{cl}}(\mathbf{r}, t)$ is an external potential, for example, of an optical or magnetic trap. The interaction parameter g is related to the s-wave scattering length a_s as $g = 4\pi a_s/m$ [115].

To find a stationary configuration of the action we notice that, according to (2.53), there are no terms in the action that have zero power of both $\bar{\phi}^q$ and ϕ^q . The same is obviously true regarding $\delta S/\delta\bar{\phi}^{\text{cl}}$ and $\delta S/\delta\phi^{\text{cl}}$. As a result, two of the saddle-point equations,

$$\frac{\delta S}{\delta\bar{\phi}^{\text{cl}}} = 0; \quad \frac{\delta S}{\delta\phi^{\text{cl}}} = 0 \quad (8.3)$$

may always be satisfied by

$$\Phi^q = \bar{\Phi}^q = 0 \quad (8.4)$$

irrespective of what the classical component, $\Phi^{\text{cl}} = \Phi_0$, is. By the capital $\Phi^{\text{cl}(q)}$ we denote solutions of the stationary point equations. Under the condition (8.4) the second pair of stationary point equations takes the form

$$\begin{aligned} \frac{\delta S}{\delta\bar{\phi}^q} &= \left(i\partial_t + \frac{1}{2m} \nabla_{\mathbf{r}}^2 - V^{\text{cl}}(\mathbf{r}, t) - \frac{g}{2} |\Phi_0|^2 \right) \Phi_0 = 0; \\ \frac{\delta S}{\delta\phi^q} &= \left(-i\partial_t + \frac{1}{2m} \nabla_{\mathbf{r}}^2 - V^{\text{cl}}(\mathbf{r}, t) - \frac{g}{2} |\Phi_0|^2 \right) \bar{\Phi}_0 = 0. \end{aligned} \quad (8.5)$$

This nonlinear equation, called the time-dependent Gross-Pitaevskii equation, determines the condensate wavefunction $\Phi_0(\mathbf{r}, t)$, provided some initial and boundary conditions are specified. The resulting macroscopic wavefunction must accommodate (almost) all particles, which dictates the normalization condition

$$\int d\mathbf{r} |\Phi_0(\mathbf{r}, t)|^2 = 2N \quad (8.6)$$

The factor of two on the right-hand side is associated with our definition of the Keldysh rotations, Eq. (2.39), and the resulting fact that the expectation value of the two classical fields is twice that of the occupation number, $\langle \phi^{\text{cl}} \bar{\phi}^{\text{cl}} \rangle \sim 2n_B + 1$.

In the case of a static external potential $V^{\text{cl}}(\mathbf{r})$ one may look for a solution of Eq. (8.5) in the form $\Phi_0(\mathbf{r}, t) = e^{-i\mu t} \Phi_0(\mathbf{r})$, where $\Phi_0(\mathbf{r})$ satisfies the time-independent Gross-Pitaevskii equation

$$\left(\frac{1}{2m} \nabla_{\mathbf{r}}^2 - V^{\text{cl}}(\mathbf{r}, t) + \mu - \frac{g}{2} |\Phi_0|^2 \right) \Phi_0 = 0 \quad (8.7)$$

and the chemical potential μ is chosen to satisfy the normalization condition (8.6). In a particular case of an adiabatically smooth potential, one may disregard spatial gradients, finding $|\Phi_0(\mathbf{r})|^2 = 2(\mu - V^{\text{cl}}(\mathbf{r}))/g$, if the right-hand side of this expression is positive, and $\Phi_0 = 0$ otherwise. This is the so-called Thomas-Fermi approximation for the condensate solution in a trap. Once again, the chemical potential μ is determined from Eq. (8.6), where the integral runs over the region where $V^{\text{cl}}(\mathbf{r}) < \mu$. In the absence of an external potential $V^{\text{cl}} = 0$ one finds $|\Phi_0|^2 = 2\mu/g$ and thus $\mu = \rho g$, where ρ is the density of the Bose gas.

Let us investigate now small dynamical fluctuations around the uniform condensate solution. To this end we write $\Phi_0(\mathbf{r}, t) = e^{-i\mu t} (\Phi_0 + \varphi(\mathbf{r}, t))$, where $|\Phi_0|^2 = 2\mu/g = 2\rho$. We then substitute it into the time-dependent Gross-Pitaevskii equation (8.5) and linearize it with respect to φ . As a result one finds a pair of linear homogeneous differential equations for φ and $\bar{\varphi}$:

$$\begin{aligned} i\partial_t \varphi + \frac{1}{2m} \nabla_{\mathbf{r}}^2 \varphi - \frac{g}{2} |\Phi_0|^2 \varphi - \frac{g}{2} \Phi_0^2 \bar{\varphi} &= 0; \\ -i\partial_t \bar{\varphi} + \frac{1}{2m} \nabla_{\mathbf{r}}^2 \bar{\varphi} - \frac{g}{2} |\Phi_0|^2 \bar{\varphi} - \frac{g}{2} \bar{\Phi}_0^2 \varphi &= 0. \end{aligned} \quad (8.8)$$

Performing a Fourier transformation, one finds the algebraic relation

$$\begin{pmatrix} \omega - \mathbf{q}^2/(2m) - \frac{g}{2} |\Phi_0|^2 & -\frac{g}{2} \Phi_0^2 \\ -\frac{g}{2} \bar{\Phi}_0^2 & -\omega - \mathbf{q}^2/(2m) - \frac{g}{2} |\Phi_0|^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi(\mathbf{q}, \omega) \\ \bar{\varphi}(\mathbf{q}, \omega) \end{pmatrix} = 0, \quad (8.9)$$

which may be satisfied only if the determinant of the matrix on its left-hand side is zero. This way, one finds the spectrum of the small fluctuations of the condensate:

$$\omega^2 = \left(\frac{\mathbf{q}^2}{2m} + \frac{g}{2} |\Phi_0|^2 \right)^2 - \left(\frac{g}{2} \right)^2 |\Phi_0|^4 = \left(\frac{\mathbf{q}^2}{2m} \right)^2 + \frac{\mathbf{q}^2 g}{m} |\Phi_0|^2. \quad (8.10)$$

This is the celebrated Bogoliubov dispersion relation, which may be written as

$$\omega_B(\mathbf{q}) = \sqrt{c^2 \mathbf{q}^2 + \left(\frac{\mathbf{q}^2}{2m} \right)^2}. \quad (8.11)$$

For small wavenumbers the excitations are of an acoustic nature, $\omega_B(\mathbf{q}) = cq$, where the speed of sound c is given by $c^2 = g |\Phi_0|^2 / 2m = g\rho/m$. At large wavenumbers the excitation spectrum approaches that of the usual particles, $\omega_B(\mathbf{q}) = \mathbf{q}^2/(2m) + mc^2 + O(\mathbf{q}^{-2})$. Notice that the linearity of the spectrum at small wavenumbers originates from the presence of the off-diagonal terms in the matrix (8.9), which assumes a fixed phase of the condensate wavefunction. The latter assumption is not true for low-dimensional systems, where the phase fluctuations destroy the phase coherence at long distances and times. Nevertheless the $T = 0$ spectrum of the long wavelength excitations is still linear [125] even in these cases.

It is convenient to parametrize the condensate wavefunction with its amplitude and phase as $\Phi_0 = \sqrt{2\rho_0} e^{i\theta}$. Then the imaginary and real parts of the Gross-Pitaevskii equation (8.5) acquire the form

$$\partial_t \rho_0 + \nabla_{\mathbf{r}} (\rho_0 \nabla_{\mathbf{r}} \theta / m) = 0; \quad (8.12)$$

$$\partial_t \theta = \frac{\nabla_{\mathbf{r}}^2 \sqrt{\rho_0}}{2m \sqrt{\rho_0}} - \frac{(\nabla_{\mathbf{r}} \theta)^2}{2m} - V^{\text{cl}} - g\rho_0. \quad (8.13)$$

The first equation here may be identified as the continuity relation for the condensate density and current, $\partial_t \rho_0 + \text{div } \mathbf{j}_0 = 0$. Acknowledging that the condensate current is given by the product of its density and the superfluid velocity $\mathbf{j}_0 = \rho_0 \mathbf{v}_{\text{sf}}$, one finds for the latter $\mathbf{v}_{\text{sf}} = \nabla_{\mathbf{r}} \theta / m$. Neglecting then the density gradients, Eq. (8.13) is recognized as the Euler equation for the superfluid velocity of the condensate $\partial_t \mathbf{v}_{\text{sf}} + \nabla_{\mathbf{r}} (\mathbf{v}_{\text{sf}}^2 / 2 + \mu / m) = 0$, where $\mu = V^{\text{cl}} + g\rho_0$ is the local chemical potential.

12.3.2 8.2 Quasiparticles

The Gross-Pitaevskii approach is adequate when most of the particles belong to the condensate and the relative number of above-the-condensate excitations is small. This is the case in equilibrium at temperatures much below the critical temperature of the Bose condensation, $T_c \propto \rho^{2/3}/m$. At temperatures of the order of the critical one, or in a non-equilibrium situation, one can't neglect above-the-condensate quasiparticles. The quasiparticles are characterized by their distribution function $\tilde{F}(\mathbf{r}, t, \mathbf{k})$, which evolves according to a kinetic equation. Our goal thus is to describe the system with the complex wavefunction of the condensate $\Phi_0(\mathbf{r}, t)$ along with the quasiparticle distribution function $\tilde{F}(\mathbf{r}, t, \mathbf{k})$. The condensate wavefunction obeys a generalized Gross-Pitaevskii equation, which includes condensate interactions with above-the-condensate quasiparticles. The distribution function obeys the kinetic equation, which is

coupled to the condensate dynamics [127]. This system of equations is ideologically similar to the Vlasov equations for plasma; see Section 7.1. Here, instead of the Poisson equation for the real scalar potential $V(\mathbf{r}, t)$ we have the Gross-Pitaevskii equation for the complex wavefunction $\Phi_0(\mathbf{r}, t)$. As in the case of a plasma, there is a lot of information in these equations even with the collisionless form of the kinetic equation. As a next step (similar to what is done in Section 7.4) one may include stochastic terms in the generalized Gross-Pitaevskii equation, which are due to the quasiparticle fluctuations.

To implement this program we split the complex field $\phi(\mathbf{r}, t)$ into slow $\Phi(\mathbf{r}, t)$ and fast $\varphi(\mathbf{r}, t)$ components. The former describes the condensate, while the latter describes above-the-condensate quasiparticles. Since away from equilibrium the condensate is a dynamic variable, the boundary between the two is somewhat arbitrary and itself may be a slow function of time. We thus write

$$\phi^{\text{cl}}(x) = e^{-i\mathcal{K}(x)} [\Phi_0(x) + \varphi(x)]; \quad \phi^{\text{q}}(x) = e^{-i\mathcal{K}(x)} [\Phi^{\text{q}}(x) + \varphi^{\text{q}}(x)] \quad (8.14)$$

where $x = \mathbf{r}, t$. The yet unspecified local phase $\mathcal{K}(x)$ serves to fix a particular gauge. We shall choose $\mathcal{K}(x)$ to make the semiclassical condensate wavefunction $\Phi_0(x)$ as slow as possible. For example, in equilibrium $\mathcal{K} = \mu t$ and Φ_0 is static. Away from equilibrium the complex function $\Phi_0(x)$ can't be brought to a static form by a choice of phase. Nevertheless, proper choices of $\mathcal{K}(x)$ make the scale separation of the degrees of freedom well justified. We shall return to this issue in Section 8.6.

Substituting Eq. (8.14) into the action (8.1), (8.2), one obtains the action in terms of the condensate variables Φ_0 and Φ^{q} as well as the quasiparticle fields φ and φ^{q} . To derive semiclassical equations governing the condensate dynamics it is sufficient to keep only the terms with zero or first power of Φ^{q} . The interaction action (8.2) brings a host of terms, which may be classified as follows.

- (i) Those containing four condensate fields $\bar{\Phi}^{\text{q}}\bar{\Phi}_0\Phi_0\Phi_0$ - they are part of the Gross-Pitaevskii action.
- (ii) There are no terms with three condensate fields. Indeed, such terms are necessarily linear in the fast fields φ or φ^{q} , and therefore cannot satisfy energy and momentum conservation.
- (iii) Those containing two condensate fields. There are two kinds of them: (a) with only classical condensate fields, for example, $|\Phi_0|^2 \bar{\varphi}^{\text{q}}\varphi$ or $\Phi_0^2 \bar{\varphi}^{\text{q}}\bar{\varphi}$ - they are part of the quadratic action for the quasiparticles; (b) with one quantum and one classical condensate field. We shall treat them in the Popov approximation [128]

$$\bar{\Phi}^{\text{q}}\Phi_0\bar{\varphi}\varphi \approx \bar{\Phi}^{\text{q}}\Phi_0\langle\bar{\varphi}\varphi\rangle + \dots$$

where the angular brackets stand for the expectation value of two classical fields (Keldysh Green function at the coinciding points). The remaining term $\bar{\Phi}^{\text{q}}\Phi_0(\bar{\varphi}\varphi - \langle\bar{\varphi}\varphi\rangle)$ is a part of the collision action. Following Popov, we shall not single out the anomalous Bogoliubov expectation value $\langle\varphi\varphi\rangle$. This is justified for the temperature range $mc^2 < T < T_c$ (see Section 8.3), where the anomalous averages are indeed much smaller than the normal ones. Those terms as well as $\bar{\Phi}^{\text{q}}\bar{\Phi}_0\varphi^{\text{q}}\varphi^{\text{q}}$ do not influence the semiclassical dynamics.

- (iv) Those containing one condensate field. Again there are two kinds of them: (a) with a classical condensate field, for example, $\bar{\Phi}_0\bar{\varphi}^{\text{q}}\varphi\varphi$ or $\bar{\Phi}_0\bar{\varphi}^{\text{q}}\varphi^{\text{q}}\varphi^{\text{q}}$ - they contribute to the self-energy and thus to the collision terms in the quasiparticle kinetic equation. This part of the quasiparticle collision integral is about particle exchange with the condensate; (b) with a quantum condensate field, for example, $\bar{\Phi}^{\text{q}}\bar{\varphi}\varphi\varphi$ - they, being paired with one of the (iv (a)) terms, provide a part of the Gross-Pitaevskii equation, which describes particle exchange with the quasiparticle cloud.

- (v) Those with no condensate fields. In the Popov approximation they ought to be treated as

$$\bar{\varphi}^q \bar{\varphi} \varphi \varphi = 2\bar{\varphi}^q \varphi \langle \bar{\varphi} \varphi \rangle + \dots$$

Along with (iii (a)) they are a part of the quadratic quasiparticle action. The remaining terms, being taken to second order, contribute to the quasiparticle collision integral. This part of the collision integral conserves the number of quasiparticles.

As a result the action may be split into the Gross-Pitaevskii part, the quadratic quasiparticle action, and the collision part. The Gross-Pitaevskii part takes the form

$$S_{\text{GP}} = \int d\mathbf{r} dt (\bar{\Phi}_0, \bar{\Phi}^q) \begin{pmatrix} 0 & i_t - H_{\text{GP}} \\ i\partial_t - H_{\text{GP}} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Phi_0 \\ \Phi^q \end{pmatrix}, \quad (8.15)$$

where

$$H_{\text{GP}} = -\frac{\hat{\partial}_{\mathbf{r}}^2}{2m} + V^{\text{cl}} + \frac{g}{2} |\Phi_0|^2 + 2g\rho_{\text{qp}} - \partial_t \mathcal{K} \quad (8.16)$$

and $\rho_{\text{qp}}(x) = \langle \varphi(x) \bar{\varphi}(x) \rangle / 2$ is the quasiparticle density at $x = \mathbf{r}, t$. The long derivative is defined as

$$\hat{\mathbf{j}}_{\mathbf{r}} = \nabla_{\mathbf{r}} - i(\nabla_{\mathbf{r}} \mathcal{K}). \quad (8.17)$$

Variation with respect to $\bar{\Phi}^q$ leads to the saddle-point (modified Gross-Pitaevskii) equation

$$(i\partial_t - H_{\text{GP}}) \Phi_0 = 0 \quad (8.18)$$

If there is a nontrivial static equilibrium solution of this equation, the phase $\mathcal{K}$ (so far arbitrary) may be expressed through the slow densities of the condensate $\rho_0 = |\Phi_0|^2 / 2$ and the quasiparticles ρ_{qp} as

$$\partial_t \mathcal{K} = V^{\text{cl}}(x) + g\rho_0(x) + 2g\rho_{\text{qp}}(x) = \mu \quad (8.19)$$

(we neglected the space gradients of the equilibrium solution). The chemical potential μ may then be fixed using the condition $\int d\mathbf{r} (\rho_0 + \rho_{\text{qp}}) = N$. In a spatially uniform case ($V^{\text{cl}} = 0$) at zero temperature $\rho_{\text{qp}} \ll \rho$ and $\rho_0 \approx \rho$, thus $\mu(0) = g\rho > 0$. On the other hand, at $T = T_c$ one has $\rho_0 = 0$ and $\rho_{\text{qp}} = \rho$, as a result $\mu(T_c) = 2g\rho = 2\mu(0)$. This is a consequence of the exchange interactions between the quasiparticles, which are absent within the condensate. Once the temperature grows above T_c , the only solution of the saddle-point equation is $\Phi_0 = 0$, Eq. (8.19) is not applicable, while the chemical potential rapidly decreases and becomes negative, as it should for a classical gas.

To write down the quasiparticle action it is useful to define the four-component field vector $\vec{\varphi} = (\varphi, \bar{\varphi}, \varphi^q, \bar{\varphi}^q)^T$, along with its complex conjugate vector $\bar{\vec{\varphi}}$. With their help one may write

$$S_{\text{qp}} = \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} dt \bar{\vec{\varphi}} \left(\begin{array}{c|c} 0 & \check{\tau}_3 i\partial_t - \check{H}_{\text{qp}} \\ \hline \check{\tau}_3 i\partial_t - \check{H}_{\text{qp}} & 0 \end{array} \right) \vec{\varphi}, \quad (8.20)$$

where the check symbol ($\check{}$) denotes matrices in the Bogoliubov subspace and $\check{\tau}_i$ with $i = 0, 1, 2, 3$ are the corresponding Pauli matrices. The Hermitian operator $\check{H}_{\text{qp}}$ acting in the Bogoliubov subspace is defined as

$$\check{H}_{\text{qp}} = \begin{pmatrix} -\frac{\hat{\partial}_{\mathbf{r}}^2}{2m} + V^{\text{cl}} + g|\Phi_0|^2 + 2g\rho_{\text{qp}} - \partial_t \mathcal{K} & \frac{g}{2} \Phi_0^2 \\ \frac{g}{2} \bar{\Phi}_0^2 & -\frac{\hat{\partial}_{\mathbf{r}}^2}{2m} + V^{\text{cl}} + g|\Phi_0|^2 + 2g\rho_{\text{qp}} - \partial_t \mathcal{K} \end{pmatrix}. \quad (8.21)$$

Notice the absence of $1/2$ in front of $|\Phi_0|^2$ in comparison with Eq. (8.16). It is due to the presence of the exchange interactions between the condensate and the quasiparticles. If in some

region of space there is an equilibrium condensate and thus expression (8.19) for the chemical potential is valid, one may rewrite the quasiparticle Hamiltonian as

$$\check{H}_{\text{qp}} = \begin{pmatrix} -\frac{\hat{\partial}_r^2}{2m} + \frac{g}{2} |\Phi_0|^2 & \frac{g}{2} \Phi_0^2 \\ \frac{g}{2} \bar{\Phi}_0^2 & -\frac{\hat{\partial}_r^2}{2m} + \frac{g}{2} |\Phi_0|^2 \end{pmatrix}. \quad (8.22)$$

The quasiparticles may exist outside of the condensate region. There they are described by the diagonal Hamiltonian with the effective potential given by $V^{\text{cl}}(x) + 2g\rho(x) - \partial_t \mathcal{K}$. Here $\rho(x)$ is the total density outside of the condensate support area, interacting with the quasiparticles through the Hartree-Fock potential.

Finally the remaining part of the action, which is responsible for the collisions of the quasiparticles and exchange of particles with the condensate, has the form $S^{\text{coll}} = S_2^{\text{coll}} + S_3^{\text{coll}} + S_4^{\text{coll}}$, where

$$\begin{aligned} S_2^{\text{coll}} &= -\frac{g}{2} \int \mathbf{dr} \, dt \left[\bar{\Phi}^{\text{q}} \Phi_0 (2\bar{\varphi}\varphi - 2\langle \bar{\varphi}\varphi \rangle + 2\bar{\varphi}^{\text{q}}\varphi^{\text{q}}) + \bar{\Phi}^{\text{q}} \bar{\Phi}_0 (\varphi\varphi + \varphi^{\text{q}}\varphi^{\text{q}}) + \text{c.c.} \right] \\ S_3^{\text{coll}} &= -\frac{g}{2} \int \mathbf{dr} \, dt \left[\bar{\Phi}^{\text{q}} (\bar{\varphi}\varphi\varphi + 2\bar{\varphi}^{\text{q}}\varphi^{\text{q}}\varphi + \bar{\varphi}\varphi^{\text{q}}\varphi^{\text{q}}) + \text{c.c.} \right. \\ &\quad \left. + (2\bar{\varphi}^{\text{q}}\bar{\varphi}\varphi + \bar{\varphi}\bar{\varphi}\varphi^{\text{q}} + \bar{\varphi}^{\text{q}}\bar{\varphi}^{\text{q}}\varphi^{\text{q}}) \Phi_0 + \text{c.c.} \right] \\ S_4^{\text{coll}} &= -\frac{g}{2} \int \mathbf{dr} \, dt \left[\bar{\varphi}^{\text{q}}\bar{\varphi}\varphi\varphi - 2\bar{\varphi}^{\text{q}}\varphi\langle \bar{\varphi}\varphi \rangle + \bar{\varphi}\bar{\varphi}^{\text{q}}\varphi^{\text{q}}\varphi^{\text{q}} + \text{c.c.} \right] \end{aligned} \quad (8.23)$$

here the subscripts indicate the number of quasiparticles involved in the corresponding collision processes.

We turn now to the quasiparticle dynamics specified by Eqs. (8.20) and (8.21). Notice that the equation of motion $(\tilde{\tau}_3 i \partial_t - \check{H}_{\text{qp}}) (\varphi, \bar{\varphi})^T = 0$, with $\check{H}_{\text{qp}}$ given by Eq. (8.22), coincides with Eq. (8.8) for the linearized dynamics of the Gross-Pitaevskii system. Of course, in the present case the condensate density

$\rho_0(x) = |\Phi_0|^2/2$ is not the same as the total density and must be determined through the modified Gross-Pitaevskii equation, which in turn needs the information about the quasiparticle density $\rho_{\text{qp}}(x)$. To diagonalize the quasiparticle Hamiltonian one needs to solve the Bogoliubov-deGennes equations,

$$(\tilde{\tau}_3 \epsilon_k - \check{H}_{\text{qp}}) \begin{pmatrix} u_k(\mathbf{r}) \\ v_k(\mathbf{r}) \end{pmatrix} = 0, \quad (8.24)$$

where k labels the full set of solutions, and $u_k(\mathbf{r})$ and $v_k(\mathbf{r})$ are two functions which may be normalized according to

$$\int \mathbf{dr} [u_k^*(\mathbf{r}) u_l(\mathbf{r}) - v_k^*(\mathbf{r}) v_l(\mathbf{r})] = \delta_{kl} \quad (8.25)$$

One can now define a new set of complex fields $\chi_k^{\text{cl}}(t)$ and $\chi_k^{\text{q}}(t)$ through the Bogoliubov transformation (cf. problem 2.10.2)

$$\begin{aligned} \varphi(\mathbf{r}, t) &= \sum_k [u_k(\mathbf{r}) \chi_k^{\text{cl}}(t) + v_k^*(\mathbf{r}) \bar{\chi}_k^{\text{cl}}(t)] \\ \varphi^{\text{q}}(\mathbf{r}, t) &= \sum_k [u_k(\mathbf{r}) \chi_k^{\text{q}}(t) + v_k^*(\mathbf{r}) \bar{\chi}_k^{\text{q}}(t)] \end{aligned} \quad (8.26)$$

In terms of these new fields the quasiparticle action (8.20) takes the standard Keldysh form

$$S_{\text{qp}} = \int dt \sum_k (\bar{\chi}_k^{\text{cl}}, \bar{\chi}_k^{\text{q}}) \begin{pmatrix} 0 & i\partial_t - \epsilon_k \\ i\partial_t - \epsilon_k & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \chi_k^{\text{cl}} \\ \chi_k^{\text{q}} \end{pmatrix} \quad (8.27)$$

Using the strategy of Chapter 6, one can proceed with writing the kinetic equation for the quasiparticles. To this end one needs an expression for the quasiparticle spectrum ϵ_k , which is so far implicit in the solutions of the Bogoliubov-deGennes equations (8.24). Focusing on the adiabatic effective potential and applying the Wigner transformation, one may label the spectrum with the set of local momenta $\mathbf{k}$, defined in a vicinity of a spatial point $\mathbf{r}$. As a result the spectrum is labeled as $\epsilon_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$, where a certain coarse graining of the coordinate space must be understood along with the fact that the momentum $\mathbf{k}$ cannot be smaller than the inverse size of the spatial coarse graining. The latter is in agreement with the choice of the quasiparticle field φ as a fast part of the full bosonic field ϕ . The small wavenumbers $\mathbf{k}$ are thus explicitly excluded from φ and therefore from χ . With this understanding the local spectrum $\epsilon_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ may be found by diagonalization of the quasiparticle Hamiltonian (8.21), with $\nabla_{\mathbf{r}} \rightarrow i\mathbf{k}$. This way, one finds for the spectrum:

$$\epsilon_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sqrt{\left(\frac{(\mathbf{k} - \nabla_{\mathbf{r}}\mathcal{K})^2}{2m} + V^{\text{cl}} + g|\Phi_0|^2 + 2g\rho_{\text{qp}} - \partial_t\mathcal{K} \right)^2 - \left| \frac{g}{2}\Phi_0^2 \right|^2} \quad (8.28)$$

Notice that if the condensate is in equilibrium, so that the relation (8.19) for the chemical potential holds, the quasiparticle spectrum coincides with the Bogoliubov spectrum for the condensate excitations, Eq. (8.11). In such a case the quasiparticle spectrum is gapless and linear at small wavenumbers with the local sound velocity $c(\mathbf{r}) = \sqrt{g\rho_0(\mathbf{r})/m}$, determined by the local condensate density. In the same approximation the Bogoliubov coefficients are given by $u_k(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$ and $v_k(\mathbf{r}) = v_{\mathbf{k}}e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$, where the $\mathbf{k}$ index represents the Fourier transform over the fast part of the $\mathbf{r}$ -dependence and the slow functions $u_{\mathbf{k}}$ and $v_{\mathbf{k}}$ are given by

$$|u_{\mathbf{k}}|^2, |v_{\mathbf{k}}|^2 = \frac{1}{2\epsilon_{\mathbf{k}}} \left(\pm\epsilon_{\mathbf{k}} + \frac{(\mathbf{k} - \nabla_{\mathbf{r}}\mathcal{K})^2}{2m} + V^{\text{cl}} + g|\Phi_0|^2 + 2g\rho_{\text{qp}} - \partial_t\mathcal{K} \right). \quad (8.29)$$

One can now define the quasiparticle distribution functions $F(x, x')$ in the usual way through Eq. (6.22). Performing the Wigner transformation and restricting it to the mass-shell, one obtains the distribution function $\tilde{F}(\mathbf{r}, t, \mathbf{k}) = F(\mathbf{r}, t, \mathbf{k}, \epsilon_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}))$, which obeys the kinetic equation

$$[\partial_t + \nabla_{\mathbf{k}}\epsilon_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})\nabla_{\mathbf{r}} - \nabla_{\mathbf{r}}\epsilon_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})\nabla_{\mathbf{k}}] \tilde{F}(\mathbf{r}, t, \mathbf{k}) = I^{\text{coll}} [\tilde{F}, \Phi_0] \quad (8.30)$$

We put the quasiparticle weight $\tilde{Z} = 1$, which is appropriate for the weakly interacting Bose gas. The collision integral on the right-hand side is a functional of the quasiparticle distribution function as well as the space- and time-dependent condensate wavefunction $\Phi_0(x)$. Once the solution of the kinetic equation (8.30) is known one can determine the quasiparticle density $\rho_{\text{qp}}(x) = \langle \varphi(x)\bar{\varphi}(x) \rangle / 2$ to feed it self-consistently into the local energy spectrum (8.28):

$$\langle \varphi(x)\bar{\varphi}(x) \rangle = \sum_{\mathbf{k}} \left[|u_{\mathbf{k}}(x)|^2 + |v_{\mathbf{k}}(x)|^2 \right] \langle \chi_{\mathbf{k}}\bar{\chi}_{\mathbf{k}} \rangle = \sum_{\mathbf{k}} \left[|u_{\mathbf{k}}|^2 + |v_{\mathbf{k}}|^2 \right] \tilde{F}(x, \mathbf{k}) \quad (8.31)$$

The modified Gross-Pitaevskii equation (8.18) for the condensate wavefunction and the kinetic equation (8.30) for the quasiparticle distribution function are the basis of the quasi-classical description of Bose condensation.

12.3.3 8.3 Collisionless Relaxation of the Condensate Fluctuations

Hereafter we shall restrict ourselves to the intermediate range of temperatures (or, better, characteristic quasiparticle energies, if the temperature is not well defined) given by

$$\mu(0) < T; \epsilon_{\mathbf{k}} < T_c \quad (8.32)$$

where $\mu(0) = g\rho = mc^2$ is the zero-temperature chemical potential and $T_c \propto \rho^{2/3}/m$ is the critical temperature of condensation. For higher temperatures the system is normal and may be described by the usual kinetic equation. On the other hand, at lower temperatures it is already very close to the zero-temperature condensate, described by the Gross-Pitaevskii equation (8.5). (There are interesting and important phenomena, such as, for example, Beliaev damping [129], which are present in the low-temperature regime and which we are going to miss, see Problem 8.9.4.) Under condition (8.32) the expression for the energy spectrum may be substantially simplified to yield

$$\epsilon_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \approx \frac{(\mathbf{k} - \nabla_{\mathbf{r}}\mathcal{K})^2}{2m} + V^{\text{cl}} + g|\Phi_0|^2 + 2g\rho_{\text{qp}} - \partial_t\mathcal{K} \quad (8.33)$$

whereas $u_k \approx 1$ and $v_k \approx 0$. This is the Popov approximation, already adopted previously, where one neglects anomalous averages of the φ fields as being small in factor $\sim \mu(0)/\epsilon_{\mathbf{k}} \ll 1$. In essence one avoids Bogoliubov rotation and disregards the difference between the initial quasiparticle field φ and the rotated one χ .

With the quasiparticle spectrum given by Eq. (8.33) (and neglecting $\nabla_{\mathbf{r}}^2\mathcal{K}$) the kinetic equation (8.30) acquires the form

$$\left[\partial_t + \mathbf{v}_{\mathbf{k}}\nabla_{\mathbf{r}} - \nabla_{\mathbf{r}} \left(V^{\text{cl}} + g|\Phi_0|^2 + 2g\rho_{\text{qp}} - \partial_t\mathcal{K} \right) \nabla_{\mathbf{k}} \right] \tilde{F}(\mathbf{r}, t, \mathbf{k}) = 0 \quad (8.34)$$

where $\mathbf{v}_{\mathbf{k}} = (\mathbf{k} - \nabla_{\mathbf{r}}\mathcal{K})/m$ and we have omitted the collision integral for a while. The quasiparticle density is given by $\rho_{\text{qp}}(x) = \sum_{\mathbf{k}} n_{\text{qp}}(x, \mathbf{k})$, where $\tilde{F}(x, \mathbf{k}) = 2n_{\text{qp}}(x, \mathbf{k}) + 1$.

The system of the collisionless kinetic equation (8.34) and the modified Gross-Pitaevskii equation (8.18) is analogous to the system of Vlasov equations (7.8), (7.11) for plasma. In the latter case one has the Poisson equation instead of the Gross-Pitaevskii one. One can thus adopt the strategy of Section 7.2 to investigate collisionless Landau damping of small fluctuations of the condensate. To this end we shall assume that the quasiparticle distribution function is close to the equilibrium one, $\tilde{F}(x, \mathbf{k}) = \tilde{F}^{\text{eq}}(\epsilon_{\mathbf{k}}) + \tilde{F}^{(1)}(x, \mathbf{k})$, where $\tilde{F}^{\text{eq}}(\epsilon_{\mathbf{k}}) = \coth \epsilon_{\mathbf{k}}/2T$. The corresponding perturbation of the quasiparticle density is given by $\delta\rho_{\text{qp}}(x) = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \tilde{F}^{(1)}(x, \mathbf{k})$. We shall also assume that the system is translationally invariant ($V^{\text{cl}} = 0$) and the condensate wavefunction is close to a constant solution, $\Phi_0(x) = \Phi_0 + \phi(x)$, where Φ_0 is found from Eq. (8.19) and particle conservation, while the phase is fixed as $\mathcal{K} = \mu t$. The change in the condensate density is given by $\delta\rho_0 = \frac{1}{2} (\bar{\Phi}_0\phi(x) + \bar{\phi}(x)\Phi_0)$.

The system of linearized kinetic and modified Gross-Pitaevskii equations takes the form

$$\begin{aligned} \left[\partial_t^{\text{R}} + \mathbf{v}_{\mathbf{k}}\nabla_{\mathbf{r}} \right] \tilde{F}^{(1)}(x, \mathbf{k}) &= 2g\nabla_{\mathbf{r}} [\delta\rho_0(x) + \delta\rho_{\text{qp}}(x)] \nabla_{\mathbf{k}} \tilde{F}^{\text{eq}}(\epsilon_{\mathbf{k}}) \\ i\partial_t\phi(x) &= -\frac{\nabla_{\mathbf{r}}^2\phi(x)}{2m} + \frac{g}{2} |\Phi_0|^2 \phi(x) + \frac{g}{2} \Phi_0^2 \bar{\phi}(x) + 2g\delta\rho_{\text{qp}}(x)\Phi_0 \end{aligned}$$

where in the second line we employed Eq. (8.19) for unperturbed densities. We have indicated the retarded nature of the time derivative in the kinetic operator, since it is going to play an important role in what follows. We perform now a Fourier transformation from $x = \mathbf{r}, t$ to $q = \mathbf{q}, \omega$, and solve the kinetic equation as $\tilde{F}^{(1)}(q, \mathbf{k}) = -2g [\delta\rho_0(q) + \delta\rho_{\text{qp}}(q)] \mathbf{q}\nabla_{\mathbf{k}} \tilde{F}^{\text{eq}} / (\omega + i0 - \mathbf{v}_{\mathbf{k}}\mathbf{q})$. We then substitute this solution into the expression for the quasiparticle density,

$$\delta\rho_{\text{qp}}(q) = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \tilde{F}^{(1)}(q, \mathbf{k}) = -2g\Pi^{\text{R}}(q) [\delta\rho_0(q) + \delta\rho_{\text{qp}}(q)] \quad (8.35)$$

where the retarded component of the quasiparticle polarization matrix is defined as (cf. Eq. (7.13))

$$\Pi^{\text{R}}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\mathbf{q} \nabla_{\mathbf{k}} F^{\text{eq}}(\epsilon_{\mathbf{k}})}{\omega + i0 - \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \mathbf{q}} = \sum_{\mathbf{k}} \frac{\mathbf{q} \nabla_{\mathbf{k}} n_{\text{B}}(\epsilon_{\mathbf{k}})}{\omega + i0 - \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \mathbf{q}} \quad (8.36)$$

The quasiparticle density is thus $\delta\rho_{\text{qp}}(q) = -\delta\rho_0(q)2g\Pi^{\text{R}}(q)/[1 + 2g\Pi^{\text{R}}(q)]$. In the limit of strong interactions this expression enforces the constant total density, that is, $\delta\rho_{\text{qp}} \approx -\delta\rho_0$. On the contrary, we focus on weakly interacting gas, where $g\Pi^{\text{R}} \ll 1$ and therefore

$$\delta\rho_{\text{qp}}(q) = -2g\Pi^{\text{R}}(q)\delta\rho_0(q) \quad (8.37)$$

The linearized Gross-Pitaevskii equation and its complex conjugate take the form

$$\begin{pmatrix} \omega - \mathbf{q}^2/(2m) - \frac{g}{2}|\Phi_0|^2 & -\frac{g}{2}\Phi_0^2 \\ -\frac{g}{2}\bar{\Phi}_0^2 & -\omega - \mathbf{q}^2/(2m) - \frac{g}{2}|\Phi_0|^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi \\ \bar{\phi} \end{pmatrix} = 2g\delta\rho_{\text{qp}} \begin{pmatrix} \Phi_0 \\ \bar{\Phi}_0 \end{pmatrix}.$$

Finding from here $\phi(q)$ and $\bar{\phi}(q)$ and substituting them into the expression for the condensate density perturbation $\delta\rho_0(q) = \frac{1}{2}(\bar{\Phi}_0\phi(q) + \bar{\phi}(q)\Phi_0)$, one finds

$$\delta\rho_0(q) = \frac{g}{m} |\Phi_0|^2 \frac{\mathbf{q}^2}{\omega^2 - \omega_{\text{B}}^2(\mathbf{q})} \delta\rho_{\text{qp}}(q). \quad (8.38)$$

This expression is consistent with Eq. (8.37) only if

$$\omega^2 - \omega_{\text{B}}^2(\mathbf{q}) = -c^2 \mathbf{q}^2 4g\Pi^{\text{R}}(\mathbf{q}, \omega), \quad (8.39)$$

where we have used that the sound velocity is $c^2 = g|\Phi_0|^2/(2m)$. Solving the last expression for $\omega = \tilde{\omega}_{\text{B}}(\mathbf{q})$ gives the dispersion relation for the combined condensate and quasiparticle cloud oscillation mode. The real part of the right-hand side leads to a small renormalization of the sound velocity, which we disregard. More interestingly, the right-hand side contains the imaginary part, which describes the damping of the condensate Bogoliubov mode,

$$\tilde{\omega}_{\text{B}}(\mathbf{q}) = \omega_{\text{B}}(\mathbf{q}) - i\Gamma_2(\mathbf{q}) \quad (8.40)$$

According to Eq. (8.39) the damping rate is given by

$$\Gamma_2(\mathbf{q}) = \frac{c^2 \mathbf{q}^2}{\omega_{\text{B}}(\mathbf{q})} 2g \text{Im} \Pi^{\text{R}}(\mathbf{q}, \omega_{\text{B}}(\mathbf{q})). \quad (8.41)$$

Restricting ourselves to the small wavenumbers $q < mc$, approximating the quasiparticle dispersion as $\epsilon_{\mathbf{k}} \approx \mathbf{k}^2/(2m)$ and employing Eqs. (8.36) and (7.15) we find [131]

$$\Gamma_2(\mathbf{q}) = -cq2\pi g \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} q \partial_{k_z} n_{\text{B}}(\epsilon_{\mathbf{k}}) \delta\left(cq - \frac{k_z q}{m}\right) = \frac{gmTq}{\pi}, \quad (8.42)$$

where the z -axis is taken to be along the $\mathbf{q}$ vector. At small wavenumbers Γ_2 is linear in q , and thus the relative damping rate $\Gamma_2/\omega_{\text{B}} \propto T\sqrt{\mu(0)}/T_c^{3/2} \ll 1$ is a $\mathbf{q}$ -independent constant, which is linear in temperature and small in the entire temperature range (8.32). (Since the integral is dominated by the $k \sim mc$ region, where the Popov approximation is not quantitatively accurate, the numerical constant in Eq. (8.42) should not be taken too seriously.)

The nature of the damping rate (8.41) is very similar to the Landau damping of plasma oscillations. Quanta of the condensate fluctuations are absorbed by the relatively high-energy resonant quasiparticles. Therefore, if a non-equilibrium condensate vibration is excited, its energy is eventually channeled into the above-the-condensate quasiparticle cloud. This damping mechanism is very different from the zero-temperature Beliaev damping [129]. The latter describes a condensate excitation decaying into two smaller energy condensate excitations. Such a process is energetically allowed due to a small positive curvature of the Bogoliubov dispersion (8.11) and exhibits a very sharp momentum dependence of the form $\Gamma_{\text{Beliaev}}(\mathbf{q}) \propto q^5 / (m\rho_0)$ for $q < mc$, see Problem 8.9.4. Beliaev damping is also present at finite temperatures. However, for $T > mc^2$ the collisionless damping (8.41) is by far the dominant mechanism.

According to FDT any damping mechanism must be accompanied by fluctuations. We shall discuss the corresponding fluctuation mechanism in Section 8.5.

12.3.4 8.4 Condensate Growth and Collapse

Although the modified Gross-Pitaevskii equation (8.18) and the collisionless kinetic equation (8.34) describe energy exchange between the condensate and the quasiparticles, they do not describe the condensate growth or collapse. The reason is that Eq. (8.18) conserves the total number of particles in the condensate, while Eq. (8.34) conserves the total number of quasiparticles above the condensate. On the other hand, the condensate growth and collapse are clearly associated with the particle exchange between the two. To take into account this effect one has to resort

to the three-particle part of the collision action, S_3^{coll} , Eq. (8.23). To this end we need to average $\exp\{iS^{\text{coll}}\}$ over the fluctuations of the quasiparticle fields φ . For a weakly interacting gas this may be achieved with the following approximation:

$$\langle e^{iS^{\text{coll}}} \rangle \approx 1 + i \langle S^{\text{coll}} \rangle - \frac{1}{2} \langle (S^{\text{coll}})^2 \rangle \approx e^{-\frac{1}{2} \langle (S^{\text{coll}})^2 \rangle}; \quad \delta S = \frac{i}{2} \langle (S^{\text{coll}})^2 \rangle, \quad (8.43)$$

where the angular brackets denote averaging over Gaussian φ -fluctuations, governed by the quasiparticle action (8.20), and we took into account that $\langle S^{\text{coll}} \rangle = 0$.

Applying Eq. (8.43) to S_3^{coll} , one finds the second-order correction to the Gross-Pitaevskii action, δS_3 , which is a quadratic form of Φ_0 and Φ^q as well as their complex conjugates. According to the causality structure, this quadratic form does not contain terms with only classical components Φ_0 and $\bar{\Phi}_0$, since all the terms in the action must have at least the first power of quantum fields Φ^q or $\bar{\Phi}^q$. In the Popov approximation, where one disregards the anomalous averages $\langle \varphi\varphi \rangle$ and $\langle \bar{\varphi}\bar{\varphi} \rangle$ and keeps only the normal ones $\langle \varphi\bar{\varphi} \rangle$, no anomalous terms, such as, for example, $\Phi^q\Phi_0$, are generated in δS_3 . As a result, the δS_3 action possesses the same structure as the Gross-Pitaevskii action (8.15) and contains only the terms proportional to $\bar{\Phi}^q\Phi_0$, $\bar{\Phi}_0\Phi^q$ and $\bar{\Phi}^q\Phi^q$. The first two describe particle exchange between the condensate and the quasiparticle cloud, while the last one is responsible for the fluctuations of the condensate.

We first focus on the particle exchange terms $\sim \bar{\Phi}^q\Phi_0$. They are generated by the product of the first and second lines in S_3^{coll} , Eq. (8.23). Due to the causality constraints only the first term from the first line $\sim \bar{\varphi}\varphi\varphi$, being multiplied by the three terms from the second line, provides nonzero contributions. The corresponding three diagrams are depicted in Fig. 8.1 and the corresponding contribution to the action δS_3 takes the following form (since in the Popov approximation we have disregarded anomalous averages, all the Green functions are the normal bosonic Green functions; see Chapter 6):

$$\delta S_{3a} = \frac{g^2}{4} \int dx dx' \bar{\Phi}^q(x) \Phi_0(x') \left[4G^K(x', x) G^K(x, x') G^R(x, x') + 2G^A(x', x) G^K(x, x') G^K(x, x') + 2G^A(x', x) G^R(x, x') G^R(x, x') \right]. \quad (8.44)$$

Now we (i) change both $G^R(x, x')$ in the last term on the right-hand side of Eq. (8.44) to $G^R(x, x') - G^A(x, x')$, since $G^A(x', x) G^A(x, x') = 0$ due to causality; (ii) perform a Wigner transformation, using the fact that the condensate fields are slow, and write $G^K \xrightarrow{\text{WT}} -2\pi i F(x, k) \delta(\epsilon - \epsilon_{\mathbf{k}}(x))$, while $G^R - G^A \xrightarrow{\text{WT}} -2\pi i \delta(\epsilon - \epsilon_{\mathbf{k}}(x))$, where the spectrum $\epsilon_{\mathbf{k}}(x)$ is given by Eq. (8.33); (iii) perform the energy integrals using delta-functions; (iv) symmetrize the first term on the right-hand side of Eq. (8.44) with respect to $\mathbf{k}$ and $\mathbf{p} - \mathbf{k}$ arguments (see Fig. 8.1(a)). Including also

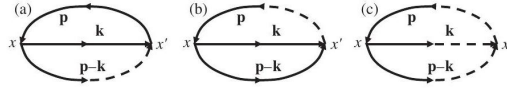


Figure 8.1 Three diagrams for the $\delta S_{3a} \sim \bar{\Phi}^q(x) \Phi_0(x')$ contribution to the effective Gross-Pitaevskii action. Diagram (a) carries a combinatorial factor of 4, while (b) and (c) carry a factor of 2. Full lines correspond to φ and dashed lines to φ^q fields. the conjugated part $\sim \bar{\Phi}_0 \Phi^q$ and keeping only the imaginary part of the square brackets in Eq. (8.44) (the real part constitutes an insignificant renormalization of the quasiparticle density in Eq. (8.16)), we find

$$\delta S_{3a} = i \int dx (\bar{\Phi}^q \Phi_0 - \bar{\Phi}_0 \Phi^q) \Gamma_3(x), \quad (8.45)$$

where

$$\Gamma_3(x; \tilde{F}) = \frac{\pi g^2}{2} \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{k}} \delta(\epsilon_{\mathbf{p}} - \epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{p}-\mathbf{k}}) \times [\tilde{F}(x, \mathbf{p})(\tilde{F}(x, \mathbf{k}) + \tilde{F}(x, \mathbf{p} - \mathbf{k})) - \tilde{F}(x, \mathbf{k})\tilde{F}(x, \mathbf{p} - \mathbf{k}) - 1] \quad (8.46)$$

This is a particle-non-conserving term in the modified Gross-Pitaevskii equation. The latter is derived by variation of the action with respect to $\bar{\Phi}^q$ and reads as $[i\partial_t - H_{\text{GP}}] \Phi_0 = -i\Gamma_3 \Phi_0$. As a result, the total number of particles in the condensate evolves according to

$$\partial_t \int d\mathbf{r} |\Phi_0|^2 = - \int d\mathbf{r} 2\Gamma_3(\mathbf{r}, t) |\Phi_0|^2 \quad (8.47)$$

where we took into account that the superfluid current is absent at the boundaries. Notice that growth of the condensate corresponds to a negative Γ_3 , while collapse corresponds to a positive one.

The physical process behind these expressions is that of a fast quasiparticle with momentum $\mathbf{p}$ hitting the condensate and knocking out two quasiparticles with momenta $\mathbf{k}$ and $\mathbf{p} - \mathbf{k}$. To see it most clearly one may substitute $\tilde{F}(\mathbf{k}) = 2n_{\text{qp}}(\mathbf{k}) + 1$ to find for the expression in the square brackets on the right-hand side of Eq. (8.46), $4[n_{\text{qp}}(\mathbf{p})(n_{\text{qp}}(\mathbf{k}) + n_{\text{qp}}(\mathbf{p} - \mathbf{k}) + 1) - n_{\text{qp}}(\mathbf{k})n_{\text{qp}}(\mathbf{p} - \mathbf{k})]$. The first part here includes induced and spontaneous processes, mentioned earlier. The last term is the opposite process where two quasiparticles $\mathbf{k}$ and $\mathbf{p} - \mathbf{k}$ "sink" into the condensate creating a single particle $\mathbf{p}$. If the quasiparticle occupation is the equilibrium one $\tilde{F}^{\text{eq}}(\mathbf{k}) = \coth \epsilon_{\mathbf{k}}/2T$, the two processes exactly cancel each other and the condensate is neither growing nor shrinking. Indeed, in view of the "magic" identity (6.59) one finds

$$\Gamma_3(\mathbf{r}; \tilde{F}^{\text{eq}}) = 0 \quad (8.48)$$

On the other hand, if the equilibrium distribution function has a positive energy offset $\tilde{F}(\mathbf{k}) = \coth(\epsilon_{\mathbf{k}} + \Lambda)/2T$ (we do not use the notation μ for $-\Lambda$, since the latter differs from the thermodynamic chemical potential in the interacting system), the condensate can't be stable and collapses with the rate

$$\begin{aligned} \Gamma_3(x) &= \frac{g^2}{2} \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^\infty p^2 dp \int_0^\infty k^2 dk \int_{-1}^1 d \cos \theta \delta\left(\frac{pk}{m} \cos \theta - \frac{k^2}{m} - V\right) \mathcal{I}(\epsilon_p, \epsilon_k) \\ &= \frac{g^2}{2} \frac{m^3}{(2\pi)^3} \int_{2V}^\infty d\epsilon_p \int_V^{\epsilon_p - V} d\epsilon_k \mathcal{I}(\epsilon_p, \epsilon_k) = \frac{g^2 m^3 T^2}{4\pi^3} C\left(\frac{\Lambda}{T}, \frac{V^{\text{cl}}(x)}{\Lambda}\right) \end{aligned} \quad (8.49)$$

where the quasiparticle spectrum is taken as $\epsilon_k(x) = k^2/2m + V^{\text{cl}}(x)$ and we used the notation $V = V^{\text{cl}}(x)$. The combination of the distribution functions under the integrals with the help of identity (6.59) may be written as

$$\mathcal{I}(\epsilon_p, \epsilon_k) = \left(\coth \frac{\epsilon_p + \Lambda}{2T} - \coth \frac{\epsilon_p + 2\Lambda}{2T} \right) \left(\coth \frac{\epsilon_k + \Lambda}{2T} + \coth \frac{\epsilon_p - \epsilon_k + \Lambda}{2T} \right).$$

Performing the integrals, one finds the dimensionless function $C(x, y)$. It has the following asymptotic behavior: $C = \pi^2/6$ for $x \ll 1$ and $y \ll 1$, while $C = 2 \ln 2/y$ for $x \ll 1$ and $y \gg 1$ and $C = e^{-x}$ for $x \gg 1$. The first of these asymptotic results tells us that in a wide range of parameters $V^{\text{cl}}(x) < \Lambda < T$ the condensate collapse rate $\Gamma_3(x)$ is practically a constant given by

$$\Gamma_3^{\text{max}} = \frac{2\pi}{3} m a_s^2 T^2 \quad (8.50)$$

where we took into account that $g = 4\pi a_s/m$. For smaller $\Lambda < V^{\text{cl}}(x), T$ the rate decreases to zero as $\Gamma_3(x) \propto \Lambda g^2 m^3 T^2 / V^{\text{cl}}(x)$ in agreement with Eq. (8.48). Notice that for the small central region of the trap $V^{\text{cl}}(x) < g\rho_0$ the Popov approximation is not valid and one should use $g\rho_0$ instead of $V^{\text{cl}}(x)$ in the last expression for Γ_3 . To fix the numerical coefficient in such a regime one needs to go beyond the Popov approximation.

As an example of a growing condensate, consider a step of evaporative cooling. In this process, the high-energy tail of the Bose distribution is removed (evaporated) above some threshold energy ϵ_0 , that is, $n_{\text{qp}}(\mathbf{k}) = 0$ for $\epsilon_{\mathbf{k}} > \epsilon_0$, while $n_{\text{qp}}(\mathbf{k}) = [e^{\epsilon_{\mathbf{k}}/T} - 1]^{-1} = n_B(\epsilon_{\mathbf{k}})$ for $\epsilon_{\mathbf{k}} < \epsilon_0$, here $T \leq T_c$. We focus on the central region of the trap, possibly already occupied by the condensate. The quasiparticle dispersion relation in this region is given by $\epsilon_{\mathbf{k}}(x) = \mathbf{k}^2/2m + g\rho_0(x) \approx \mathbf{k}^2/2m$. The quasiparticle cloud cools down below T and the condensate starts to grow with the rate $-\Gamma_3$ given by Eq. (8.46). The effect comes from the non-equilibrium region, where $\epsilon_{\mathbf{p}} > \epsilon_0$, while both $\epsilon_{\mathbf{k}} < \epsilon_0$ and $\epsilon_{\mathbf{p}-\mathbf{k}} = \epsilon_{\mathbf{p}} - \epsilon_{\mathbf{k}} < \epsilon_0$. As a result only the term with $n_{\text{qp}}(\mathbf{k})n_{\text{qp}}(\mathbf{p}-\mathbf{k})$ contributes:

$$\begin{aligned} -\Gamma_3 &= \frac{2g^2}{(2\pi)^3} \int_0^\infty p^2 dp \int_0^\infty k^2 dk \int_{-1}^1 d \cos \theta \delta\left(\frac{pk}{m} \cos \theta - \frac{k^2}{m}\right) n_{\text{qp}}(\mathbf{k}) n_{\text{qp}}(\mathbf{p}-\mathbf{k}) \\ &= \frac{2g^2 m^3}{(2\pi)^3} \int_0^{\epsilon_0} d\epsilon_k n_B(\epsilon_k) \int_{\epsilon_0}^{\epsilon_0 + \epsilon_k} d\epsilon_p n_B(\epsilon_p - \epsilon_k) = \frac{g^2 m^3 T^2}{4\pi^3} B(n_B(\epsilon_0)) \end{aligned} \quad (8.51)$$

where the dimensionless coefficient $B(n_0) = -n_0 \int_0^1 ds \ln(1-s)/[s(s+n_0)]$ depends on the Bose occupation number of the topmost unevaporated state $n_0 = [e^{\epsilon_0/T} - 1]^{-1}$. For $n_0 \gg 1$

one finds $B(n_0) = \pi^2/6$, while for $n_0 \ll 1$, $B(n_0) = (1 - \ln n_0) n_0 + O(n_0^2) \ll 1$. Notice that the condensate growth rate saturates for $\epsilon_0 \lesssim T$ at the already familiar constant value $-\Gamma_3(x) = \Gamma_3^{\max}$, Eq. (8.50), and practically does not increase upon farther reducing the threshold energy ϵ_0 (as long as $\epsilon_0 > \mu(0) = g\rho_0$ so the Popov approximation is applicable). According to Eq. (8.50) the time needed to grow the condensate diverges as T^{-2} at small temperatures. Also notice that $\Gamma_3^{\max}/\mu(0) \propto T^2\mu(0)/T_c^3 \ll 1$ in the entire temperature range (8.32) and therefore the amplitude growth is indeed a slow process. The initial exponential growth with the rate $-\Gamma_3$ saturates once the number of particles in the condensate approaches the value prescribed by the particle and energy conservation laws after equilibration. To describe this process quantitatively [132] one needs to follow the equilibration of the quasiparticle cloud; see Section 8.7.

Comparing the damping rate $\Gamma_2(\mathbf{q}) \sim a_s T q$, Eq. (8.42), and the characteristic growth rate $\Gamma_3^{\max} \sim m a_s^2 T^2$, Eq. (8.50), one finds the characteristic length scale

$$L_c = q_c^{-1} = (m a_s T)^{-1} \quad (8.52)$$

If the size of the condensate L_{trap} is less than L_c , then for all relevant wavenumbers $\Gamma_2(\mathbf{q}) > \Gamma_3^{\max}$. This means that the internal vibrations of the condensate are damped faster than they have time to develop. As a result, the condensate growth may be viewed as a smooth and "peaceful" increase of its size without excitation of internal degrees of freedom. In the opposite limit, $L_{\text{trap}} \gg L_c$, the condensate growth may be a turbulent process, which creates long-lived local structures on the scale L_c or larger.

12.3.5 8.5 Fluctuations

Collisionless damping, Section 8.3, must be accompanied by fluctuations (noise). Such noise is produced by the cloud of quasiparticles and acts on the condensate wavefunction. In equilibrium the corresponding noise amplitude is given by FDT. To evaluate it in a generic case we notice that it originates from the $2(\bar{\Phi}^q \Phi_0 + \bar{\Phi}_0 \Phi^q)(\bar{\varphi} \varphi + \bar{\varphi}^q \varphi^q)$ term in the two-particle collision action S_2^{coll} , Eq. (8.23). The corresponding diagrams for $\langle (S_2^{\text{coll}})^2 \rangle$ are depicted in Fig. 8.2, and the part of action δS_2 (see Eq. (8.43)) reads as

$$\begin{aligned} \delta S_2 &= g^2 \int dx dx' (\bar{\Phi}^q \Phi_0 + \bar{\Phi}_0 \Phi^q)_x \Pi^K(x, x') (\bar{\Phi}^q \Phi_0 + \bar{\Phi}_0 \Phi^q)_{x'} \\ \Pi^K(x, x') &= \frac{1}{2i} [G^K(x', x) G^K(x, x') + G^R(x', x) G^A(x, x') + G^A(x', x) G^R(x, x')] . \end{aligned} \quad (8.53)$$

The expression for the Keldysh component of the polarization operator coincides with Eq. (7.24). Proceeding exactly as in Section 7.4, one finds for the Wigner transform of $\Pi^K(x, x')$

$$\Pi^K(x, \mathbf{q}, \omega) = i\pi \sum_{\mathbf{k}} \delta(\omega + \epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) [\tilde{F}(x, \mathbf{k}) \tilde{F}(x, \mathbf{k} + \mathbf{q}) - 1] \quad (8.54)$$

As discussed there, it satisfies the FDT relation (7.26) in equilibrium. Notice that the $\bar{\Phi}^q \Phi_0(\varphi \varphi + \varphi^q \varphi^q)$ part of the S_2^{coll} action (8.23), being taken to second order, leads to the diagrams with the energy balance given by $\delta(\omega - \epsilon_{-\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})$. For our situation where $\mathbf{q}$ and ω are slow condensate variables, while $\mathbf{k}$ is the fast quasiparticle variable, this delta-function cannot be satisfied.

One can now perform the Hubbard-Stratonovich transformation with the help of an auxiliary real field $\xi(x)$:

$$e^{i\delta S_2} = \int \mathbf{D}[\xi] e^{-\frac{i}{4} \int dx dx' \xi(x) \Pi^{-1}(x, x') \xi(x') - i g \int dx \xi(x) (\bar{\Phi}^q \Phi_0 + \bar{\Phi}_0 \Phi^q)_x} \quad (8.55)$$

where $\int dx'' \Pi^{-1}(x, x'') \Pi^K(x'', x') = \delta(x - x')$. The first term in the exponent on the right-hand side of Eq. (8.55) specifies the real Gaussian colored noise with the correlator

$$\langle \xi(x + y/2) \xi(x - y/2) \rangle = -2i \sum_q^I e^{iqy} \Pi^K(x, q) \quad (8.56)$$

where summation over $q = \mathbf{q}, \omega$ is limited by the band designated for slow condensate degrees of freedom. Because of this limitation it is tempting to substitute

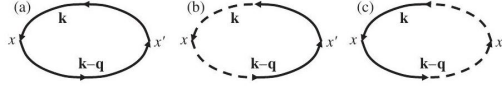


Figure 8.2 Three diagrams for $\Pi^K(x, x')$. Full lines correspond to φ and dashed lines to φ^q fields.

$\Pi^K(x, q)$ by $\Pi^K(x, 0)$, which would lead to the local noise correlator $\langle \xi(x) \xi(x') \rangle = -2i \Pi^K(x, 0) \delta(x - x')$. One should be aware, though, that the limit $\mathbf{q} \rightarrow 0$ and $\omega \rightarrow 0$ in Eq. (8.54) is not unique. The most sensible way is to put $\omega = \omega_B(\mathbf{q})$ (see Eq. (8.41)), but the limit $\mathbf{q} \rightarrow 0$ may still be a singular one. For example, employing Eq. (8.42) and FDT, one finds in equilibrium $\Pi^K(\mathbf{q}, cq) = 2imT^2/(\pi c^2 q)$. In the coordinate space this implies the nonlocal long-ranged correlator $\Pi^K(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \sim 1/(\mathbf{r} - \mathbf{r}')^2$.

The last term in the exponent in Eq. (8.55) is a part of the Gross-Pitaevskii action (8.15), which adds the real noise $g\xi(x)\Phi_0$ to the condensate equation of motion [133]

$$[i\partial_t - H_{GP}] \Phi_0 = -i\Gamma_3 \Phi_0 + g\xi(x)\Phi_0 \quad (8.57)$$

Notice that one can gauge out the noise as $\Phi_0 \rightarrow \Phi_0 e^{-ig \int dt \xi(x)}$. It then modifies the superfluid velocity as $\nabla_r \mathcal{K} \rightarrow \nabla_r \mathcal{K} + g \int dt \nabla_r \xi$. Therefore, it is the spatial gradient of the noise $\nabla_r \xi$, rather than the noise ξ itself, which has a physical significance. In other words, one can always add a spatially independent function $\tilde{\xi}(t)$ to the noise without changing any physics. It is possible and convenient thus to normalize the noise as $\int d\mathbf{r} \xi(\mathbf{r}, t) = 0$. It is also clear from Eq. (8.57) that the noise changes the phase, but not the amplitude of the condensate wavefunction Φ_0 .

Because of the last observation and the homogeneous form of the modified Gross-Pitaevskii equation (8.57) one may worry that, if at some initial time $\Phi_0 = 0$, the condensate never forms. This is, of course, not the case. One way to understand it is to acknowledge that even in the absence of the macroscopic condensate $|\Phi_0|^2 = 2\rho_0 \neq 0$. Indeed, we have defined the condensate as a band of slow degrees of freedom and therefore $\rho_0 = \sum_{\mathbf{q}} n_B(\mathbf{q}) > 0$, where the summation runs over such a slow band. The precise value of this initial ρ_0 is somewhat ambiguous. It is not really important, however, since once the condensate starts to form it grows exponentially with the rate Γ_3 . The memory of the precise initial conditions is therefore rapidly lost.

We shall discuss now how these considerations may be generalized away from equilibrium. To find fluctuations of the condensate density one needs to consider the $\bar{\Phi}^q \Phi^q$ term in the effective action. With the help of Eq. (8.43), it is found as an expectation value of the product of the first line in S_3^{coll} , Eq. (8.23), and its complex conjugate. There are five nontrivial diagrams generated upon Gaussian averaging over the φ -fluctuations; see Fig. 8.3. The corresponding analytical expression reads as

$$\begin{aligned} \delta S_{3\text{ b}} = \frac{g^2}{2} \int dx dx' \bar{\Phi}^q(x) \Phi^q(x') & [2G_{x',x}^A G_{x,x'}^R G_{x,x'}^K + 2G_{x',x}^R G_{x,x'}^A G_{x,x'}^K \\ & + G_{x',x}^K G_{x,x'}^K G_{x,x'}^K + G_{x',x}^K G_{x,x'}^R G_{x,x'}^R + G_{x',x}^K G_{x,x'}^A G_{x,x'}^A] \end{aligned}$$

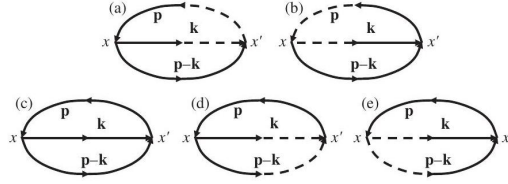


Figure 8.3 Five diagrams for the $\delta S_{3b} \sim \bar{\Phi}^q(x)\Phi^q(x')$ contribution to the effective Gross-Pitaevskii action. Full lines correspond to φ and dashed lines to φ^q fields. Diagrams (a), (b) carry a combinatorial factor 4, while (c)-(e) carry a factor 2.

$$= \frac{g^2}{2} \int dx dx' \bar{\Phi}^q(x) \Phi^q(x') \left[-2 (G_{x',x}^R - G_{x',x}^A) (G_{x,x'}^R - G_{x,x'}^A) G_{x,x'}^K \right. \\ \left. + G_{x',x}^K (G_{x,x'}^K G_{x,x'}^K + (G_{x,x'}^R - G_{x,x'}^A) (G_{x,x'}^R - G_{x,x'}^A)) \right] \quad (8.58)$$

where we employed the fact that $G^R(x',x)G^R(x,x') = G^R(x,x')G^A(x,x') = 0$, due to causality. Now we (i) perform a Wigner transformation, using the slowness of the condensate fields, to write $G^K \xrightarrow{\text{WT}} -2\pi i F(x,k)\delta(\epsilon - \epsilon_{\mathbf{k}}(x))$ and $G^R - G^A \xrightarrow{\text{WT}} -2\pi i \delta(\epsilon - \epsilon_{\mathbf{k}}(x))$; (ii) perform the energy integrals using deltafunctions; (iii) symmetrize the first term on the right-hand side of Eq. (8.58) with respect to $\mathbf{k}$ and $\mathbf{p} - \mathbf{k}$ arguments (see Fig. 8.3(a),(b)). This way we find for the complete Gross-Pitaevskii action

$$S_{\text{GP}} = \int dx (\bar{\Phi}_0, \bar{\Phi}^q) \begin{pmatrix} 0 & i\partial_t - H_{\text{GP}} - i\Gamma_3 \\ i\partial_t - H_{\text{GP}} + i\Gamma_3 & i\Gamma_3^K \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Phi_0 \\ \Phi^q \end{pmatrix} \quad (8.59)$$

where δS_{3b} provides the Keldysh component of the matrix, given by

$$\Gamma_3^K(x; \tilde{F}) = \pi g^2 \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{k}} \delta(\epsilon_{\mathbf{p}} - \epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{p}-\mathbf{k}}) \\ \times [-\tilde{F}(x, \mathbf{k}) - \tilde{F}(x, \mathbf{p} - \mathbf{k}) + \tilde{F}(x, \mathbf{p})(\tilde{F}(x, \mathbf{k})\tilde{F}(x, \mathbf{p} - \mathbf{k}) + 1)] \quad (8.60)$$

If the distribution function is the equilibrium one with a positive energy offset, $\tilde{F}(\mathbf{k}) = \coth(\epsilon_{\mathbf{k}} + \Lambda)/2T$, one finds, employing identity (6.59),

$$\Gamma_3^K = \coth \frac{\Lambda}{2T} 2\Gamma_3,$$

where Γ_3 is given by Eq. (8.49). This is a manifestation of FDT. Indeed, the energy offset Λ may be gauged away at the expense of giving the condensate field the rapidly rotating phase $\Phi_0 \rightarrow \Phi_0 e^{i\Lambda t}$. In such a gauge Λ is nothing but the frequency argument of the Keldysh matrix propagator $\hat{\Gamma}_3(\Lambda)$, where $\Gamma_3^R(\Lambda) = -\Gamma_3^A(\Lambda) = \Gamma_3$.

In the wide range of parameters $V^{\text{cl}}(x) < \Lambda < T$ one finds a spatially independent result $\Gamma_3^K(\Lambda) = 4T\Gamma_3^{\text{max}}/\Lambda$ (cf. Eq. (8.49)). For $\Lambda < V^{\text{cl}}(x)$ (including zero offset) Γ_3^K approaches a Λ -independent value $\Gamma_3^K(0) \propto T\Gamma_3^{\text{max}}/V^{\text{cl}}(x)$. (Similarly to the discussion after Eq. (8.49), one should actually use $\max\{V^{\text{cl}}(x), g\rho_0\}$ in the last expression.) Having a nonzero value of the Keldysh component $\Gamma_3^K(0)$ seemingly contradicts the absence of the condensate growth rate for $\Lambda = 0$, Eq. (8.48). In fact there is no contradiction: the omitted next term of the Wigner transformation in Eq. (8.45), $\sim \partial_\epsilon \partial_t$, has the form $\sim (\bar{\Phi}^q \partial_t \Phi_0 - \bar{\Phi}_0 \partial_t \Phi^q) \Gamma_3^K(0)/4T$, which is the exact FDT counterpart of the nonzero $\Gamma_3^K(0)$. This term provides damping of the condensate fluctuations, which is due to the three-particle collisions. Such damping, however, is weaker than the collisionless damping Γ_2 , Eqs. (8.41), (8.42), and therefore may be omitted. Nevertheless, in equilibrium $\Gamma_3^K/2\Gamma_3 = 2T/\max\{\Lambda, V^{\text{cl}}(x), g\rho_0\}$ in agreement with FDT.

Away from equilibrium one may evaluate $\langle |\Phi_0|^2 \rangle$ in the situation where the macroscopic condensate is unstable, that is, $\Gamma_3 > 0$ and $\langle \Phi_0 \rangle = 0$. This is exactly the case where fluctuations are especially important. One may thus neglect the nonlinear terms in H_{GP} and find by inversion of the matrix in Eq. (8.59)

$$\rho_0 = \frac{1}{2} \langle |\Phi_0|^2 \rangle = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}}' \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{\Gamma_3^K}{(\omega - \mathbf{q}^2/2m)^2 + \Gamma_3^2} = \sum_{\mathbf{q}}' \frac{\Gamma_3^K}{4\Gamma_3} \quad (8.61)$$

where it is important to understand that the momentum sum runs only over the band of slow degrees of freedom. In equilibrium one is back exactly to the value of ρ_0 , discussed previously. Away from equilibrium one may evaluate it employing Eqs. (8.46) and (8.60). In a generic case one can apply the Hubbard-Stratonovich transformation to the $\bar{\Phi}^{\mathbf{q}}(x)\Phi^{\mathbf{q}}(x)\Gamma_3^K$ term of the action (8.59) with the help of the auxiliary complex field $\zeta(x)$,

$$e^{i\delta S_3} = \int \mathbf{D}[\zeta] e^{-\int dx [\Gamma_3^K]^{-1} |\zeta(x)|^2 - i \int dx (\bar{\Phi}^{\mathbf{q}}(x)\zeta(x) + \bar{\zeta}(x)\Phi^{\mathbf{q}}(x))} \quad (8.62)$$

It defines the complex Gaussian noise with the correlator $\langle \bar{\zeta}(x)\zeta(x') \rangle = \Gamma_3^K(x) \delta(x - x')$, where only slow components of the noise should be retained. Such noise acts as a source in the modified Gross-Pitaevskii equation $i\partial_t \Phi_0 - \dots = \zeta(x)$. Its main effect is to generate a deterministic centrifugal potential in the complex plane of Φ_0 for the evolution of the radial variable $|\Phi_0|$. Indeed, the complex noise ζ induces diffusion on the complex plane $\Phi_0(\mathbf{q})$. The corresponding 2D diffusion equation for the probability distribution function is $\partial_t \mathcal{P} = (\Gamma_3^K/2) \nabla_{\Phi}^2 \mathcal{P}$, where $\nabla_{\Phi}^2 = \partial_{\text{Re}\Phi_0}^2 + \partial_{\text{Im}\Phi_0}^2$. Transforming it to the radial coordinate $r = |\Phi_0|$ and properly normalized distribution $W = r\mathcal{P}$, one finds $\partial_t W = (\Gamma_3^K/2) \partial_r (-W/r + \partial_r W)$, which in addition to the diffusion contains the centrifugal drift potential $\partial_r U = -\Gamma_3^K/2r$. The corresponding Langevin equation is $\dot{r} = \Gamma_3^K/2r + \text{noise}$, or finally in terms of $\rho_0 = r^2/2$ one has $\dot{\rho}_0 = \Gamma_3^K/2 + \sqrt{2\rho_0} \times \text{noise}$. While the stochastic noise part is less important than the real noise ξ , Eq. (8.56), the induced radial drift term $\Gamma_3^K/2$ is crucial to initiate nucleation of the condensate.

12.3.6 8.6 Semiclassical Dynamics of the Condensate

We put together now bits and pieces of the condensate dynamics in the presence of the quasiparticles (treated in the Popov approximation). The condensate amplitude $\Phi_0(x)$ obeys the stochastic [133] modified Gross-Pitaevskii equation (8.57). In addition to the Hartree-Fock interaction terms, incorporated into the Hamiltonian H_{GP} , it also includes particle exchange with the quasiparticle cloud Γ_3 , along with the Gaussian noise $\xi(x)$. We shall look for a solution of Eq. (8.57) in the form $\Phi_0(x) = \sqrt{2\rho_0(x)} \exp\{i\theta(x)\}$. The complex equation results in the two real ones: the radial one for the local condensate density $\rho_0(x)$ and the angular one for the superfluid velocity, defined as $\mathbf{v}_{\text{sf}}(x) = \nabla_{\mathbf{r}}(\theta(x) - \mathcal{K}(x))/m$,

$$\partial_t \rho_0 = -\nabla_{\mathbf{r}}(\rho_0 \mathbf{v}_{\text{sf}}) - 2\Gamma_3 \rho_0 + \sum_{\mathbf{q}} \frac{\Gamma_3^K}{2}; \quad (8.63)$$

$$\partial_t \mathbf{v}_{\text{sf}} = -\frac{1}{2} \nabla_{\mathbf{r}} \mathbf{v}_{\text{sf}}^2 - \frac{1}{m} \nabla_{\mathbf{r}} (V^{\text{cl}} + g\rho_0 + 2g\rho_{\text{qp}}) - g \nabla_{\mathbf{r}} \xi. \quad (8.64)$$

In the last equation we have neglected $\nabla_{\mathbf{r}}^2 \sqrt{\rho_0}$ as going beyond the accuracy with which we handled the Wigner transformations. Equation (8.63) is the modified continuity relation for the condensate density, which takes into account particle exchange with the quasiparticle cloud. The exchange rate Γ_3 and the noise-induced drift Γ_3^K are given by Eqs. (8.46) and

(8.60), respectively. As discussed previously, one should understand summation in the last term as running only over the band of slow degrees of freedom. For $T > T_c$, where $\Gamma_3 > 0$, it generates a small seed condensate density, which starts to grow exponentially when $\Gamma_3 < 0$. Equation (8.64) is the Euler equation with noise, associated with the collisionless damping of the condensate fluctuations by the quasiparticle cloud. Interaction with the latter occurs through the quasiparticle density ρ_{qp} , appearing on the right-hand side of Eq. (8.64). It is defined as $\rho_{qp}(x) = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} [\tilde{F}(x, \mathbf{k}) - 1]$. The corresponding Gaussian noise is specified by Eqs. (8.54) and (8.56).

To find the quasiparticle density $\rho_{qp}(x)$, the exchange rate $\Gamma_3(x)$ and the noise amplitude, one needs to know the quasiparticle distribution function $\tilde{F}(x, \mathbf{k})$. The evolution of the latter is given by the kinetic equation (8.30):

$$\partial_t \tilde{F} = -\mathbf{v}_{\mathbf{k}} \nabla_{\mathbf{r}} \tilde{F} + \nabla_{\mathbf{r}} \epsilon_{\mathbf{k}} \nabla_{\mathbf{k}} \tilde{F} + I_3^{\text{coll}} [\tilde{F}, \rho_0, \mathbf{v}_{\text{sf}}] + I_4^{\text{coll}} [\tilde{F}, \rho_0, \mathbf{v}_{\text{sf}}] \quad (8.65)$$

where $\mathbf{v}_{\mathbf{k}} = \nabla_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}}$. The three- and four-particle collision integrals $I_{3,4}^{\text{coll}}$ are discussed in Section 8.7 and are given by Eqs. (8.73) and (8.79), respectively. Equations (8.63)-(8.65) are the three evolution equations for the condensate density $\rho_0(x)$, the superfluid velocity $\mathbf{v}_{\text{sf}}(x)$, and the quasiparticle distribution function $\tilde{F}(x, \mathbf{k})$. If some initial conditions are specified, for example, a non-equilibrium quasiparticle distribution and zero condensate density, one may iterate them forward in time to follow formation of the condensate and equilibration of the quasiparticle cloud [132].

To complete the scheme one needs to specify the choice of the local phase $\mathcal{K}(x)$, which in turn determines the quasiparticle energies $\epsilon_{\mathbf{k}}(x)$ entering the kinetic equation (8.65). The criterion for such a choice is to facilitate a maximal scale separation between the fast and slow degrees of freedom. If the condensate is already present in the entire volume, one wants to make its wavefunction $\Phi_0(x)$ the slowest variable. This is the case if Φ_0 is purely real. Indeed, this eliminates relatively fast phase rotations and leaves only slow amplitude variations. It is achieved by the choice of $\mathcal{K}$ that makes $\theta(x)$ as small as possible. Putting $\theta = 0$ in Eq. (8.64), one finds $\partial_t \mathcal{K}(x) = V^{\text{cl}} + g\rho_0 + 2g\rho_{qp}$, which upon substitution in the quasiparticle energy spectrum in the Popov approximation, Eq. (8.33), yields

$$\epsilon_{\mathbf{k}}(x) = \frac{\mathbf{k}^2}{2m} + \mathbf{k} \mathbf{v}_{\text{sf}}(x) + g\rho_0(x) \quad (8.66)$$

Notice that the external potential $V^{\text{cl}}(x)$ does not enter the local energy spectrum (8.66) nor does the drift part of the kinetic equation $\nabla_{\mathbf{r}} \epsilon_{\mathbf{k}} \nabla_{\mathbf{k}} \tilde{F}$. (It still appears, of course, in the Euler equation.) This effect is due to the Hartree-Fock screening of the potential by a nonuniform condensate.

The last feature makes the spectrum (8.66) inconvenient for the trap geometry. In a trap the condensate occupies only a relatively small central region. The quasiparticles, on the other hand, spread over a much wider volume. The choice of gauge, where $\theta = 0$, makes the Euler equation for the phase $\mathcal{K}$ formally applicable everywhere, even outside the condensate region. In the latter case it specifies the "vector potential" gauge for the quasiparticles. This is the reason why outside the condensate region (where there is no screening) the quasiparticle spectrum (8.66) does not include the scalar potential of the trap, $V^{\text{cl}}(x)$. It is traded for the "vector potential" $\mathbf{v}_{\text{sf}}(x)$. The disadvantage is that the latter exhibits fast time-dependence, even if the trap potential $V^{\text{cl}}(\mathbf{r})$ is completely static. Therefore, this choice of $\mathcal{K}$, while making the condensate slow, exposes the peripheral quasiparticles to a fast vector potential.

To avoid this effect it is convenient to choose the phase $\mathcal{K}$ to be spatially uniform. It then drops out of the Euler equation, which is now solely limited to the condensate region, where $\rho_0 > 0$. A way to make the complex condensate wavefunction as slow as possible is to demand that its average phase does not evolve, that is, $\partial_t \int_{\rho_0 > 0} d\mathbf{r} \theta(\mathbf{r}, t) = 0$, where the integral runs

over the volume occupied by the condensate. Finding $\theta(\mathbf{r}, t) - \mathcal{K}(t)$ from the real part of Eq. (8.57), one obtains

$$\partial_t \mathcal{K}(t) = \frac{1}{\mathcal{V}(t)} \int_{\rho_0 > 0} d\mathbf{r} \left[\frac{\mathbf{v}_{\text{sf}}^2}{2m} + V^{\text{cl}}(\mathbf{r}, t) + g\rho_0(\mathbf{r}, t) + 2g\rho_{\text{qp}}(\mathbf{r}, t) \right] \quad (8.67)$$

where $\mathcal{V}(t) = \int_{\rho_0 > 0} d\mathbf{r}$ is the volume of the condensate. Notice that in equilibrium this condition coincides with Eq. (8.19), as it should. The quasiparticle spectrum (8.33) in the Popov approximation is now given by

$$\epsilon_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) \approx \frac{\mathbf{k}^2}{2m} + V^{\text{cl}}(\mathbf{r}, t) + 2g\rho_0(\mathbf{r}, t) + 2g\rho_{\text{qp}}(\mathbf{r}, t) - \partial_t \mathcal{K}(t) \quad (8.68)$$

where $\partial_t \mathcal{K}(t)$ is a spatially uniform, time-dependent chemical potential. One should not fix it with the particle number conservation, as was done in equilibrium; see Eq. (8.19). Instead, it is determined by the self-consistent evolution of the condensate density and current through Eq. (8.67). This gauge is convenient for treating the quasiparticles outside the condensate region. It fails to acknowledge, though, the quasiparticles' drag by the superfluid velocity $\mathbf{v}_{\text{sf}}$ inside the condensate region. The corresponding effect is now delegated to the continuity equation for ρ_0 , which in turn affects the quasiparticles through Eqs. (8.67) and (8.68). If superfluid currents are not expected to last for a long time, it seems to be worth the trade.

12.3.7 8.7 Quasiparticle Collision Integral

The three-quasiparticle self-energy in second order in the interaction constant is given by the square of the second line in S_3^{coll} , Eq. (8.23). In the Popov approximation, where one disregards anomalous averages, there are six diagrams for $\Sigma_3^K(x, x')$, Fig. 8.4(a)-(f), and three for $\Sigma_3^R(x, x')$, Fig. 8.4(g)-(i). The corresponding analytical expressions are

$$\Sigma_3^K(x, x') = \frac{ig^2}{4} |\Phi_0|^2 \left[4G_{x',x}^K G_{x,x'}^K + 4G_{x',x}^R G_{x,x'}^A + 4G_{x',x}^A G_{x,x'}^R + 2G_{x,x'}^K G_{x,x'}^K + 2G_{x,x'}^A G_{x,x'}^A + 2G_{x,x'}^R G_{x,x'}^R \right] \quad (8.69)$$

$$\Sigma_3^R(x, x') = \frac{ig^2}{4} |\Phi_0|^2 \left[4G_{x',x}^A G_{x,x'}^K + 4G_{x',x}^K G_{x,x'}^R + 4G_{x,x'}^R G_{x,x'}^K \right], \quad (8.70)$$

where we employed slowness of Φ_0 fields to suppress their x -dependence. Due to causality $G_{x',x}^R G_{x,x'}^A + G_{x',x}^A G_{x,x'}^R = - (G_{x',x}^R - G_{x',x}^A) (G_{x,x'}^R - G_{x,x'}^A)$ and $(G_{x,x'}^A)^2 + (G_{x,x'}^R)^2 = (G_{x,x'}^R - G_{x,x'}^A)^2$. We perform now a Wigner transformation with the energy momentum assignments specified in Fig. 8.4. We use $G^K \xrightarrow{\text{WT}} -2\pi i \tilde{F}(\mathbf{p}) \delta(\epsilon - \epsilon_{\mathbf{p}})$ and $G^R - G^A = 2i \text{Im } G^R \xrightarrow{\text{WT}} -2\pi i \delta(\epsilon - \epsilon_{\mathbf{p}})$ and integrate over the intermediate energy using a delta-function to find

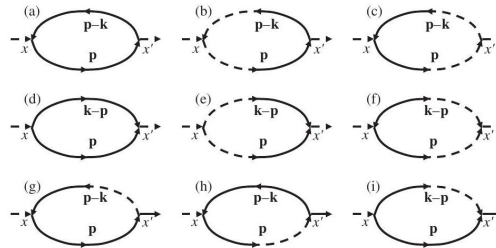


Figure 8.4 (a)-(f) Six diagrams for $\Sigma_3^K(x, x')$. The normal diagrams (a)-(c) carry a combinatorial factor of 4, while the Bogoliubov ones (d)-(f) carry a factor of 2. (g)-(i) Three diagrams for $\Sigma_3^R(x, x')$, all carry a factor of 4.

$$\begin{aligned} \Sigma_3^K(\mathbf{k}) = & \frac{\pi g^2}{2i} |\Phi_0|^2 \sum_{\mathbf{p}} \left\{ 4\delta(\epsilon_{\mathbf{p}} - \epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{p}-\mathbf{k}}) [\tilde{F}(\mathbf{p}-\mathbf{k})\tilde{F}(\mathbf{p}) - 1] \right. \\ & \left. + 2\delta(\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{p}} - \epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{p}}) [\tilde{F}(\mathbf{k}-\mathbf{p})\tilde{F}(\mathbf{p}) + 1] \right\}; \end{aligned} \quad (8.71)$$

$$\begin{aligned} \text{Im} [\Sigma_3^R(\mathbf{k})] = & \frac{\pi g^2}{4} |\Phi_0|^2 \sum_{\mathbf{p}} \left\{ 4\delta(\epsilon_{\mathbf{p}} - \epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{p}-\mathbf{k}}) [\tilde{F}(\mathbf{p}) - \tilde{F}(\mathbf{p}-\mathbf{k})] \right. \\ & \left. - 2\delta(\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{p}} - \epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{p}}) [\tilde{F}(\mathbf{p}) + \tilde{F}(\mathbf{k}-\mathbf{p})] \right\}, \end{aligned} \quad (8.72)$$

where we have suppressed the central coordinate x dependence of Σ as well as $|\Phi_0|^2$ and $\tilde{F}$ for brevity. We have symmetrized the last (Bogoliubov) term on the right-hand side of Eq. (8.70) (see Fig. 8.4(i)) with respect to $\mathbf{p}$ and $\mathbf{k}-\mathbf{p}$ arguments. Employing Eq. (6.47), one obtains for the three-particle part of the collision integral $I_3^{\text{coll}}[\tilde{F}(\mathbf{k})] = i\Sigma_3^K(\mathbf{k}) + 2\tilde{F}(\mathbf{k}) \text{Im} [\Sigma_3^R(\mathbf{k})]$

$$\begin{aligned} I_3^{\text{coll}}[\tilde{F}(x, \mathbf{k}), \rho_0(x), \mathbf{v}_{\text{sf}}(x)] = & 2\pi g^2 \left[\rho_0(x) - \sum'_{\mathbf{q}} \Gamma_3^K/4\Gamma_3 \right] \\ & \sum_{\mathbf{p}} \left\{ 2\delta(\epsilon_{\mathbf{p}} - \epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{p}-\mathbf{k}}) [\tilde{F}(x, \mathbf{p}-\mathbf{k})\tilde{F}(x, \mathbf{p}) - 1 + \tilde{F}(x, \mathbf{k})(\tilde{F}(x, \mathbf{p}) - \tilde{F}(x, \mathbf{p}-\mathbf{k}))] \right. \\ & \left. + \delta(\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{p}} - \epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{p}}) [\tilde{F}(x, \mathbf{k}-\mathbf{p})\tilde{F}(x, \mathbf{p}) + 1 - \tilde{F}(x, \mathbf{k})(\tilde{F}(x, \mathbf{p}) + \tilde{F}(x, \mathbf{k}-\mathbf{p}))] \right\} \end{aligned} \quad (8.73)$$

where we had to subtract the nucleation term $\sum'_{\mathbf{q}} \Gamma_3^K/4\Gamma_3$ "by hand" to secure the local particle conservation. The latter is now guaranteed by the identity

$$\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} I_3^{\text{coll}}[\tilde{F}(x, \mathbf{k})] = 2\Gamma_3(x)\rho_0(x) - \sum_{\mathbf{q}} \frac{\Gamma_3^K(x)}{2} \quad (8.74)$$

along with the condensate continuity equation (8.63) and the expression for the condensate growth rate Γ_3 , Eq. (8.46). To prove this identity one needs to interchange $\mathbf{k}$ and $\mathbf{p}$ summation indices in the Bogoliubov channel of I_3^{coll} , given by the third line of Eq. (8.73). Then it cancels half of the normal channel contribution, given by the second line. Since the nucleation term $\sim \Gamma_3^K$ originates from the fluctuations, which were not accounted for in the kinetic equation, it is not surprising that it was missed and had to be restored.

Thanks to Eq. (6.59), the collision integral (8.73) is nullified identically by the equilibrium distribution function $\tilde{F}(\mathbf{k}) = \tilde{F}^{\text{eq}}(\epsilon_{\mathbf{k}}) = \coth \epsilon_{\mathbf{k}}/2T$. Notice, however, that the equilibrium distribution $\coth(\epsilon_{\mathbf{k}} + \Lambda)/2T$ with a positive energy offset does not nullify the three-particle collision integral. Indeed, such an energy offset violates the energy balance specified by the delta-functions. The latter are fixed by the assumption of the slowness of the condensate field $\Phi_0(\mathbf{r}, t)$. In other words, fixing the gauge where the condensate field is slow, fixes also the "floor" of energy. This is consistent with the fact that for such a quasiparticle distribution the condensate amplitude is not stable. It collapses with a rate given by Eq. (8.49). Therefore, the quasiparticle distribution function cannot be stable either.

The three-particle collisions involve a particle absorbed or emitted by the condensate. This is the origin of the factor of $\rho_0(x)$ on the right-hand side of Eq. (8.73). They are thus absent in the absence of the condensate and are relatively ineffective at early stages of the condensate formation. In these instances one has to resort to four-particle collisions to describe the evolution of the quasiparticle distribution. The four-quasiparticle self-energy in second order in the interaction constant is given by the square of S_4^{coll} , Eq. (8.23). In the Popov approximation

there are five diagrams for the Keldysh component $\Sigma_4^K(x, x')$, Fig. 8.5(a)-(e), and four for the retarded component $\Sigma_4^R(x, x')$, Fig. 8.5(f)-(i). Utilizing causality relations, one finds

$$\begin{aligned} \Sigma_4^K(x, x') = & -\frac{g^2}{8} \left[4G_{x',x}^K (G_{x,x'}^K G_{x,x'}^K + (G_{x,x'}^R - G_{x,x'}^A) (G_{x,x'}^R - G_{x,x'}^A)) \right. \\ & \left. - 8(G_{x',x}^R - G_{x',x}^A) (G_{x,x'}^R - G_{x,x'}^A) G_{x,x'}^K \right]; \end{aligned} \quad (8.75)$$

$$\begin{aligned} \Sigma_4^R(x, x') = & -\frac{g^2}{8} \left[4G_{x',x}^A (G_{x,x'}^K G_{x,x'}^K + (G_{x,x'}^R - G_{x,x'}^A) (G_{x,x'}^R - G_{x,x'}^A)) \right. \\ & \left. + 8G_{x',x}^K G_{x,x'}^R G_{x,x'}^K \right]. \end{aligned} \quad (8.76)$$

A Wigner transformation with the energy-momentum assignments indicated in Fig. 8.5, followed by energy integrations, leads to

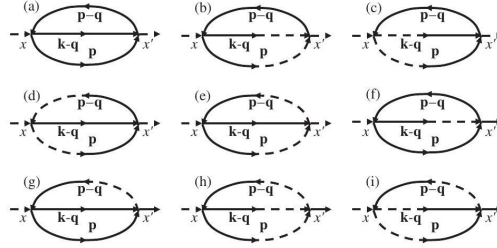


Figure 8.5 (a)-(e) Five diagrams for $\Sigma_4^K(x, x')$. Diagrams (a)-(c) carry a combinatorial factor of 4, (d)-(e) carry a factor of 8. (f)-(i) Four diagrams for $\Sigma_4^R(x, x')$: (f) carries a factor of 8, and (g)-(i) carry a factor 4.

$$\begin{aligned} \Sigma_4^K(\mathbf{k}) = & \frac{\pi g^2}{i} \sum_{\mathbf{p}\mathbf{q}} \delta(\epsilon_{\mathbf{p}} + \epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{p}-\mathbf{q}}) \\ & \times [\tilde{F}(\mathbf{p}-\mathbf{q})(\tilde{F}(\mathbf{p})\tilde{F}(\mathbf{k}-\mathbf{q}) + 1) - \tilde{F}(\mathbf{p}) - \tilde{F}(\mathbf{k}-\mathbf{q})] \end{aligned} \quad (8.77)$$

$$\begin{aligned} \Sigma_4^R(\mathbf{k}) = & \frac{\pi g^2}{2} \sum_{\mathbf{p}\mathbf{q}} \delta(\epsilon_{\mathbf{p}} + \epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{p}-\mathbf{q}}) \\ & \times [\tilde{F}(\mathbf{p})\tilde{F}(\mathbf{k}-\mathbf{q}) + 1 - \tilde{F}(\mathbf{p}-\mathbf{q})(\tilde{F}(\mathbf{p}) + \tilde{F}(\mathbf{k}-\mathbf{q}))] \end{aligned} \quad (8.78)$$

where we have suppressed the central coordinate x dependence of Σ and $\tilde{F}$. The last terms on the right-hand sides of these expressions are symmetrized with respect to $\mathbf{p}$ and $\mathbf{k}-\mathbf{q}$ arguments; see Fig. 8.5(d)-(f). Employing Eq. (6.47), one finally obtains $I_4^{\text{coll}}[\tilde{F}(\mathbf{k})] = i\Sigma_4^K(\mathbf{k}) + 2\tilde{F}(\mathbf{k}) \text{Im}[\Sigma_4^R(\mathbf{k})]$ for the four-particle part of the collision integral

$$\begin{aligned} I_4^{\text{coll}}[\tilde{F}(x, \mathbf{k}), \rho_0(x), \mathbf{v}_{\text{sf}}(x)] = & \pi g^2 \sum_{\mathbf{p}\mathbf{q}} \delta(\epsilon_{\mathbf{p}} + \epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{p}-\mathbf{q}}) \\ & \times \{ [\tilde{F}(x, \mathbf{p})\tilde{F}(x, \mathbf{k}-\mathbf{q}) + 1][\tilde{F}(x, \mathbf{p}-\mathbf{q}) + \tilde{F}(x, \mathbf{k})] \\ & - [\tilde{F}(x, \mathbf{k})\tilde{F}(x, \mathbf{p}-\mathbf{q}) + 1][\tilde{F}(x, \mathbf{k}-\mathbf{q}) + \tilde{F}(x, \mathbf{p})] \} \end{aligned} \quad (8.79)$$

where dependence on ρ_0 and $\mathbf{v}_{\text{sf}}$ enters through the quasiparticle dispersion relation, Eq. (8.66) or (8.68). This collision integral is nullified by the equilibrium distribution function with or without the energy offset Λ , that is, by $\coth(\epsilon_{\mathbf{k}} + \Lambda)/2T$; see Eq. (6.59). Indeed, two incoming particles $\mathbf{k}$ and $\mathbf{p}-\mathbf{q}$ as well as two outgoing ones $\mathbf{p}$ and $\mathbf{k}-\mathbf{q}$ are all above the condensate and therefore

are subject to the same energy offset, which then drops from the delta-function. By interchanging $\mathbf{k}$ and $\mathbf{p}$ arguments, it is easy to verify that four-particle collisions do not

change the local particle number, that is, $\sum_{\mathbf{k}} I_4^{\text{coll}} [\tilde{F}(x, \mathbf{k})] = 0$. Substituting $\tilde{F}(\mathbf{k}) = 2n_{\mathbf{k}} + 1$, one finds for the expression in the curly brackets in Eq. (8.79) $8\{n_{\mathbf{p}}n_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}(n_{\mathbf{k}} + 1)(n_{\mathbf{p}-\mathbf{q}} + 1) - n_{\mathbf{k}}n_{\mathbf{p}-\mathbf{q}}(n_{\mathbf{p}} + 1)(n_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} + 1)\}$, which exhibits a clear distinction between "in" and "out" collision channels.

12.3.8 8.8 Dynamics of a Quantum Impurity in a Superfluid

In this section, we show how the Keldysh formalism may be used to derive an effective quasi-classical equation of motion for a quantum impurity, moving in a superfluid environment. Such an impurity may be a He^3 atom, or a slow neutron moving in He^4 . Alternatively it may be a spin-flipped atom in a cold gas of spinpolarized Bose atoms. Having in mind the latter case, we restrict ourselves to a weakly interacting superfluid, while the He^4 case was considered in [134]. According to the Landau criterion, if the impurity is moving with a velocity which is less than the critical one (for a weakly interacting gas the critical velocity is close to the speed of sound c), one may expect that it does not radiate Bogoliubov phonons. However, as was first understood by Landau and Khalatnikov [135], the radiation is still possible via two-phonon Raman scattering. The idea is illustrated in Fig. 8.6(a), which shows that by absorbing and then re-emitting a phonon the final state of the impurity may satisfy the energy and momentum conservation laws. For such processes to occur one needs a finite concentration of phonons in the superfluid, namely a finite temperature T . Here we shall assume it to be small, $T \ll mc^2$.

We describe the quantum impurity with mass m_d and coordinate $\mathbf{R}(t)$ by a Feynman path integral with the action (3.4) on a closed time contour. The short-range interaction of the impurity with the superfluid density $\rho \sim |\phi|^2$ is described by the action $S_{d\text{-sf}} = g_d \int_C dt d\mathbf{r} \rho_d(\mathbf{r}, t) |\phi(\mathbf{r}, t)|^2$, where the impurity density is $\rho_d(\mathbf{r}, t) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}(t))$.¹ It is convenient to parametrize the Bose field by its density and phase fluctuations, $\phi(\mathbf{r}, t) = \sqrt{\rho_0 + \varrho(\mathbf{r}, t)} e^{i\theta(\mathbf{r}, t)}$; see Eqs. (8.12) and (8.13). The superfluid action, Eqs. (6.9), (6.13), and (8.1), acquires the form

$$S = \int_C dt d\mathbf{r} \left[\theta \partial_t \varrho - \frac{m\rho_0}{2} \mathbf{v}_{\text{sf}}^2 - \frac{g}{2} \varrho^2 - \frac{1}{8m\rho_0} (\nabla_{\mathbf{r}} \varrho)^2 - \frac{m}{2} \varrho \mathbf{v}_{\text{sf}}^2 \right], \quad (8.80)$$

where $\mathbf{v}_{\text{sf}} = \nabla_{\mathbf{r}} \theta / m$. The first four terms on the right-hand side are the Lagrangian of the Bogoliubov phonons with the dispersion relation (8.11) and the speed of sound $c = \sqrt{g\rho_0/m}$. The last term is the nonlinear three-phonon interaction, and

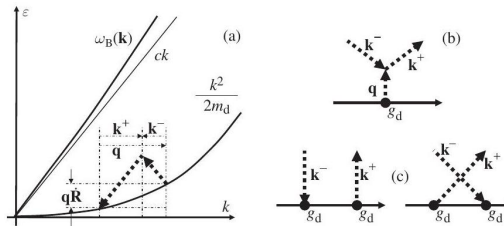


Figure 8.6 (a) Two-phonon Raman processes, which conserve energy and momentum of the slow impurity. Two-phonon amplitudes Γ_θ (b) and Γ_ϱ (c).

we have neglected other nonlinear terms, such as, for example, $\varrho (\nabla_{\mathbf{r}} \varrho)^2$, as being less important at $T \ll mc^2$.

The interaction with the impurity is now given by $S_{d\text{-sf}} = g_d \int_C dt d\mathbf{r} \rho_d \varrho$, which describes one phonon excitation by the impurity. As Fig. 8.6(a) shows, the real processes must involve two phonons and thus should be described by the composite two-phonon vertices depicted in Fig. 8.6(b), (c). In the limit of small temperature $T \ll mc^2$, the characteristic phonon wavelength

⁰¹ The impurity also interacts with the local superfluid velocity $\mathbf{v}_{\text{sf}}$ [134]. One can neglect this effect as long as the effective mass of the impurity is close to its bare mass. This is the case for weak-enough interactions, $g_d \rho_0 \ll T_c$.

c/T is much larger than the condensate healing (or correlation) length $(mc)^{-1}$ and therefore the two-phonon vertices may be considered as local. As a result, the effective impurity-superfluid interaction action takes the form

$$S_{\text{d-sf}} = \frac{1}{2} \int_C dt \, d\mathbf{r} \left[\Gamma_\theta \rho_d(\mathbf{r} - \mathbf{R}(t)) \mathbf{v}_{\text{sf}}^2(\mathbf{r}, t) - \Gamma_\varrho \rho_d(\mathbf{r} - \mathbf{R}(t)) \varrho^2(\mathbf{r}, t) \right], \quad (8.81)$$

where $\Gamma_\theta = g_d \rho_0 / c^2$ and $\Gamma_\varrho = (g_d^2 / m_d c^2) \cos \alpha$, where α is the angle between $\mathbf{k}^+$ and $\mathbf{k}^-$, that is, $\cos \alpha = \mathbf{k}^+ \cdot \mathbf{k}^- / k^+ k^-$.

To proceed we split the fields $\varrho(\mathbf{r}, t)$, $\theta(\mathbf{r}, t)$, and $\mathbf{R}(t)$ into those residing on forward and backward branches of the contour and perform a Keldysh rotation as, for example, $\mathbf{R}^\pm = \mathbf{R}^{\text{cl}} \pm \mathbf{R}^{\text{q}}$, and similarly for ϱ and θ . The semiclassical equation of motion for the impurity coordinate $\mathbf{R}^{\text{cl}}(t) = \mathbf{R}(t)$ is obtained by variation of the

action over the quantum component $\mathbf{R}^{\text{q}}$ at a zero value of the latter. We can thus expand the action in $\mathbf{R}^{\text{q}}$ and keep only the linear terms in all quantum components. This way we find for, for example, the first term on the right-hand side of Eq. (8.81),

$$S_\theta = \Gamma_\theta \int_{-\infty}^{\infty} dt \, d\mathbf{r} \left[\rho_d(\mathbf{r} - \mathbf{R}) 2\mathbf{v}_{\text{sf}}^{\text{cl}} \cdot \mathbf{v}_{\text{sf}}^{\text{q}} - \mathbf{R}^{\text{q}} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} \rho_d(\mathbf{r} - \mathbf{R}) (\mathbf{v}_{\text{sf}}^{\text{cl}})^2 \right] \quad (8.82)$$

and similarly for the second one, leading to S_ϱ . Next we perform Gaussian integration over the fluctuations of the superfluid, which are described by the first four terms in Eq. (8.80). The last nonlinear term was already used to derive the effective two-phonon amplitude Γ_θ and may be disregarded hereafter. Expanding in powers of $i(S_\theta + S_\varrho)$ and performing Gaussian integrations, one notices that $\langle S_\theta \rangle = \langle S_\varrho \rangle = 0$ (because of causality and integration of the full derivatives), where the angular brackets stay for the integration over ϱ and θ . The first nonvanishing contribution to the equation of motion comes thus from $S_{\text{eff}}[\mathbf{R}, \mathbf{R}^{\text{q}}] = \frac{i}{2} \langle (S_\theta + S_\varrho)^2 \rangle$. Keeping again only the term linear in $\mathbf{R}^{\text{q}}$, one finds for, for example,

$$\begin{aligned} \langle (S_\theta)^2 \rangle &= -2\Gamma_\theta^2 \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \, d\mathbf{r}_1 \, dt_2 \, d\mathbf{r}_2 \left[\mathbf{R}^{\text{q}}(t_1) \nabla_{\mathbf{r}_1} \rho_d(\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}(t_1)) \rho_d(\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}(t_2)) \right. \\ &\quad \left. \times \langle (\mathbf{v}_{\text{sf}}^{\text{cl}}(x_1))^2 \mathbf{v}_{\text{sf}}^{\text{cl}}(x_2) \mathbf{v}_{\text{sf}}^{\text{q}}(x_2) \rangle + (\mathbf{r}_1 \leftrightarrow \mathbf{r}_2, t_1 \leftrightarrow t_2) \right] \end{aligned} \quad (8.83)$$

where $x_i = (\mathbf{r}_i, t_i)$. We now introduce $t = (t_1 + t_2)/2$ and $\tau = t_1 - t_2$, that is, the central and relative times, and approximate the impurity trajectory as $\mathbf{R}(t_{1,2}) \approx \mathbf{R}(t) \pm \tau \dot{\mathbf{R}}(t)/2$. In the quantum component one may disregard the relative time, putting $\mathbf{R}^{\text{q}}(t_{1,2}) \approx \mathbf{R}^{\text{q}}(t)$. According to the Wick theorem $\langle (\mathbf{v}_{\text{sf}}^{\text{cl}}(x_1))^2 \mathbf{v}_{\text{sf}}^{\text{cl}}(x_2) \mathbf{v}_{\text{sf}}^{\text{q}}(x_2) \rangle = -(2/m^4) \nabla_{\mathbf{r}_1}^\alpha \nabla_{\mathbf{r}_2}^\beta D_{\theta\theta}^{\text{R}}(x_1 - x_2) \nabla_{\mathbf{r}_2}^\beta \nabla_{\mathbf{r}_1}^\alpha D_{\theta\theta}^{\text{K}}(x_2 - x_1)$, where $D_{\theta\theta}^{\text{R}}(x_1 - x_2) = -i \langle \theta^{\text{cl}}(x_1) \theta^{\text{q}}(x_2) \rangle$ and $D_{\theta\theta}^{\text{K}}(x_1 - x_2) = -i \langle \theta^{\text{cl}}(x_1) \theta^{\text{cl}}(x_2) \rangle$ in accordance

⁰² Since the intermediate virtual lines in the diagrams of Fig. 8.6(b), (c) are far from the mass-shell, they do not involve Keldysh Green functions and may be evaluated using the usual second-order perturbation theory. This way, one finds $\Gamma_\theta = g_d \langle \varrho \varrho \rangle m$; see Fig. 8.6(b), where according to Eq. (8.80) $\langle \varrho \varrho \rangle = (\rho_0/m) q^2 / (\omega_{\text{B}}^2(\mathbf{q}) - \omega^2)$. As shown in what follows, $\omega \approx \mathbf{q} \cdot \dot{\mathbf{R}}$ and therefore $\omega_{\text{B}}(\mathbf{q}) \approx cq \gg \omega$, one finds that $\langle \varrho \varrho \rangle \approx \rho_0 / (mc^2)$ and thus $\Gamma_\theta = g_d \rho_0 / c^2$. One also finds that $\Gamma_\varrho = g_d^2 \times$

$$\left[\frac{1}{\epsilon_{\mathbf{p}} + \epsilon^- - \epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{k}^-}} + \frac{1}{\epsilon_{\mathbf{p}} - \epsilon^+ - \epsilon_{\mathbf{p}-\mathbf{k}^+}} \right] \approx \frac{(\mathbf{k}^+ - \mathbf{k}^-)^2 - (k^+)^2 - (k^-)^2}{2m_d \epsilon^- (-\epsilon^+)} \approx \frac{\mathbf{k}^+ \cdot \mathbf{k}^-}{m_d c^2 k^+ k^-},$$

where $\epsilon_{\mathbf{p}} = p^2 / (2m_d)$ and one uses the mass-shell conditions $\epsilon_{\mathbf{p}} + \epsilon^- - \epsilon^+ = \epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{k}^-} - \epsilon_{\mathbf{k}^+}$ along with $\epsilon^\pm = \omega_{\text{B}}(\mathbf{k}^\pm) \gg |\epsilon_{\mathbf{p}} - \epsilon_{\mathbf{p} \mp \mathbf{k}^\pm}|$. In general, the amplitudes Γ_θ and Γ_ϱ may be expressed through the thermodynamic compressibility of the superfluid and effective mass of the impurity, without relying on the weakness of the interactions [134, 136].

with the standard definitions. Finally, we go to the momentum representation, using $\rho_d(\mathbf{r} - \mathbf{R}(t)) = \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}(\mathbf{r} - \mathbf{R}(t))}$, and obtain

$$\langle (S_\theta)^2 \rangle = 4i \int_{-\infty}^{\infty} dt \mathbf{R}^q(t) \cdot \sum_{\mathbf{q}} \mathbf{q} \Pi_{\theta\theta}(\mathbf{q}, \mathbf{q} \cdot \dot{\mathbf{R}}(t)),$$

where

$$\begin{aligned} \Pi_{\theta\theta}(\mathbf{q}, \omega) &= \frac{\Gamma_\theta^2}{m^4} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \, d\mathbf{r} e^{i(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r} - \omega\tau)} \nabla_{\mathbf{r}}^\alpha \nabla_{\mathbf{r}}^\beta [D_{\theta\theta}^R(\mathbf{r}, \tau) - D_{\theta\theta}^A(\mathbf{r}, \tau)] \nabla_{\mathbf{r}}^\beta \nabla_{\mathbf{r}}^\alpha D_{\theta\theta}^K(\mathbf{r}, \tau) \\ &= \frac{\Gamma_\theta^2}{m^4} \int \frac{d\epsilon \, d\mathbf{k}}{(2\pi)^{d+1}} (\mathbf{k}^+ \mathbf{k}^-) [D_{\theta\theta}^R(\mathbf{k}^+, \epsilon^+) - D_{\theta\theta}^A(\mathbf{k}^+, \epsilon^+)] \times (\mathbf{k}^+ \mathbf{k}^-) D_{\theta\theta}^K(\mathbf{k}^-, \epsilon^-) \end{aligned}$$

where $\mathbf{k}^\pm = \mathbf{k} \pm \mathbf{q}/2$, $\epsilon^\pm = \epsilon \pm \omega/2$, and d is the dimension. The $D_{\theta\theta}^A$ term originates from the last term on the right-hand side of Eq. (8.83) with interchanged arguments. Performing similar calculations for $\langle (S_\rho)^2 \rangle$ and $2\langle S_\rho S_\theta \rangle$, one finds

$$S_{\text{eff}}[\mathbf{R}, \mathbf{R}^q] = \frac{i}{2} \langle (S_\theta + S_\rho)^2 \rangle = -2 \int_{-\infty}^{\infty} dt \mathbf{R}^q(t) \cdot \sum_{\mathbf{q}} \mathbf{q} \Pi(\mathbf{q}, \mathbf{q} \cdot \dot{\mathbf{R}}(t)), \quad (8.84)$$

where

$$\Pi(\mathbf{q}, \omega) = \int \frac{d\epsilon \, d\mathbf{k} (\mathbf{k}^+ \mathbf{k}^-)^2}{(2\pi)^{d+1}} \text{Tr} \left\{ \hat{\Gamma} [\hat{D}^R(\mathbf{k}^+, \epsilon^+) - \hat{D}^A(\mathbf{k}^+, \epsilon^+)] \hat{\Gamma} \hat{D}^K(\mathbf{k}^-, \epsilon^-) \right\} \quad (8.85)$$

The matrix Green functions of the linearized phonon modes are found from Eq. (8.80) as

$$\hat{D}^{R(A)}(\mathbf{k}, \epsilon) = \begin{pmatrix} D_{\theta, \theta}^{R(A)} & D_{\theta, \rho/k}^{R(A)} \\ D_{\rho/k, \theta}^{R(A)} & D_{\rho/k, \rho/k}^{R(A)} \end{pmatrix} = \frac{1}{2(\epsilon \pm i0)^2 - (ck)^2} \begin{pmatrix} g & i\epsilon/k \\ -i\epsilon/k & \rho_0/m \end{pmatrix}, \quad (8.86)$$

where we have neglected the curvature of the Bogoliubov dispersion relation. The matrix Keldysh component of the Green function in thermal equilibrium is given by FDT $\hat{D}^K(\mathbf{k}, \epsilon) = \coth(\epsilon/2T) [\hat{D}^R(\mathbf{k}, \epsilon) - \hat{D}^A(\mathbf{k}, \epsilon)]$. Finally, the vertex matrix is defined as $\hat{\Gamma} = \text{diag} \{g_d \rho_0 / (m^2 c^2), -g_d^2 / (m_d c^2)\}$.

We notice that both involved phonons are real, that is, their energies and momenta are related through the dispersion relation, $\epsilon = \pm ck$. This is due to the fact that both $\hat{D}^R - \hat{D}^A$ and $\hat{D}^K$ are proportional to $[\delta(\epsilon - ck) - \delta(\epsilon + ck)]^3$. This fact was already anticipated in calculating the amplitudes Γ_θ and Γ_ρ previously. Adding the free part (3.4) and Eq. (8.84), we find for the action of the slow, $\dot{R} \ll c$, impurity in the superfluid

3 Taking the trace and performing the energy integration in Eq. (8.85) with the help of delta-functions, one finds

$$\begin{aligned} \Pi(\mathbf{q}, \omega) &= \frac{\pi}{8} \left(\frac{g_d}{m} - \frac{g_d^2}{gm_d} \right)^2 \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^d} \frac{(\mathbf{k}^+ \mathbf{k}^-)^2}{c^2 k^+ k^-} \coth \frac{ck^-}{2T} [\delta(ck^+ - ck^- - \omega) - \delta(ck^+ - ck^- + \omega)] \\ &\approx \frac{1}{64\pi} \left(\frac{g_d}{m} - \frac{g_d^2}{gm_d} \right)^2 \frac{\omega}{c^3 T} \int_0^\infty k^2 dk \frac{(k^2 - q^2/4)^2}{k^2 + q^2/4} \sinh^{-2} \left(\frac{c}{2T} \sqrt{k^2 + \frac{q^2}{4}} \right) \frac{\sqrt{k^2 + q^2/4}}{kq} \end{aligned}$$

where we put $d = 3$, performed the angular integration using $k^\pm = \sqrt{k^2 + q^2/4} \pm kq \cos \vartheta$ and expanded to first order in $\omega = \mathbf{q} \cdot \dot{\mathbf{R}} \ll cq$. Introducing dimensionless variables $x = ck/(2T)$ and $y = cq/(4T)$, one finds

$$\sum_{\mathbf{q}} \mathbf{q} \Pi(\mathbf{q}, \mathbf{q} \cdot \dot{\mathbf{R}}) = \dot{\mathbf{R}} \frac{64}{3\pi^3} \frac{T^8}{c^{12}} \left(\frac{g_d}{m} - \frac{g_d^2}{gm_d} \right)^2 \iint_0^\infty dy \, dx y^3 x \frac{(x^2 - y^2)^2}{\sqrt{x^2 + y^2}} \sinh^{-2} \sqrt{x^2 + y^2}$$

The double integral may be calculated in polar coordinates, bringing in a factor of $\pi^8/(12 \times 30)$.

$$S_{\text{imp}}[\mathbf{R}, \mathbf{R}^q] = \int_{-\infty}^{\infty} dt \left[-2\mathbf{R}^q \cdot (m_d \ddot{\mathbf{R}} + \gamma \dot{\mathbf{R}} + \nabla_{\mathbf{R}} V(\mathbf{R})) + 4i\gamma T \mathbf{R}^q \cdot \mathbf{R}^q \right] \quad (8.87)$$

where the friction coefficient is given by

$$\gamma = \frac{8\pi^5}{135} \frac{T^8}{c^{12}} \left(\frac{g_d}{m} - \frac{g_d^2}{gm_d} \right)^2 \quad (8.88)$$

The fluctuation term $\sim \mathbf{R}^q \cdot \mathbf{R}^q$ on the right-hand side of Eq. (8.87) may be derived in exactly the same way as the viscous term $\sim \mathbf{R}^q \cdot \dot{\mathbf{R}}$ was dealt with earlier. However, we can simply rely on FDT to write it down. The classical (i.e. local in time) form of this term follows if one approximates $\mathbf{R}^q(t_1) \cdot \mathbf{R}^q(t_2) \approx \mathbf{R}^q(t) \cdot \mathbf{R}^q(t)$, which is the case as long as the characteristic frequency of the impurity motion is much less than the temperature. Comparing the resulting action (8.87) with Eq. (4.2), we notice that the slow impurities are executing classical viscous Brownian motion. The latter may be described either by the Langevin equation (4.5) or the FokkerPlanck equation (4.32). In the long-time limit the latter is reduced to the diffusion equation (4.34) with the diffusion coefficient $D = T/\gamma \propto T^{-7}$ (Einstein relation). On the other hand, the diffusion coefficient in momentum space is $D_K = \gamma T \propto T^9$; see Eq. (4.32). Such high powers of the temperature dependence are due to the two-phonon nature of the process. In d dimensions it is given by $\gamma \propto T^{2d+2}$ and $D \propto T^{-2d-1}$. We found thus that the superfluid acts on the slow impurity as an effective Ohmic bath, introduced phenomenologically in Section 3.2. The advantage of the microscopic calculation is access to the value and the peculiar temperature dependence of the friction coefficient, Eq. (8.88).

The last factor in Eq. (8.88) is a result of the destructive interference between the two-phonon processes depicted in Figs. 8.6(b), (c). One may show [136] that in $d = 1$ and in the symmetric case $g_d = g, m_d = m$, the cancelation is exact in all orders of the perturbation theory and thus $\gamma = 0$. This fact is due to the exact integrability of the corresponding symmetric 1D model with local interactions [137]. The exact integrability prohibits the dissipative friction and thermalization of the impurity because of the presence of an infinite number of conservation laws. In $d > 1$ one finds a nonzero γ even in the symmetric case in higher orders in g_d and g [134].

12.3.9 8.9 Problems

8.9.1 Condensate in a Harmonic Trap

Solve the static Gross-Pitaevskii equation (8.7) in an isotropic harmonic trap, $V^{\text{cl}}(\mathbf{r}) = m\omega_0^2 r^2/2$, in the Thomas-Fermi approximation (i.e. neglecting $\nabla_{\mathbf{r}}^2/2m$ term). Show that the condensate density is given by $\rho_0(\mathbf{r}) = (m\omega_0^2/2g)(R^2 - r^2)$ (remember that in the present notations $|\Phi_0(\mathbf{r})|^2 = 2\rho_0(\mathbf{r})$), where the condensate radius, R , is related to the chemical potential as $\mu = m\omega_0^2 R^2/2$. Employ the normalization condition $\int d^d \mathbf{r} \rho_0(\mathbf{r}) = N$ to find the chemical potential $\mu(N)$, the condensate radius $R(N)$, and the density in the center $\rho_0(0, N)$ as functions of N in $d = 1, 2, 3$.

Compare the condensate radius $R(N)$ with that of the Gaussian ground-state density of N noninteracting bosons in the same harmonic trap. What is a condition on N and the interaction parameter g for $R(N)$ to exceed the size of the Gaussian ground-state?

Evaluate the interaction energy as $E_{\text{int}} = \int d^d \mathbf{r} [(V^{\text{cl}}(\mathbf{r}) - \mu) \rho_0(\mathbf{r}) + g \rho_0^2(\mathbf{r})/2]$ and verify that $\partial E_{\text{int}}(\mu)/\partial \mu = -N$.

8.9.2 Collective Modes of the Condensate in the Harmonic Trap

In a translationally invariant setting, the linearized dynamic fluctuations of the Gross-Pitaevskii equation are Bogoliubov quasiparticles with the continuous spectrum (8.11); see Eqs. (8.8)-(8.11). Find a spectrum of linearized excitations in the isotropic harmonic trap, considered in Problem 8.9.1 (Stringari [138]).

To this end, linearize the hydrodynamic equations (8.12), (8.13) for $\mathbf{v}_{\text{sf}}(\mathbf{r}, t)$ and $\varrho(\mathbf{r}, t) = \rho(\mathbf{r}, t) - \rho_0(\mathbf{r})$, neglecting the quantum pressure term. This leads to

$$\partial_t \varrho + \nabla_{\mathbf{r}} (\rho_0 \mathbf{v}_{\text{sf}}) = 0; \quad \partial_t \mathbf{v}_{\text{sf}} = -\frac{g}{m} \nabla_{\mathbf{r}} \varrho. \quad (8.89)$$

From here one finds $\partial_t^2 \varrho = (g/m) \nabla_{\mathbf{r}} (\rho_0 \nabla_{\mathbf{r}} \varrho)$. Finally, using results of Problem 8.9.1 for $\rho_0(\mathbf{r})$ and looking for harmonics in time oscillations $\varrho(\mathbf{r}, t) = \varrho(\mathbf{r}) e^{i\omega t}$, one obtains

$$-\frac{\omega_0^2}{2} \nabla_{\mathbf{r}} ((R^2 - r^2) \nabla_{\mathbf{r}} \varrho(\mathbf{r})) = \omega^2 \varrho(\mathbf{r}) \quad (8.90)$$

One can look for solutions of this equation in the spherical coordinates in the form $\varrho(\mathbf{r}) = \varrho(r) Y_l^m(\theta, \varphi)$, where $Y_l^m(\theta, \varphi)$ are standard spherical harmonics. For example, the $l = 0$ s-wave part of the equation takes the form (here $r/R \rightarrow r$)

$$-(1 - r^2) \partial_r^2 \varrho - \left(\frac{2}{r} - 4r \right) \partial_r \varrho - \frac{2\omega^2}{\omega_0^2} \varrho = 0. \quad (8.91)$$

Its solution, bounded at $r = 1$, is $\varrho(r) = r^{-1} P_{\lambda}(r)$ - the Legendre function of the first kind, where $\lambda = (\sqrt{9 + 8\omega^2/\omega_0^2} - 1)/2$. This solution is finite at $r = 0$, only if $\lambda = 2n_r + 1$, where $n_r = 0, 1, 2, \dots$ ⁴ From here one finds quantization

of the oscillation frequencies $\omega(n_r, 0) = \omega_0 \sqrt{2n_r^2 + 3n_r}$. Solve the equation for $l = 1, 2, \dots$ to find Stringari spectrum [138]

$$\omega(n_r, l) = \omega_0 \sqrt{2n_r^2 + 3n_r + 2n_r l + l} \quad (8.92)$$

8.9.3 Dark Solitons

Consider the 1d Gross-Pitaevskii equation (8.5):

$$i\partial_t \Phi_0 = -\frac{1}{2m} \partial_x^2 \Phi_0 + \frac{g}{2} (|\Phi_0|^2 - 2\rho_0) \Phi_0 \quad (8.93)$$

Let us look for a localized solution traveling with a certain velocity v ,

$$\Phi_0(x, t) = \Phi_s(x - vt) = \sqrt{2\rho_0} \chi(x - vt) e^{i\vartheta(x - vt)}. \quad (8.94)$$

Substituting it in Eq. (8.93), one finds two equations for the phase $\vartheta(\xi)$ and the normalized amplitude $\chi(\xi) = |\Phi_s(\xi)|/\sqrt{2\rho_0}$, which are functions of $\xi = x - vt$. Show that the first of these equations acquires the form of the continuity relation

⁴ $n_r = l = 0$ results in $\varrho = \text{const}$, which is forbidden if particle number is conserved.

$$[\chi^2 (\vartheta' - mv)]' = 0 \quad (8.95)$$

where primes denote derivatives with respect to ξ . Using the fact that far from the soliton $\chi(\pm\infty) = 1$ and $\vartheta'(\pm\infty) = 0$, one finds $\vartheta' = mv(1 - 1/\chi^2)$. Employing this relation, show that the remaining equation for the amplitude may be written in the "Newtonian" form:

$$\chi'' = -\frac{\partial U(\chi)}{\partial \chi} \quad (8.96)$$

and find the effective potential $U(\chi)$. Think about "Newtonian" particle motion in such a potential as if χ is its "coordinate" and ξ is the "time." Notice that at $\xi \rightarrow \pm\infty$ one needs to enforce $\chi = 1$. Also notice that this implies a qualitative difference for the motion with $v > c = \sqrt{g\rho_0/m}$ (the sound velocity) and $v < c$.

In the former case, $v > c$, the only way to satisfy the boundary conditions is if the "Newtonian particle" undergoes small oscillations around the minimum of $U(\chi)$ at $\chi = 1$. Find the frequency of such small oscillations $\omega = \omega(v)$ and show that it is identical to the Bogoliubov $\omega_B(q)$ (8.11), where $v = \partial\omega_B(q)/\partial q$.

In case $v < c$, $\chi = 1$ corresponds to an unstable maximum of $U(\chi)$. Therefore a bounce solution is possible. This is the dark soliton solution. Show that

$$\Phi_s(x - vt) = \sqrt{2\rho_0} \left[\cos \frac{\theta}{2} - i \sin \frac{\theta}{2} \tanh \left(\frac{x - vt}{l} \right) \right], \quad (8.97)$$

where

$$\cos(\theta/2) = v/c < 1 \quad (8.98)$$

and $l^{-1} = mc \sin(\theta/2)$ is indeed such a bounce solution. Here θ is a change of the phase of the wave function across the soliton. Show that the number of particles "expelled" from the soliton core is

$$N_s = \int dx \left(\rho_0 - |\Phi_s|^2/2 \right) = \frac{2K}{\pi} \sin \frac{\theta}{2} \quad (8.99)$$

where the "quantum parameter" $K = \pi\rho_0/(mc)$. Notice that the particle number may be large, $N_s \gg 1$, in the limit of the weakly interacting gas, $K \gg 1$.

In a similar way, the energy of the soliton is given by

$$E_s = \frac{1}{2} \int dx \left[\frac{1}{2m} |\partial_x \Phi_s|^2 + g \left(\rho_0 - |\Phi_s|^2/2 \right)^2 \right] = \frac{4\rho_0 c}{3} \sin^3 \frac{\theta}{2} \quad (8.100)$$

while the soliton core momentum is

$$p_{sc} = \frac{1}{2} \text{Im} \int dx \Phi_s^* \partial_x \Phi_s = -\rho_0 \sin \theta \quad (8.101)$$

However, one should take into account the periodic boundary conditions that ensure that dark soliton phase shift θ is uniformly spread over the length of the entire system L . Although this does not change the energy of the system in the thermodynamic limit (indeed the corresponding contribution to the energy scales as $\rho_0 \theta^2/(mL)$), it produces a finite contribution $\rho_0 \theta$ to the momentum. As a result the total (core plus the rest of the condensate) momentum of the dark soliton solution is

$$p_s = p_{sc} + \rho_0 \theta = \rho_0 (\theta - \sin \theta) \quad (8.102)$$

Equations (8.100) and (8.102) provide an implicit form of the dark soliton dispersion relation $E_s(p_s)$. Plot this dispersion relation along with the Bogoliubov quasiparticles spectrum $\omega_B(p) = \sqrt{c^2 p^2 + (p^2/2m)^2}$. These two excitations appear naturally in the Bethe ansatz solution of the Lieb-Liniger model [125]. They are known as Lieb II and Lieb I modes correspondingly. One may show [139] that the soliton dispersion (Lieb II mode) provides a lower bound for the many-body excitation spectrum.

8.9.4 Beliaev Damping

It is shown in Section 8.8 that the friction coefficient of a slow subsonic impurity in 3d superfluid scales as T^8 . It thus rapidly goes to zero as $T \rightarrow 0$. The situation is very different vis-à-vis Bogoliubov quasiparticles (phonons). Since their dispersion relation (8.11) exhibits positive curvature, the phonons are supersonic (cf. Fig. 8.6). This allows for a phonon decay even at $T = 0$. The dominant processes leading to such decay is splitting of a phonon with momentum $\mathbf{q}$ into two phonons with momenta $\mathbf{k}$ and $\mathbf{q} - \mathbf{k}$. Here we focus on small momenta $q \ll mc$ and evaluate the corresponding decay rate.

To this end, one may employ the hydrodynamic action (8.80) and calculate renormalizations of its Gaussian part in the second order in the three-phonon interaction vertex $m\varrho \mathbf{v}_{\text{sf}}^2/2$. For example, let's focus on the kinetic term $\theta \partial_t \varrho$, which, as a result of such renormalization, acquires the form $\theta (\partial_t + \gamma_{\text{Bel}}) \varrho$, where $\gamma_{\text{Bel}}(q)$ is the Beliaev damping rate. Show that in the second order in $m\varrho \mathbf{v}_{\text{sf}}^2/2$ at $T = 0$,

$$\gamma_{\text{Bel}}(q) = \frac{q}{m^2} \sum_{\mathbf{k}} \int \frac{d\epsilon}{2\pi} \text{Im} \langle \varrho \nabla_{\mathbf{r}} \theta \rangle_{\mathbf{k}, \epsilon}^{\text{R}} \text{Im} \langle \nabla_{\mathbf{r}} \theta \nabla_{\mathbf{r}} \theta \rangle_{\mathbf{q}-\mathbf{k}, \omega_B(q)-\epsilon}^{\text{R}} \quad (8.103)$$

The propagators can be read out from Eq. (8.86). The ϵ -integration leads to the energy conservation of the form $\delta(\omega_B(q) - \omega_B(k) - \omega_B(q-k))$. In the limit $q \ll mc$ one may approximate $\omega_B(q) \approx cq + cq^3/k_0^2$, where $k_0^2 = 8(mc)^2$. Moreover, in this limit all three momenta $\mathbf{q}$, $\mathbf{k}$, and $\mathbf{q} - \mathbf{k}$ are almost collinear. Show that this allows one to approximate

$$\omega_B(q) - \omega_B(k) - \omega_B(q-k) \approx \frac{c q k}{|q-k|} \left(1 - \cos \theta_k - \frac{3(q-k)^2}{k_0^2} \right),$$

where θ_k is the angle between $\mathbf{k}$ and $\mathbf{q}$. Perform now the integrations: first over $d \cos \theta_k$ and finally over $k^2 dk^5$ to show that [129]

$$\gamma_{\text{Bel}}(q) = \frac{1}{960\pi} \frac{q^5}{m\rho_0} \quad (8.104)$$

where you need to employ the fact that $g/mc^2 = \rho_0^{-1}$. Find second-order corrections to the other terms in the quadratic part of the action (8.80). Show that they do not change this damping rate (other than renormalizing the numerical factor). Remarkably the Beliaev phonon decay rate (8.104) is independent of the interaction strength g and the speed of sound c . The latter only shows up in the applicability regime of Eq. (8.104), through $q \ll mc$. Show that in this entire range $\gamma_{\text{Bel}}(q) \ll \omega_B(q)$ and therefore the phonon mode is very much underdamped.

⁵ The latter integral acquires the form $\int_0^q dk k^2 (q-k)^2 = q^5/30$.

12.4 Dynamics of Phase Transitions

The formalism of Chapter 4 is applied to spatially extended systems. We focus on the slow dynamics near the first- and second-order phase transitions. In the latter case the systems exhibit scale-invariant behavior, which is tackled with the dynamical renormalization group. We discuss both equilibrium (following the Hohenberg-Halperin classification) and essentially

non-equilibrium models. Examples of the latter include reaction-diffusion systems (directed percolation plus other universality classes) as well as surface growth dynamics (the Kardar-Parisi-Zhang universality class).

12.4.1 9.1 Dissipative Chains and Membranes

In Chapter 4 we considered dynamics of an overdamped classical particle connected to a thermal bath. We shall generalize it now to spatially extended models, representing, for example, an elastic chain or membrane connected to a bath and subject to certain forces. Let us denote displacement of such an object as $\varphi(\mathbf{r}, t)$, where $\mathbf{r}$ is a spatial index labeling lattice sites along the d -dimensional membrane (hereafter we shall employ the continuum notation). We use scalar real displacement φ for simplicity, since generalization to vector (or complex) fields is straightforward. Dynamical equations of motion for such a field acquire a form

$$\partial_t \varphi(\mathbf{r}, t) = -\frac{\delta \mathcal{F}[\varphi]}{\delta \varphi(\mathbf{r}, t)} + \xi(\mathbf{r}, t). \quad (9.1)$$

The generalized potential $\mathcal{F}[\varphi]$, known also as Landau free energy, may be written as

$$\mathcal{F}[\varphi] = \int d\mathbf{r} \left[\frac{D}{2} (\nabla_{\mathbf{r}} \varphi)^2 + V(\varphi) \right] \quad (9.2)$$

where the first term is elastic compression energy and the second one is an external potential. The simplest form of the random force is spatially uncorrelated Gaussian white noise:

$$\langle \xi(\mathbf{r}, t) \xi(\mathbf{r}', t') \rangle = 2T \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t'). \quad (9.3)$$

The fact that the deterministic force on the right-hand side of Eq. (9.1) is of potential form is by no means the most general case. We shall consider non-potential forces later on. However, there are certain important consequences of the potential nature of the force that deserve special attention.

We can now employ the MSR method, as described in Section 4.3, to transform the problem to a functional representation. To this end we introduce a functional delta-function of the Langevin equation (9.1) and employ exponential representation of it with the help of an auxiliary field $\varphi^q(\mathbf{r}, t)$. In doing so it is important to keep the retarded (Ito) regularization of the time derivative in Eq. (9.1) to ensure that the corresponding Jacobian is one (see Section 4.3 for more detailed discussion). Performing Gaussian averaging over the white noise (9.2), one obtains the MSR action

$$S[\varphi, \varphi^q] = \int_{-\infty}^{+\infty} dt \int d\mathbf{r} \left\{ -2\varphi^q [\partial_t^R \varphi - D \nabla_{\mathbf{r}}^2 \varphi + V'(\varphi)] + 4iT (\varphi^q)^2 \right\} \quad (9.4)$$

To emphasize connections with Keldysh formalism it is convenient to split the first term on the right-hand side into two equal parts and perform integration by parts on one of them. In the discretized time representation this amounts to the transposition of the ∂_t^R operator, which transforms its retarded (lower triangular) form into the advanced (upper triangular) one. This leads to

$$S[\varphi, \varphi^q] = \int dt d\mathbf{r} (\varphi, \varphi^q) \begin{pmatrix} 0 & \partial_t^A + D \nabla_{\mathbf{r}}^2 - \delta - g\varphi^2 \\ -\partial_t^R + D \nabla_{\mathbf{r}}^2 - \delta - g\varphi^2 & 4iT \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi \\ \varphi^q \end{pmatrix}, \quad (9.5)$$

where as a potential we took

$$V(\varphi) = \frac{\delta}{2}\varphi^2 + \frac{g}{4}\varphi^4 \quad (9.6)$$

for its important applications. This form of the action could be directly derived starting from the quantum formalism of Chapter 6, by introducing the Ohmic bath of oscillators and taking the classical limit. The derivation is completely equivalent to the one presented in Section 4.1. Comparing the classical MSR action (9.5) with its quantum counterparts, for example, Eqs. (6.9) and (6.13), one may notice several differences: (i) the time derivatives come without imaginary i , reflecting the overdamped dissipative dynamics; (ii) the term $4iT(\varphi^q)^2$, which is due to the

noise associated with the bath, is absent in the quantum version; (iii) on the other hand, the term with $(\varphi^q)^3\varphi$ is absent in the MSR action. This is due to the fact that in the classical limit one keeps terms up to second order in φ^q . The ratio of the coefficients in terms (i) and (ii) is fixed by FDT. The latter is valid due to the assumed equilibrium in the bath. Notice that the action (9.5) does not have the form $S[\varphi^+] - S[\varphi^-]$, where $\varphi^\pm = \varphi \pm \varphi^q$ (unlike Eqs. (6.9) and (6.13)). This is due to the fact that the time-reversal symmetry (i.e. equivalence of the two branches of the contour) is explicitly broken by integrating out the thermal bath with the continuum spectrum.

12.4.2 9.2 Equilibrium Statistical Mechanics

Let us first investigate the MSR action (9.4) in the stationary path (or rather stationary field) approximation. To this end we take variational derivatives of the action with respect to $\varphi(\mathbf{r}, t)$ and $\varphi^q(\mathbf{r}, t)$. As explained in Section 4.4, the stationary field $\varphi^q(\mathbf{r}, t)$ appears to be pure imaginary (or zero). This means that the path of integration over $\mathbf{D}[\varphi^q]$ should be distorted in the complex planes of $\varphi^q(\mathbf{r}, t_j)$ to pass through stationary field configurations. It is thus convenient to rename the auxiliary field as $\varphi^q(\mathbf{r}, t) = \pi(\mathbf{r}, t)/(2i)$. The corresponding equations of motion for the fields $\varphi(\mathbf{r}, t)$ and $\pi(\mathbf{r}, t)$ are real and acquire the Hamiltonian structure

$$\partial_t \varphi(\mathbf{r}, t) = \frac{\delta \mathcal{H}[\pi, \varphi]}{\delta \pi(\mathbf{r}, t)}, \quad \partial_t \pi(\mathbf{r}, t) = -\frac{\delta \mathcal{H}[\pi, \varphi]}{\delta \varphi(\mathbf{r}, t)} \quad (9.7)$$

$$\mathcal{H}[\pi, \varphi] = \int d\mathbf{r} [\pi (D\nabla_{\mathbf{r}}^2 \varphi - V'(\varphi)) + T\pi^2] = \int d\mathbf{r} \pi \left[-\frac{\delta \mathcal{F}[\varphi]}{\delta \varphi(\mathbf{r}, t)} + T\pi \right] \quad (9.8)$$

There is one obvious way to solve these equations by putting $\pi(\mathbf{r}, t) = 0$, while $\partial_t \varphi(\mathbf{r}, t) = \delta \mathcal{H}[\pi, \varphi]/\delta \pi(\mathbf{r}, t)|_{\pi=0} = D\nabla_{\mathbf{r}}^2 \varphi - V'(\varphi)$. This corresponds, of course, to noiseless relaxation dynamics of the field φ . Such a solution evolves on the zero-energy manifold $\mathcal{H} = 0$. The long-time activation dynamics of the system is described by another zero-energy manifold. For the one degree of freedom example of Section 4.4 such a manifold (curve) is given by $P = V'(X)/T$ and the corresponding activation trajectories are time-reversed from the relaxation ones. Remarkably, this solution may be directly generalized for the spatially extended potential model (9.1) (see also the footnote in Section 4.13). To this end, let us try to impose that the Hamiltonian (9.8) is nullified locally in every spatial point, that is,

$$\pi(\mathbf{r}, t) = \frac{-D\nabla_{\mathbf{r}}^2 \varphi + V'(\varphi)}{T}; \quad \partial_t \varphi(\mathbf{r}, t) = -D\nabla_{\mathbf{r}}^2 \varphi + V'(\varphi), \quad (9.9)$$

where the second equality is an immediate consequence of the first one and the equation of motion for the φ -field. It is easy to check that, if Eqs. (9.9) are true, the equation of motion for the π -field is also satisfied.¹ Notice that not only is the total energy $\mathcal{H} = 0$ conserved, but it is also zero at every point. This observation is related to the fact that in the stationary

distribution the probability current is zero at every point (this is true only for the potential forces, of course). Also notice that on the zero-energy activation solution (9.9) the φ -field evolution is time-reversed from the noiseless relaxation.

We can address now the long-time probability of finding the extended system in a field configuration $\varphi_0(\mathbf{r})$. It is given by the exponentiated action, calculated along the trajectory that leads from $\varphi = 0$ to $\varphi_0(\mathbf{r})$. Such a trajectory is the time-reversal of the noiseless relaxation motion from an arbitrary initial profile $\varphi_0(\mathbf{r})$ down to the lowest energy state $\varphi = 0$. Employing that $\mathcal{H} = 0$ along such a trajectory, the corresponding action (9.4) $S = \int dt (\pi \partial_t \varphi - \mathcal{H})$ is ²

$$\int d\mathbf{r} dt \pi \partial_t \varphi = \int d\mathbf{r} dt \frac{-D \nabla_{\mathbf{r}}^2 \varphi + V'(\varphi)}{T} \partial_t \varphi = \frac{1}{T} \int d\mathbf{r} dt \partial_t \left[\frac{D}{2} (\nabla_{\mathbf{r}} \varphi)^2 + V(\varphi) \right]$$

One can now perform the integral over time explicitly. It is given by the expression in the square brackets calculated at the upper limit, which is $\varphi_0(\mathbf{r})$. As a result, we found that the corresponding action is $S = \mathcal{F}[\varphi_0]/T$. Finally, the long-time probability of finding the system in the field configuration $\varphi_0(\mathbf{r})$ is

$$\mathcal{P}[\varphi_0] = Z^{-1} e^{-\mathcal{F}[\varphi_0]/T}; \quad Z = \int \mathbf{D}[\varphi] e^{-\mathcal{F}[\varphi]/T} \quad (9.10)$$

provided the partition function Z exists. This is, of course, nothing but the equilibrium statistical mechanics of the static field $\varphi(\mathbf{r})$. We have found thus that the dynamical model (9.1) with the potential forces (9.2) evolves in the long-time limit toward the stationary Boltzmann distribution (9.10) (if the potential $V(\varphi)$ is bounded from below).

Strictly speaking, so far we have established Eq. (9.10) with exponential accuracy only, that is, we did not prove that the pre-exponential factor Z^{-1} is φ_0 independent. To do this one needs to go beyond the stationary field approximation and write down the Fokker-Planck equation for the probability $\mathcal{P}([\varphi], t)$, where the square brackets indicate that probability is a functional of $\varphi(\mathbf{r})$ field configuration at time t . In a complete analogy with Eq. (4.30) such a Fokker-Planck equation takes the form

$$\partial_t \mathcal{P}([\varphi], t) = \int d\mathbf{r} \frac{\delta}{\delta \varphi(\mathbf{r})} \left[\frac{\delta \mathcal{F}[\varphi]}{\delta \varphi(\mathbf{r})} \mathcal{P}([\varphi], t) + T \frac{\delta \mathcal{P}([\varphi], t)}{\delta \varphi(\mathbf{r})} \right]. \quad (9.11)$$

The expression in the square brackets is the (minus) probability current $J([\varphi], \mathbf{r}, t)$. Demanding that each component, labeled by $\mathbf{r}$, of the latter vanishes, one immediately finds the stationary distribution (9.10). This proves that the only pre-exponential factor in Eq. (9.10) is the φ_0 -independent normalization constant, that is, the inverse partition function.

12.4.3 9.3 Critical Nucleation in First-Order Transitions

As an example of a non-equilibrium situation we consider a "supercooled" phase, beyond the point of first-order phase transition. It is described by a field trapped in a metastable potential minimum depicted in Fig. 9.1. Since the corresponding potential is not bounded from below, one can't apply the equilibrium statistical mechanics specified by Eq. (9.10). Instead, one should consider nucleation of the more stable phase, which occurs due to rare large fluctuations of the field. If the latter activates a sufficiently large region of the system beyond the potential maximum, it becomes energetically favorable for the stable phase to grow. The long-time

⁰¹ Indeed, we first notice that $\partial_t \varphi = T\pi$, then take the time derivative of the second equation in (9.9), $\partial_t (\partial_t \varphi) = -D \nabla_{\mathbf{r}}^2 \partial_t \varphi + V''(\varphi) \partial_t \varphi$, which may be written as $\partial_t \pi = -D \nabla_{\mathbf{r}}^2 \pi + V''(\varphi) \pi$, which is exactly the equation of motion for the π -field.

² For the rest of this chapter we suppress the imaginary unit i in the MSR action.

dynamics of such a rare fluctuation is described by $\mathcal{H} = 0$ stationary field equations (9.9). To overcome the potential barrier the fluctuation must reach a saddle-point field configuration $\varphi_s(\mathbf{r})$. The latter is a generalization of the unstable fixed point X_s in Fig. 4.1(b). As such, it must satisfy the stationary noiseless equation of motion

$$0 = - \left. \frac{\delta \mathcal{F}[\varphi]}{\delta \varphi(\mathbf{r}, t)} \right|_{\varphi_s(\mathbf{r})} = D \nabla_{\mathbf{r}}^2 \varphi_s - V'(\varphi_s) \quad (9.12)$$

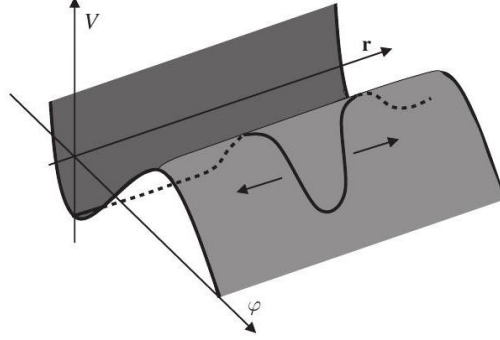


Figure 9.1 Metastable potential $V(\varphi)$. The arrows indicate the direction of the domain wall motion after the field fluctuation reaches the saddle configuration $\varphi_s(\mathbf{r})$ (bold line).

with the boundary condition $\varphi_s(\infty) = 0$, where zero denotes the metastable minimum. According to the calculations leading to Eq. (9.10), the long-time action of such a fluctuation is $\mathcal{F}[\varphi_s]/T$. As a result, the nucleation rate of critical domains is given by $R \sim e^{-\mathcal{F}[\varphi_s]/T}$. Once the critical domain is formed, it starts to grow according to the deterministic noiseless equation of motion $\partial_t \varphi = D \nabla_{\mathbf{r}}^2 \varphi - V'(\varphi)$, analog of the $P = 0$ line in Fig. 4.1(b) for $X > X_s$. This latter process is associated with the domain walls motion, Fig. 9.1.

To establish the pre-exponential factor in the nucleation rate R we need to generalize treatment of the Kramers problem, Section 4.8, for the spatially extended case [140]. To this end consider the effective potential in a vicinity of the saddle configuration $\varphi_s(\mathbf{r})$. Expanding it to second order (the first order is absent, since φ_s is a stationary function of the $\mathcal{F}[\varphi]$ functional), one finds

$$\mathcal{F}[\varphi] = \mathcal{F}[\varphi_s] + \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \left. \frac{\delta^2 \mathcal{F}[\varphi]}{\delta \varphi(\mathbf{r}) \delta \varphi(\mathbf{r}')} \right|_{\varphi_s} \delta \varphi(\mathbf{r}) \delta \varphi(\mathbf{r}') + \dots$$

where $\delta \varphi(\mathbf{r}) = \varphi(\mathbf{r}) - \varphi_s(\mathbf{r})$. It is convenient to diagonalize the symmetric form $\delta^2 \mathcal{F}[\varphi] / \delta \varphi(\mathbf{r}) \delta \varphi(\mathbf{r}')|_{\varphi_s}$ and find its eigenvalues λ_n and eigenfunctions $\chi_n(\mathbf{r})$, where $n = -1, 0, 1, \dots, N-2$, and N is the total number of degrees of freedom. Since φ_s is a saddle rather than a minimum, there is one negative eigenvalue $\lambda_{-1} < 0$, while $\lambda_0, \dots, \lambda_{N-2} \geq 0$. The eigenfunctions are orthogonal and can be normalized as $\int d\mathbf{r} \chi_n(\mathbf{r}) \chi_m(\mathbf{r}) = \delta_{nm}$. One can now expand any variation $\delta \varphi(\mathbf{r})$ in this basis and write

$$\delta \varphi(\mathbf{r}) = \sum_{n=-1}^{N-2} c_n \chi_n(\mathbf{r}); \quad \mathcal{F}[c] = \mathcal{F}[\varphi_s] + \frac{1}{2} \sum_{n=-1}^{N-2} \lambda_n c_n^2 + \dots \quad (9.13)$$

Similarly, one can apply this orthogonal transformation to the metastable distribution $\mathcal{P}[\varphi] \rightarrow \mathcal{P}[c]$ and to the stationary probability current out of the metastable state $J([\varphi], \mathbf{r}) \rightarrow J_n[c]$, Eq. (9.11). The latter obeys the continuity relation $\sum_n \partial_{c_n} J_n[c] = 0$, where we neglected the exponentially small time derivative of the metastable distribution in a vicinity of the saddle. Since we expect that the escape proceeds along the unstable direction, we can assume that $J_0, \dots, J_{N-2} = 0$ and therefore the only nonzero current component $J_{-1}[c_0, \dots, c_{N-2}]$ is independent of c_{-1} . We can write thus:

$$J_{-1}[c] = - \left[\frac{\partial \mathcal{F}[c]}{\partial c_{-1}} \mathcal{P}[c] + T \frac{\delta \mathcal{P}[c]}{\delta c_{-1}} \right]; \quad 0 = - \left[\frac{\partial \mathcal{F}[c]}{\partial c_n} \mathcal{P}[c] + T \frac{\delta \mathcal{P}[c]}{\delta c_n} \right]$$

where $n = 0, 1, \dots, N-2$. Solving the second equation here with the help of Eq. (9.13), one obtains $\mathcal{P}[c] = e^{-\mathcal{F}[c]/T} u(c_{-1})$, where $u(c_{-1})$ is a yet unknown function. Substituting it into the first equation and employing the continuity relation $\partial_{c_{-1}} J_{-1} = 0$, one finds

$$J_{-1}[c] = I e^{-(\mathcal{F}[\varphi_s] + \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{N-2} \lambda_n c_n^2)/T}; \quad \mathcal{P}[c] = \frac{I}{T} e^{-\mathcal{F}[c]/T} \int_{c_{-1}}^{\infty} d\tilde{c}_{-1} e^{-|\lambda_{-1}| \tilde{c}_{-1}^2/2T}$$

(compare with Eq. (4.48)), where I is a normalization constant. To determine the latter, one notices that the $d\tilde{c}_{-1}$ integral reaches practically a constant value $\sqrt{2\pi T/|\lambda_{-1}|}$ for $c_{-1} \lesssim -\sqrt{2T/|\lambda_{-1}|}$. For a low temperature this is a small distance, and the maximum of the metastable distribution is expected to be at much more negative c_{-1} . Therefore, around the maximum the distribution is $\mathcal{P}[\varphi] = I \sqrt{2\pi/T|\lambda_{-1}|} e^{-\mathcal{F}[\varphi]/T}$. To normalize it one needs to find eigenvalues of $\delta^2 \mathcal{F}[\varphi] / \delta \varphi(\mathbf{r}) \delta \varphi(\mathbf{r}')|_{\varphi=0}$ around the metastable configuration $\varphi = 0$. Due to the local stability of $\varphi = 0$ they are all positive, $\lambda_k^{(0)} > 0$, where $k = 1, \dots, N$. Requiring $\int \mathbf{D}[\varphi] \mathcal{P}[\varphi] = 1$, one finds $I = \sqrt{T|\lambda_{-1}|/2\pi} e^{\mathcal{F}[0]/T} \prod_{k=1}^N \sqrt{\lambda_k^{(0)}/2\pi T}$. Finally, the critical nucleation rate R is given by the total normalized current across the surface, $c_{-1} = 0$, that is, $R = \int dc_0 \dots dc_{N-2} J_{-1}[c]$. This way we find [140]

$$R = \sqrt{\frac{T|\lambda_{-1}|}{2\pi}} \prod_{k=1}^N \sqrt{\frac{\lambda_k^{(0)}}{2\pi T}} e^{-(\mathcal{F}[\varphi_s] - \mathcal{F}[0])/T} \int dc_0 \dots dc_{N-2} e^{-\frac{1}{2T} \sum_{n=0} \lambda_n c_n^2} \quad (9.14)$$

Integrals over nonnegative modes $dc_0 \dots dc_{N-2}$ could be performed in the Gaussian approximation, if not for the presence of the zero modes in the spectrum $\lambda_0, \lambda_1, \dots$. The latter certainly exist due to the translational invariance of the saddle configuration $\varphi_s(\mathbf{r})$.

To illustrate how to deal with them, let us consider a one-dimensional example of Fig. 9.1. The saddle configuration $\varphi_s(x - x_0)$ may be centered around an arbitrary spatial point x_0 . The zero eigenmode $\chi_0(x)$, where $\lambda_0 = 0$, associated with the translational invariance, may be thus identified as $\varphi(x) = \varphi_s(x) + x_0 \nabla_x \varphi_s(x) + \dots$. Comparing it with Eq. (9.13), one finds $\chi_0(x) = \nabla_x \varphi_s(x) / \left[\int dx (\nabla_x \varphi_s)^2 \right]^{1/2}$ and $c_0 = x_0 \left[\int dx (\nabla_x \varphi_s)^2 \right]^{1/2}$. Taking into account that for the saddle configuration the total elastic energy is equal to the potential one, we find $\int dx (\nabla_x \varphi_s)^2 = \mathcal{F}[\varphi_s]/D$, where we put $\mathcal{F}[0] = 0$. We thus obtain $dc_0 = dx_0 \sqrt{\mathcal{F}[\varphi_s]/D}$. Since $\lambda_0 = 0$, the dc_0 integration results in the factor $L \sqrt{\mathcal{F}[\varphi_s]/D}$, where $L = \int dx_0$ is the total spatial length of the string. The integrals over remained modes with eigenvalues $\lambda_1, \dots, \lambda_{N-2} > 0$ in Eq. (9.14) may be evaluated in the Gaussian approximation. One thus obtains for the nucleation rate per unit length

$$\frac{R}{L} = \left[\frac{\mathcal{F}[\varphi_s]}{T} \frac{|\lambda_{-1}|}{(2\pi)^3 D} \prod_{k=1}^N \lambda_k^{(0)} \prod_{n=1}^{N-2} \frac{1}{\lambda_n} \right]^{1/2} e^{-\mathcal{F}[\varphi_s]/T} \quad (9.15)$$

The dimensionality is given by $[\lambda] = 1/\text{time}$ and $[D] = \text{length}^2/\text{time}$, the right-hand side is thus $[\text{time} \times \text{length}]^{-1}$, as it should be.

To proceed with Eq. (9.15) let us consider a cubic potential, cf. Eq. (3.34),

$$V(\varphi) = V_0 \left[\delta \left(\frac{\varphi}{\bar{\varphi}} \right)^2 - \left(\frac{\varphi}{\bar{\varphi}} \right)^3 \right].$$

The corresponding equation for $\varphi_s(x)$ takes the form $D\nabla_x^2\varphi_s - V'(\varphi_s) = 0$ with the boundary conditions $\varphi_s(\pm\infty) = 0$. The equation may be integrated once to yield $\frac{D}{2}(\nabla_x\varphi_s)^2 = V(\varphi_s)$, which may now be easily solved, leading to $\varphi_s(x) = \bar{\varphi}\delta\cosh^{-2}(x/\bar{x})$, where $\bar{x} = \bar{\varphi}\sqrt{2D/V_0\delta}$. The activation energy is then $\mathcal{F}[\varphi_s] = (8/15)\sqrt{2V_0D\bar{\varphi}^2\delta^{5/2}}$; compare Eq. (3.36). The corresponding equation for the eigenvalues λ_n acquires the form of the Schrödinger equation with a $\cosh^{-2}(x/\bar{x})$ potential. Its solutions are well known [36]. As expected, there is a single negative eigenvalue $\lambda_{-1} = -(5/2)V_0\delta/\bar{\varphi}^2$, the zero eigenvalue $\lambda_0 = 0$, a positive discrete eigenvalue $\lambda_1 = (3/2)V_0\delta/\bar{\varphi}^2$ and the continuum of positive eigenvalues $\lambda_p = (2 + p^2/2)V_0\delta/\bar{\varphi}^2$, where p is a real continuum label. The eigenvalues near the metastable minimum are also continuous, given by $\lambda_k^{(0)} = (2 + k^2/2)V_0\delta/\bar{\varphi}^2$. As a result, the pre-exponential factor in Eq. (9.15) is

$$\left[C \frac{\sqrt{V_0D\bar{\varphi}^2\delta^{5/2}}}{T} \frac{V_0\delta/\bar{\varphi}^2}{D} (V_0\delta/\bar{\varphi}^2)^2 \right]^{1/2} = C^{1/2} \frac{V_0^{7/4}\delta^{11/4}}{T^{1/2}D^{1/4}\bar{\varphi}^{5/2}} \quad (9.16)$$

where C is a numerical constant. ³ Notice the very strong $\delta^{11/4}$ dependence of the pre-exponential factor on the bifurcation parameter δ . It should be compared with the linear dependence in the corresponding $d = 0$ Kramers problem result, Eq. (4.53).

³ $C = \frac{8\sqrt{2}}{15} \frac{5}{2} \frac{1}{(2\pi)^3} \prod_k \lambda_k^{(0)\frac{2}{3}} \prod_p \lambda_p^{-1}$. To evaluate the products over the continuous spectra, we notice that the quantization condition for k is $kL = 2\pi n$, where n is an integer. One thus finds $\prod_k \lambda_k^{(0)} = e^{\sum_k \ln \lambda_k^{(0)}} = e^{\int L/(2\pi) dk \ln(2+k^2/2)}$. The quantization condition at the saddle for p is $pL + \delta(p) = 2\pi n$, where $\delta(p)$ is the phase-shift in the reflectionless $\cosh^{-2}(x/\bar{x})$ potential, which is [36]

$$\delta(p) = \arg \left[\frac{(-1+ip)(-2+ip)(-3+ip)}{(1+ip)(2+ip)(3+ip)} \right]$$

As a result, $\prod_p \lambda_p^{-1} = e^{-\sum_p \ln \lambda_p} = e^{-\int (L+\delta'(p))/(2\pi) dp \ln(2+p^2/2)}$, where $\delta'(p)/(2\pi)$ is a (negative) correction to the density of the continuous states. Notice that $-\int \delta'(p)/(2\pi) dp = 3$ is a number of discrete states, which correctly takes care of the dimensional factor $V_0\delta/\bar{\varphi}^2$. Finally $\prod_k \lambda_k^{(0)} \prod_p \lambda_p^{-1} = e^{-\int \delta'(p)/(2\pi) dp \ln(2+p^2/2)} = 450$. Putting it all together, $C^{1/2} = 1.51$.

12.4.4 9.4 Dynamics Near a Classical Second-Order Transition

In this section we focus on the model with the potential (9.6), described by the action (9.5). Neglecting for a moment the nonlinear term $\propto g$ and assuming that $\delta > 0$, one finds Gaussian response and correlation functions; compare Eqs. (3.13),

$$D_0^R(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{i} \int d\mathbf{r} dt e^{i(\omega t - \mathbf{q}\mathbf{r})} \langle \varphi(\mathbf{r}, t) \varphi^q(\mathbf{0}, 0) \rangle = \frac{1}{2i\omega - D\mathbf{q}^2 - \delta}; \quad (9.17a)$$

$$D_0^A(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{i} \int d\mathbf{r} dt e^{i(\omega t - \mathbf{q}\mathbf{r})} \langle \varphi^q(\mathbf{r}, t) \varphi(\mathbf{0}, 0) \rangle = \frac{1}{2i\omega + D\mathbf{q}^2 + \delta}; \quad (9.17b)$$

$$D_0^K(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{i} \int d\mathbf{r} dt e^{i(\omega t - \mathbf{q}\mathbf{r})} \langle \varphi(\mathbf{r}, t) \varphi(\mathbf{0}, 0) \rangle = \frac{-i2T}{\omega^2 + (D\mathbf{q}^2 + \delta)^2} \quad (9.17c)$$

and, as always, $\langle \varphi^q \varphi^q \rangle = 0$. Notice that, in agreement with the classical limit of FDT, $D^K = (2T/\omega)(D^R - D^A)$, which holds even for the full Green functions including nonlinear effects. From the last expression one finds for the equal time, $t = 0$, the Gaussian correlation function

$$\langle \varphi(\mathbf{r}, 0) \varphi(\mathbf{0}, 0) \rangle = \int \frac{d\mathbf{q} d\omega}{(2\pi)^{d+1}} \frac{2Te^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}}{\omega^2 + (D\mathbf{q}^2 + \delta)^2} = T \int^\Lambda \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^d} \frac{e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}}{D\mathbf{q}^2 + \delta}. \quad (9.18)$$

This is exactly what one expects from the static equilibrium statistical mechanics of a membrane in the Gaussian potential $V(\varphi) = \delta\varphi^2/2$, Eq. (9.10). The short distance divergence of the integral in $d > 1$ is regularized by a cutoff $\Lambda \approx 1/a$, where a is the lattice constant. On the other hand, divergence at long distances in the limit $\delta \rightarrow 0$ signals the importance of the nonlinear terms, so far omitted.

The $\delta \rightarrow 0$ limit describes the vicinity of the second-order phase transition. Indeed, for $\delta > 0$ the potential $V(\varphi)$, Eq. (9.6), has a single minimum at $\varphi = 0$, describing, say, a nonmagnetic state. If $\delta < 0$ there are two distinct minima at $\varphi = \pm(-\delta/g)^{1/2}$, describing a magnetized state; see Fig. 9.3. In the latter case the system spontaneously chooses (for $d > 1$) one of the two minima, breaking the symmetry $\varphi, \varphi^q \rightarrow -\varphi, -\varphi^q$ present in the action (9.5). It is thus said that $\delta \sim T - T_c$ is a critical parameter, where T_c is a critical temperature of the second-order phase transition. It was shown experimentally, numerically, and eventually analytically that various observable and correlation functions exhibit power-law scaling dependence on $|\delta|$ in the limit $|\delta| \rightarrow 0$. In particular, the characteristic spatial scale of the static correlation function (9.18), known as the correlation length ξ , diverges as $\xi \propto |\delta|^{-\nu}$. The dynamic correlation functions, for example, (9.17c), possess a characteristic timescale τ , which diverges as $\tau \propto |\delta|^{-\nu z} \propto \xi^z$. Inspecting Eqs. (9.17) and (9.18), one concludes that in the Gaussian theory the corresponding critical exponents are $\nu = 1/2$ and $\nu z = 1$. We shall show in what follows that

this is indeed the case for $d > d_c$, where in the present case the critical dimension is $d_c = 4$. Below the critical dimension, $d < 4$, the critical exponents deviate from the Gaussian predictions, maintaining nevertheless remarkable universality. The way to understand such a universality and evaluate critical exponents was suggested by Wilson [141], see also [142, 143], and is known as the renormalization group (RG). We shall not provide here a detailed account of RG ideology, referring the reader to a number of excellent presentations [5, 9, 144, 142, 143]. Instead, we shall focus on some peculiarities of the perturbative RG in a dynamical setting.

The idea is to gradually integrate out fast degrees of freedom, monitoring the evolution of the effective action for the remaining slow degrees of freedom. The corresponding evolution equations for the action parameters, being linearized around a proper fixed point, reveal the critical exponents. The differences between the static and dynamic theory are as follows: (i) in the latter case the degrees of freedom are labeled by momentum $\mathbf{q}$ and frequency ω , while in the former only by $\mathbf{q}$; (ii) due to the doubling of the number of fields φ and φ^q , the dynamic action has room for many more possible terms than the static one. One needs to discuss thus how to split the degrees of freedom into slow and fast ones and how to select the relevant terms in the action.

A convenient way to separate degrees of freedom is depicted in Fig. 9.2. We write, thus, $\varphi(\mathbf{q}, \omega) = \varphi_s(\mathbf{q}_s, \omega) + \varphi_f(\mathbf{q}_f, \omega)$ and the same for $\varphi^q(\mathbf{q}, \omega)$, where subscripts s and f denote slow and fast parts, respectively. The fast part contains momenta in the shell $\Lambda/b < q < \Lambda$, where $b > 1$, and unrestricted frequencies, while the slow part has momenta $q < \Lambda/b$ and also unrestricted frequencies. The drawback of this approach is that the slow fields have all frequency components and thus their effective action technically acquires nonlocal (in time) form upon integration over the fast fields. It is only if one focuses on the low-frequency components that the time locality is restored. As a result, the high-frequency components of the slow fields are simply ignored rather than being integrated out. One could, in principle, introduce shells in both momentum and frequency directions

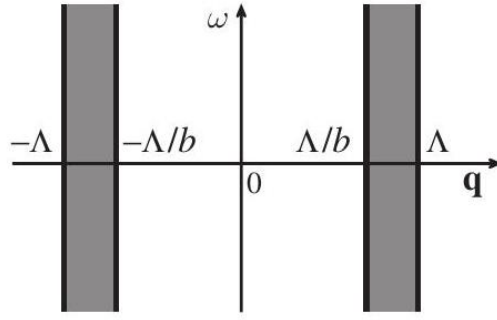


Figure 9.2 Separation of degrees of freedom into slow (central area) and fast (shaded areas).

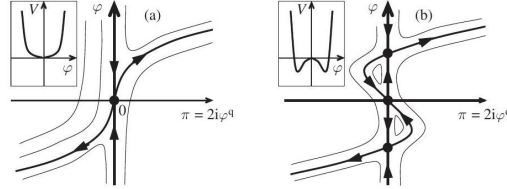


Figure 9.3 Phase portraits of the system undergoing a second-order phase transition: (a) nonmagnetic state $\delta > 0$; (b) magnetic state $\delta < 0$. The insets show the corresponding potentials $V(\varphi)$.

[9]. It complicates calculations, but seems not to change the results (technically due to the fast convergence of the frequency integrals, as, for example, in Eq. (9.18)).

To visualize what terms in the effective action are important to keep, it is convenient to involve the Hamiltonian language of Eq. (9.8), which is obtained by treating $\pi = 2i\varphi^q$ as the canonical pair of φ . The phase portraits of the corresponding Hamiltonian (9.8) (without the gradient terms) for $\delta > 0$ and $\delta < 0$ are plotted in Fig. 9.3. As discussed in Section 4.4, one needs to focus on the two lines of zero energy $\pi = 0$ and $\pi = V'(\varphi)/T$. The second-order transition may be identified with the qualitative rearrangement of their geometry: three intersections versus one. Notice also that the reflection symmetry $(\pi, \varphi) \rightarrow (-\pi, -\varphi)$ of phase space is intact in both cases. One should thus keep the minimal number of terms, which (i) allow for the transition between three and one intersections and (ii) obey the reflection symmetry. This is achieved with the Hamiltonian $H = \pi(\gamma T\pi - \delta\varphi - g\varphi^3)$. Notice that other allowed terms, for example, $\pi^2\varphi^2$, do not change the qualitative shape of Fig. 9.3 for small δ and thus may be neglected. The minimal action to be considered is thus

$$S[\varphi, \pi] = \int d\mathbf{r} dt \left[\gamma \pi \partial_t \varphi - D \pi \nabla_{\mathbf{r}}^2 \varphi + \delta \pi \varphi + g \pi \varphi^3 - \gamma T \pi^2 \right], \quad (9.19)$$

where we reintroduced the friction coefficient γ , see Eq. (4.2). It contains five constants γ, D, δ, g , and γT . One then substitutes $\varphi = \varphi_s + \varphi_f$ and $\pi = \pi_s + \pi_f$ and proceeds in two steps.

In the first step the space of slow momenta $|\mathbf{q}_s| < \Lambda/b$ is rescaled to the original size Λ , that is, $\mathbf{q}_s \rightarrow \mathbf{q}/b$, where $|\mathbf{q}| < \Lambda$. In coordinate space it means $\mathbf{r} \rightarrow b\mathbf{r}$. We shall also rescale time and the slow fields in the following manner:

$$\mathbf{r} \rightarrow b\mathbf{r}, \quad t \rightarrow b^z t, \quad \varphi_s(\mathbf{r}, t) \rightarrow b^{\tilde{\chi}} \varphi(b\mathbf{r}, b^z t), \quad \pi_s(\mathbf{r}, t) \rightarrow b^{\tilde{\chi}} \pi(b\mathbf{r}, b^z t). \quad (9.20)$$

Then the part of the action (9.19) that contains only the slow fields acquires the same form as Eq. (9.19) with the constants renormalized in the following way:

$$\begin{aligned} \gamma' &= b^{d+\tilde{\chi}+\chi} \gamma, & D' &= b^{d+z-2+\tilde{\chi}+\chi} D, & \delta' &= b^{d+z+\tilde{\chi}+\chi} \delta, \\ g' &= b^{d+z+\tilde{\chi}+3\chi} g, & (\gamma T)' &= b^{d+z+2\tilde{\chi}} \gamma T. \end{aligned} \quad (9.21)$$

The respective exponents are called bare scaling dimensions of the corresponding terms in the action.

The second step is to expand e^{-S} , where S is given by Eq. (9.19), in a power series in terms containing interactions of the slow and fast fields. In particular, one is interested in terms (i) $3g\pi_s\varphi_s\varphi_f^2$ and (ii) $3g\pi_f\varphi_f\varphi_s^2$. One then performs Gaussian integration over the fast fields, employing the Green functions (9.17) (recall that $\pi_f = 2i\varphi_f^q$). After the rescaling (9.20) the fast momenta are running in $\Lambda < q_f < b\Lambda$. The one-loop diagram expressing correction to the terms in the action $\propto \pi\varphi$ employs vertex (i) ⁴ and is depicted in Fig. 9.4(a). The corresponding loop is given by

$$\begin{aligned} 3g \frac{1}{i} \int_{\Lambda}^{b\Lambda} \frac{d\mathbf{q}_f}{(2\pi)^d} \int \frac{d\omega}{2\pi} D_0^K(\mathbf{q}_f, \omega) &= -3g \int_{\Lambda}^{b\Lambda} \frac{d\mathbf{q}_f}{(2\pi)^d} \frac{T}{D\mathbf{q}_f^2 + \delta} \\ &\approx -3g \int_{\Lambda}^{b\Lambda} \frac{d\mathbf{q}_f}{(2\pi)^d} \frac{T}{D\mathbf{q}_f^2} + 3g\delta \int_{\Lambda}^{b\Lambda} \frac{d\mathbf{q}_f}{(2\pi)^d} \frac{T}{(D\mathbf{q}_f^2)^2} \end{aligned} \quad (9.22)$$

The first δ -independent term constitutes additive correction to δ (or, in other words, it shifts the point of the transition, i.e. T_c). Since in our approach the latter is anyway a phenomenological parameter, the first term on the right-hand side of Eq. (9.22) may be omitted. The second term $\propto g\delta$ provides an additional (beyond the bare scaling (9.21)) multiplicative correction to δ , which must be kept. Since there is no dependence on external momentum and frequency in the diagram of Fig. 9.4(a), there are no one-loop corrections to γ and D . They appear, however, along with a

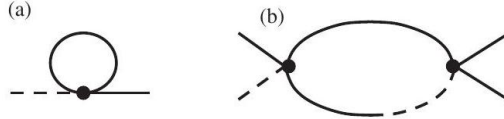


Figure 9.4 One-loop renormalization of running constants δ (a) and g (b). Full lines represent φ , dashed lines $\varphi^q = \pi/(2i)$, and each bold dot carries a factor of $3g$.

correction to the γT vertex, in the two-loop order, coming from the vertices $g\pi_s\varphi_f^3$ and $3g\pi_f\varphi_s\varphi_f^2$.

The one-loop diagram, expressing corrections to the interaction vertex $\propto g\pi\varphi^3$, employs vertices (i) $\times$ (ii) ⁵ and is depicted in Fig. 9.4(b). It is given by

$$9g^2 \frac{4}{i} \int_{\Lambda}^{b\Lambda} \frac{d\mathbf{q}_f}{(2\pi)^d} \int \frac{d\omega}{2\pi} D_0^K(\mathbf{q}_f, \omega) D_0^R(\mathbf{q}_f, \omega) = 9g^2 \int_{\Lambda}^{b\Lambda} \frac{d\mathbf{q}_f}{(2\pi)^d} \frac{T}{(D\mathbf{q}_f^2)^2}, \quad (9.23)$$

where we have neglected the small critical parameter δ in comparison with $D\Lambda^2$. Exponentiating back the resulting expressions, one finds the one-loop corrections to the running coupling constants δ and g .

We now put $b = 1 + l$, where l is an infinitesimal increment, and perform the integrals in Eqs. (9.22) and (9.23). We then combine the loop corrections with the bare scaling (9.21) and write them both in the differential form

$$\begin{aligned} \partial_l \gamma &= (d + \tilde{\chi} + \chi)\gamma, & \partial_l D &= (d + z - 2 + \tilde{\chi} + \chi)D, \\ \partial_l(\gamma T) &= (d + z + 2\tilde{\chi})\gamma T, \\ \partial_l \delta &= (d + z + \tilde{\chi} + \chi)\delta - 3g\delta K_d, & \partial_l g &= (d + z + \tilde{\chi} + 3\chi)g - 9g^2 K_d, \end{aligned} \quad (9.24)$$

where $K_d = (T/D^2) \Lambda^{d-4} 2^{1-d} \pi^{-d/2} \Gamma(d/2)$ is $\Lambda^{d-4} (2\pi)^{-d} T/D^2$ times the area of the unit sphere in d dimensions. We can now use the freedom of choosing $\tilde{\chi}, \chi$ along with the scale of

⁴ Vertex (ii) would result in terms $\propto \varphi^2$, which violate the fundamental property $S[\varphi, 0] = 0$. Fortunately they are proportional to $D^R(0, 0) + D^A(0, 0) = 0$, due to coinciding time arguments.

time to fix three of these five parameters. It is convenient to fix γ , D , and γT , that is, the parameters of the Gaussian action at the critical point. This is achieved by demanding that $d + \tilde{\chi} + \chi = 0$, $d + z - 2 + \tilde{\chi} + \chi = 0$ as well as $d + z + 2\tilde{\chi} = 0$. This results in the following scaling dimensions: $z = 2$, $\chi = 1 - d/2$, and $\tilde{\chi} = -1 - d/2$. The remaining two RG equations read as

$$\partial_l \delta = (2 - 3gK_d) \delta, \quad \partial_l g = (\epsilon - 9gK_d) g, \quad (9.25)$$

where $\epsilon = 4 - d$.⁶ For $\epsilon < 0$, that is, $d > d_c = 4$, the nonlinearity is irrelevant, meaning $g \rightarrow 0$ as l increases. The equation for the critical parameter δ may then be easily integrated, leading to $\delta = \delta_0 e^{2l} = \delta_0 b^2$. To carry out rescaling until $\delta \propto 1$, where the renormalized system is not critical, thus requires $b \propto \delta_0^{-1/2}$. Since b is the spatial scaling factor, see Eq. (9.20), it implies $\xi \propto \delta_0^{-1/2}$ and accordingly $\nu = 1/2$, as expected for Gaussian theory.

If $d < 4$ and $\epsilon > 0$, the equation for the interaction constant g predicts that it evolves toward the Wilson-Fisher fixed point $g^* = \epsilon/(9K_4)$. Our perturbative scheme is justified as long as g^* is small, requiring $\epsilon \ll 1$ (this is the reason one

substitutes K_d by K_4). The corresponding perturbative scheme is thus known as the ϵ -expansion [141]. Then the RG equation for the critical parameter δ acquires the form $\partial_l \delta = (2 - \epsilon/3)\delta$. Integrating it, one finds for the correlation length critical exponent $\nu = (2 - \epsilon/3)^{-1} \approx 1/2 + \epsilon/12$, while the correlation time exponent is $\nu z = 1 + \epsilon/6$. We thus find that both spatial and temporal scales diverge on approaching the critical point with non-Gaussian exponents. In the model at hand the dynamical exponent $z = 2 + O(\epsilon^2)$ is not altered within the one-loop approximation; it is modified, however, at the two-loop level [145]. In what follows we shall consider examples where z is already nontrivial in the order ϵ .

The previous calculations may be straightforwardly extended to the case where φ (and φ^a) are N -component vectors and the equations of motion are $O(N)$ rotationally invariant. The Gaussian part of the corresponding action has the form $\sum_{a=1}^N \pi_a(\dots) \varphi_a$, where dots stand for the linear kinetic operator. The interaction part acquires the form $\sum_{a,b=1}^N g \pi_a \varphi_a \varphi_b \varphi_b$. Splitting the fields into slow and fast components gives rise to four vertices: (i) $g \pi_{as} \varphi_{as} \varphi_{bf} \varphi_{bf}$; (ii) $2g \pi_{as} \varphi_{af} \varphi_{bs} \varphi_{bf}$; (iii) $g \pi_{af} \varphi_{af} \varphi_{bs} \varphi_{bs}$; and (iv) $2g \pi_{af} \varphi_{as} \varphi_{bs} \varphi_{bf}$. The bare scaling (9.21) is, of course, the same. The one-loop correction to δ , Fig. 9.4(a), originates from vertices (i) and (ii), which contribute to the coefficient as $N + 2$. The one-loop correction to g , Fig. 9.4(b), comes from the [(i) + (ii)] $\times$ [(iii) + (iv)] combination of vertices, which brings the coefficient $N + 2 + 2 + 4 = N + 8$. As a result the RG equations (9.25) acquire the form $\partial_l \delta = (2 - (N + 2)gK_4) \delta$ and $\partial_l g = (\epsilon - (N + 8)gK_4) g$, leading to, for example, $\nu^{-1} = 2 - \epsilon(N + 2)/(N + 8) + O(\epsilon^2)$.

12.4.5 9.5 Hohenberg-Halperin Classification

So far we have seen that the universality class, that is, the set of critical exponents, depends on the dimensionality d and the number of the field components N . This is similar to what is known in equilibrium statistical mechanics [144, 142, 143]. However, the dynamics of the transition, in particular the dynamic critical exponent z , also depends on the presence or absence of the conservation laws. This relation and emerging classification of the dynamic universality classes was elucidated by Hohenberg and Halperin [145]. The model considered in Section 9.4 (model A in the Hohenberg-Halperin classification) does not have any conserved quantities. It may be reformulated in a way to conserve $\int d\mathbf{r} \varphi(\mathbf{r}, t) = \varphi(\mathbf{q} = \mathbf{0}, t)$, describing

⁰⁵ Combination (i) $\times$ (i) generates a new interaction vertex $\pi^2 \varphi^2$, which is irrelevant (i.e. scales to zero); see what follows. On the other hand, (ii) $\times$ (ii) is zero, because $\langle \pi_f \pi_f \rangle = 0$.

⁶ The bare scaling dimension of the term $\pi^2 \varphi^2$ is $d + z + 2\tilde{\chi} + 2\chi = 2 - d$ and therefore it is indeed less relevant than both $\pi\varphi$ and $\pi\varphi^3$, as was already conjectured from the phase portrait, Fig. 9.3.

the order parameter φ of, for example, a uniaxial magnet with conserved total spin. To ensure the conservation law, the equation of motion must have a form of the continuity relation

$$\partial_t \varphi(\mathbf{r}, t) = -\nabla_{\mathbf{r}} \mathbf{J} \quad \mathbf{J} = -\nabla_{\mathbf{r}} \frac{\delta \mathcal{F}[\varphi]}{\delta \varphi(\mathbf{r}, t)} - \vec{\zeta}(\mathbf{r}, t) \quad (9.26)$$

where the Landau free energy $\mathcal{F}[\varphi]$ is given by Eqs. (9.2) and (9.6) and $\vec{\zeta}(\mathbf{r}, t)$ is a random Gaussian vector noise with the isotropic correlation function

$$\langle \zeta^\mu(\mathbf{r}, t) \zeta^\nu(\mathbf{r}', t') \rangle = 2T \delta^{\mu\nu} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t'), \quad (9.27)$$

where $\mu, \nu = x, y, z$. This is model B. Its MSR action in the Hamiltonian notation takes the form $S[\varphi, \pi] = \int dt \left(\int d\mathbf{r} \pi \partial_t \varphi - \mathcal{H}[\pi, \varphi] \right)$, where the Hamiltonian (upon integration by parts) is

$$\mathcal{H}[\pi, \varphi] = \int d\mathbf{r} \left[-(\nabla_{\mathbf{r}} \pi) \cdot \nabla_{\mathbf{r}} \frac{\delta \mathcal{F}[\varphi]}{\delta \varphi(\mathbf{r}, t)} + T (\nabla_{\mathbf{r}} \pi)^2 \right] \quad (9.28)$$

Again there are two $\mathcal{H} = 0$ solutions of the stationary field equations: noiseless relaxation $\pi = 0$, while $\partial_t \varphi = \nabla_{\mathbf{r}}^2 (\delta \mathcal{F} / \delta \varphi)$, and the activation trajectory $\pi = (\delta \mathcal{F} / \delta \varphi) / T$, while $\partial_t \varphi = -\nabla_{\mathbf{r}}^2 (\delta \mathcal{F} / \delta \varphi)$. The last equation, which is an immediate consequence of the equation of motion for φ , shows that activation trajectories are time-reversed copies of the relaxational ones. The action on the activation trajectory, leading to a configuration $\varphi_0(\mathbf{r})$, is

$$S = \int dt d\mathbf{r} \pi \partial_t \varphi = \frac{1}{T} \int dt d\mathbf{r} (\delta \mathcal{F} / \delta \varphi) \partial_t \varphi = \frac{1}{T} \int^{\varphi_0} dt \partial_t \mathcal{F}[\varphi] = \frac{\mathcal{F}[\varphi_0]}{T}$$

This shows that in the long-time limit model B obeys the same equilibrium statistical mechanics, Eq. (9.10), as model A. It implies, in particular, that the static critical exponents, for example, ν , are the same as in model A. The dynamics, however, is different and so is the dynamic critical exponent z .

To develop an RG treatment of model B we employ the potential in the form (9.6), restore the friction coefficient γ , and write the MSR action as

$$S = \int d\mathbf{r} dt \left[\gamma \pi \partial_t \varphi + (\nabla_{\mathbf{r}}^2 \pi) (D (\nabla_{\mathbf{r}}^2 \varphi) - \delta \varphi - g \varphi^3) - \gamma T (\nabla_{\mathbf{r}} \pi)^2 \right] \quad (9.29)$$

Neglecting the nonlinear vertex $g (\nabla_{\mathbf{r}}^2 \pi) \varphi^3$, one finds the Gaussian response and correlation functions (cf. Eqs. (9.17))

$$\int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' dt e^{i(\omega t - \mathbf{q} \cdot \mathbf{r})} \langle \pi(\mathbf{r}, t) \varphi(\mathbf{0}, 0) \rangle = \frac{1}{i\gamma\omega + D\mathbf{q}^4 + \delta\mathbf{q}^2} \quad (9.30a)$$

$$\int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' dt e^{i(\omega t - \mathbf{q} \cdot \mathbf{r})} \langle \varphi(\mathbf{r}, t) \varphi(\mathbf{0}, 0) \rangle = \frac{2\gamma T \mathbf{q}^2}{(\gamma\omega)^2 + (D\mathbf{q}^4 + \delta\mathbf{q}^2)^2} \quad (9.30b)$$

and, of course, $\langle \pi \pi \rangle = 0$. Integrating Eq. (9.30b) over the frequency ω , one finds that the static correlation function $\langle \varphi(\mathbf{r}, 0) \varphi(\mathbf{0}, 0) \rangle$ coincides with that of model A, Eq. (9.18), and agrees with the equilibrium statistical mechanics, Eq. (9.10). We then split the fields φ and π into slow and fast components, rescale the action, and integrate out the fast fields in the one-loop approximation; see Section 9.4.

Two nonlinear vertices contribute to this calculation: (i) $-3g (\nabla_{\mathbf{r}}^2 \pi_s) \varphi_s \varphi_f^2$ and (ii) $-3g (\nabla_{\mathbf{r}}^2 \pi_f) \varphi_f \varphi_s^2$. The diagram of Fig. 9.4(a) includes only the static (equal time) correlation function (9.18) and thus is exactly the same in models A and B. The diagram of Fig. 9.4(b) acquires an additional factor $\mathbf{q}_f^2$, coming from the vertex (ii). It compensates for the

corresponding factor in the denominator, leading again to the same result as in model A, Eq. (9.23). The RG equations acquire the form (cf. Eq. (9.24))

$$\begin{aligned}\partial_l \gamma &= (d + \tilde{\chi} + \chi) \gamma, & \partial_l D &= (d + z - 4 + \tilde{\chi} + \chi) D \\ \partial_l (\gamma T) &= (d + z - 2 + 2\tilde{\chi}) \gamma T, & \partial_l \delta &= (d + z - 2 + \tilde{\chi} + \chi - 3gK_d) \delta, \\ \partial_l g &= (d + z - 2 + \tilde{\chi} + 3\chi - 9gK_d) g.\end{aligned}$$

Notice that the bare scaling dimensions of D , γT , δ , and g are two less than those in model A. This is due to the presence of additional gradients in the action (9.29). The rest of the calculation follows the same steps as after Eq. (9.24), and the only difference in the results is that $z = 4$ for $d \geq 4$ and $z = 4 + O(\epsilon^2)$ for $d < 4$. The former statement may be already recognized from the Gaussian correlators (9.30). Notice also that a small perturbation, violating the conservation law, for example, a term in the action $\propto \pi\varphi$, acquires the bare scaling dimension $d + z + \tilde{\chi} + \chi = 4$ and is strongly relevant. Therefore, such a perturbation grows fast upon renormalization, eventually bringing the system into the universality class of model A.

Other Hohenberg-Halperin universality classes are associated with the order parameter φ being coupled to one or more conserved fields, that is, hydrodynamic modes. For example, a non-conserved order parameter of model A may be coupled to a conserved scalar density $\varrho(\mathbf{r}, t)$ of, say, annealed mobile impurities. The dynamics of the latter is governed by the conserved Langevin equation:

$$\begin{aligned}\partial_t \varphi(\mathbf{r}, t) &= -\frac{\delta \mathcal{F}[\varphi, \varrho]}{\delta \varphi(\mathbf{r}, t)} + \xi(\mathbf{r}, t), & \partial_t \varrho(\mathbf{r}, t) &= \nabla_{\mathbf{r}} \left[\nabla_{\mathbf{r}} \frac{\delta \mathcal{F}[\varphi, \varrho]}{\delta \varrho(\mathbf{r}, t)} + \vec{\zeta}(\mathbf{r}, t) \right] \\ \mathcal{F}[\varphi, \varrho] &= \int d\mathbf{r} \left[\frac{D}{2} (\nabla_{\mathbf{r}} \varphi)^2 + V(\varphi) + \frac{A}{2} \varphi^2 \varrho + \frac{C}{2} \varrho^2 \right]\end{aligned}\quad (9.31)$$

where the noise correlators are given by Eqs. (9.3) and (9.27). This is model C. One can introduce now two auxiliary MSR fields φ^a and ϱ^a , or in the Hamiltonian notations $\pi = 2i\varphi^a$ and $\rho = 2i\varrho^a$, to write the action in the form $S = \int dt \left[\int d\mathbf{r} (\pi \partial_t \varphi + \rho \partial_t \varrho) - \mathcal{H} \right]$, where the Hamiltonian is

$$\mathcal{H}[\pi, \varphi; \rho, \varrho] = \int d\mathbf{r} \left[-\pi \frac{\delta \mathcal{F}[\varphi, \varrho]}{\delta \varphi(\mathbf{r}, t)} - (\nabla_{\mathbf{r}} \rho) \cdot \nabla_{\mathbf{r}} \frac{\delta \mathcal{F}[\varphi, \varrho]}{\delta \varrho(\mathbf{r}, t)} + T \pi^2 + T (\nabla_{\mathbf{r}} \rho)^2 \right]$$

Investigating $\mathcal{H} = 0$ equations of motion, one may show that the long-time probability of finding a field configuration $\varphi_0(\mathbf{r})$, $\varrho_0(\mathbf{r})$ is $\mathcal{P} = Z^{-1} e^{-\mathcal{F}[\varphi_0, \varrho_0]/T}$, where the equilibrium partition function is $Z = \int \mathbf{D}[\varphi, \varrho] e^{-\mathcal{F}[\varphi, \varrho]/T}$. The fact that ϱ is conserved does not show up in this limit. One may perform Gaussian integration over $\varrho(\mathbf{r})$, which only leads to the renormalization of the quartic coupling constant $g \rightarrow g - A^2/C$ in the potential $V(\varphi)$. Therefore the static critical exponents of the field φ are the same as in model A. The Gaussian integration over the fields $\varrho(\mathbf{r}, t)$ and $\rho(\mathbf{r}, t)$ can be done, in principle, in the dynamic action as well. However, it generates an essentially nonlocal interaction vertex $(\pi\varphi)_{-\mathbf{q}, -\omega} [A^2 \mathbf{q}^2 / (i\omega - C \mathbf{q}^2)] (\varphi^2)_{\mathbf{q}, \omega}$, which reflects the conserved nature of the field ϱ . It is therefore better to work with the local dynamic action, which depends on four fields, and perform the perturbative RG procedure in it. We shall not go into its details here, but only mention that the dynamic critical exponent in $d < 4$ turns out to be $z = 2 + \epsilon/3$, [145], different from models A and B.

12.4.6 9.6 Quantum Phase Transitions

So far we have been discussing classical phase transitions, based on the action (9.5) and its generalizations. The latter is a limiting case of the quantum dissipative action (3.20), where all

involved frequencies are much less than the critical temperature, $\epsilon \ll T_c$. If this is indeed the case, one may approximate $\coth(\epsilon/2T) \approx 2T/\epsilon$ in Eq. (3.18), leading to the classical time-local term $4i\gamma T \int dt [X^a(t)]^2$ in Eq. (3.15). Being generalized to the spatially extended case, the latter leads to the $4i\gamma T \int dt d\mathbf{r} [\varphi^a(\mathbf{r}, t)]^2$ fluctuation term in the action (9.5). As discussed in Section 9.4, the vicinity of the second-order phase transition is characterized by the divergent time scale $\tau \propto |\delta|^{-\nu_z}$. The corresponding characteristic frequency goes to zero as $\epsilon \propto |\delta|^{\nu_z}$ and is bound to become less than T_c sufficiently close to the transition, if T_c is finite.

Here we discuss a special case when, by tuning some external parameter (e.g. pressure or magnetic field), the critical temperature is tuned to be exactly zero, $T_c = 0$. Formally, this situation is equivalent to a quantum string (or membrane) placed in a potential, for example, as depicted in Fig. 9.1. Since $T = 0$, the string can't cross the barrier by thermal activation, but rather has to do it via quantum tunneling. The dynamics of such tunneling is assumed to be overdamped by a coupling to an external bosonic Ohmic bath.⁷ It is indeed often the case close to the phase transition (i.e. bifurcation point of the potential), as discussed in Section 3.4. The corresponding damping kernel $2i\gamma\epsilon \coth(\epsilon/2T) \rightarrow 2i\gamma|\epsilon|$ is a nonlocal function

of time, given by the $T \rightarrow 0$ limit of the last term in Eq. (3.20). The corresponding quantum dissipative action takes the form (cf. Eq. (9.5))

$$S[\varphi, \varphi^a] = -2 \int dt d\mathbf{r} \left[\varphi^a (\gamma \partial_t - D \nabla_{\mathbf{r}}^2 + \delta) \varphi + g \varphi^a \varphi^3 + g (\varphi^a)^3 \varphi \right] + \frac{i\gamma}{\pi} \iint d\mathbf{r} \frac{dt dt'}{(t - t')^2} [\varphi^a(\mathbf{r}, t) - \varphi^a(\mathbf{r}, t')]^2 \quad (9.32)$$

We again took $V(\varphi) = \delta\varphi^2/2 + g\varphi^4/4$ as a potential and, in accordance with Eq. (3.20), calculated $V(\varphi + \varphi^a) - V(\varphi - \varphi^a)$. Since we are dealing with the quantum problem, there is no reason to omit $(\varphi^a)^3 \varphi$, as was done in the classical setting following Section 4.1. The Gaussian propagators of this action are given by Eqs. (9.17) with the substitutions $\omega \rightarrow \gamma\omega$ and, in the numerator of Eq. (9.17c), $2T \rightarrow \gamma|\omega|$.

One can now split the fields into slow and fast components and rescale the space, time, and slow fields in accordance with Eq. (9.20). The coupling constants acquire bare scaling dimensions given by Eqs. (9.21), with the exception that there is no separate scaling for γT . Instead, the last term in Eq. (9.32) implies that $\gamma' = b^{d+2} \tilde{\chi} \gamma$. Comparing it with the first of Eqs. (9.21), one concludes that the quantum and classical components of the field scale in the same way, $\tilde{\chi} = \chi$. This is in accord with the expectation that both terms $\varphi^a \varphi^3$ and $(\varphi^a)^3 \varphi$ should be kept in the quantum problem. Demanding that the quadratic critical action is invariant under the scale transformation, that is, that γ and D are not renormalized, one finds $z = 2$ and $\chi = \tilde{\chi} = -d/2$. Then the bare scaling dimension of the critical parameter δ is $[\delta] = 2$, in agreement with the classical case. However, the scaling dimension of the nonlinear coupling g is very different: $[g] = 2 - d$, instead of $4 - d$ in the classical case. In other words, instead of $d_c = 4$, we find $d_c + z = 4$. Effectively quantum mechanics adds z additional spatial dimensions!

For $d > 2$ the nonlinearity is irrelevant and the Gaussian critical exponents, for example, $\nu = 1/2$ and $z = 2$, are exact. This is true not only at $T = 0$, but also for $T > 0$ in a certain range of the critical parameter δ , away from the immediate vicinity of the $T > 0$ classical transition, [146]; see Fig. 9.5. In the latter case the temperature provides a scale for the frequency and momentum arguments of the correlation functions, that is, the latter depend on ω/T and Dq^2/T . For $d \leq 2$ there are corrections to the Gaussian exponents, which one may

⁰⁷ In Section 10.8 we discuss the "bath" originating from fermions, which makes the problem considerably more complicated.

access with the $\epsilon = 2 - d$ expansion. The corresponding diagrams for the one-loop corrections to δ and g^8 are plotted in Fig. 9.4. The calculations follow Eqs. (9.22) and (9.23)

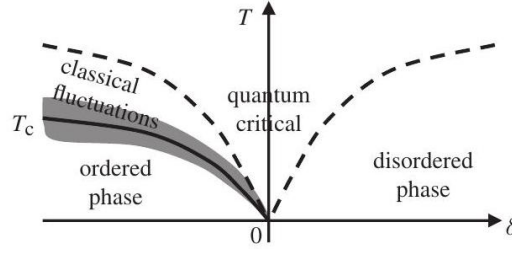


Figure 9.5 Possible phase diagram: critical temperature T_c versus a tuning parameter δ . The quantum phase transition takes place at the point where $T_c(\delta) = 0$. The shaded region is the Ginzburg regime where the classical scaling deviates from the mean field, if $d < d_c$. The left dashed line indicates a crossover between quantum critical and Gaussian regimes in the case $d + z < d_c$. The right dashed line $T \propto \delta^{vz}$ is a crossover between the quantum critical regime, where the correlation time is $\tau \sim T^{-1}$, and the disordered phase, where the correlation time is $\tau \propto |\delta|^{-vz}$.

with the substitution $2T \rightarrow \gamma|\omega|$ in the $D_0^K(\mathbf{q}, \omega)$ Green function. This shifts the logarithmic dimension of the loops from $d = 4$ to $d = 2$, but does not change the relative factor between the two diagrams of Fig. 9.4. As a result, the two nontrivial RG equations (9.25) preserve their form:

$$\partial_l \delta = (2 - 3g\tilde{K}_d) \delta, \quad \partial_l g = (\epsilon - 9g\tilde{K}_d) g \quad (9.33)$$

where, however, $\epsilon = 2 - d$ and $\tilde{K}_d = (\pi)^{-1} \partial_l \int_{\Lambda}^{\Lambda(1+l)} d\mathbf{q}_f / [(2\pi)^d D\mathbf{q}_f^2]$. If $d < 2$ the second equation predicts the stable fixed point $g^* = \epsilon / (9\tilde{K}_2)$, where the critical parameter scales as $\partial_l \delta = (2 - \epsilon/3)\delta$. As a result, one finds in the ϵ -expansion for the correlation length critical exponent $v = (2 - \epsilon/3)^{-1} \approx 1/2 + \epsilon/12$, while the correlation time exponent is $vz = 1 + \epsilon/6$.

This non-Gaussian critical behavior is expected to persist for $T > 0$ and a certain range of the critical parameter δ around zero, known as a quantum critical region [146]. In this regime the (inverse) temperature serves as the only correlation time scale, $\tau \sim T^{-1}$. Due to the critical scaling the spatial correlation length must be $\xi \propto T^{-1/z}$. As a result, for example, the $\langle \varphi \varphi \rangle$ correlation function (cf. Eq. (9.17c)) is expected to have the form

$$D^K(\mathbf{q}, \omega, T) = \frac{1}{T} \Phi \left(\frac{cq}{T^{1/z}}, \frac{\omega}{T} \right), \quad (9.34)$$

where Φ is a universal scaling function of the two arguments and c is a cutoff-dependent constant. The factor $1/T$ in front simply takes care of the overall dimensionality of the correlation function; compare Eq. (9.17c). Of course, if $|\delta|$ is so large that the critical correlation length $|\delta|^{-v}$ is shorter than $T^{-1/z}$, the universal scaling (9.34) breaks down. This dictates the boundaries of the quantum critical region as $T \gtrsim |\delta|^{vz}$, Fig. 9.5.

An interesting particular case that demonstrates eventual failure of the ϵ -expansion at large enough ϵ is $d = 0$, that is, $\epsilon = 2$. It describes a dissipative quantum mechanics of a point particle in a symmetric double-well potential. As was first shown by Schmid and Bulgadaev [39, 147, 148], there is a $T = 0$ phase transition between the delocalized and localized states as a function of, for example, the barrier height δ . The transition appears to be of the Berezinskii-Kosterlitz-Thouless (BKT) universality class [9], known from the classical $d = 2$ XY model.

⁰⁸ The diagram of Fig. 9.4(b) renormalizes the coefficient of $\varphi^q \varphi^3$. The renormalization of the coefficient of $(\varphi^q)^3 \varphi$ is provided by the same loop (with three dashed and one full legs). Therefore if initially these two constants are the same, the (one-loop) renormalization preserves their equality. Notice that a $(\varphi^q)^2 \varphi^2$ term with the same scaling dimension as g is also generated.

This supports the assertion that a d -dimensional quantum model may be mapped onto a $d + z$ -dimensional classical one. On the other hand, the ϵ -expansion fails to describe critical scaling near the BKT transition. For example, in the latter case the correlation length (i.e. correlation time of the dissipative quantum problem) is known to diverge exponentially $\propto e^{b/\sqrt{|\delta-\delta_c|}}$ and not as a power-law as expected from the ϵ -expansion.

12.4.7 9.7 Absorbing State Transitions

The Hohenberg-Halperin classification deals only with the models based on the Landau free energy $\mathcal{F}[\varphi, \dots]$. In the long-time limit such models approach thermodynamic equilibrium, described by the equilibrium statistical mechanics, Eq. (9.10). On the other hand, one may consider essentially non-equilibrium models, which do not approach thermal equilibrium. A big class of such systems is based on reaction models without detailed balance, which may undergo transitions into the absorbing state. Their zero-dimensional versions are discussed in Section 4.11. We put them now onto a d -dimensional lattice and allow for the random walk of agents on such a lattice. A state of the system may be described by $\mathcal{P}(n_1, n_2, \dots, t)$, which is a probability of finding an integer n_j number of agents on the lattice site j at time t . The part of the Master equation that describes the random walk takes the form, for example, in $d = 1$,

$$\begin{aligned} \partial_t \mathcal{P}([n_j], t) &= \sum_j D [(n_{j-1} + 1) \mathcal{P}(\dots, n_{j-1} + 1, n_j - 1, \dots, t) \\ &\quad - 2n_j \mathcal{P}(\dots, n_{j-1}, n_j, n_{j+1}, \dots, t) \\ &\quad + (n_{j+1} + 1) \mathcal{P}(\dots, n_j - 1, n_{j+1} + 1, \dots, t)] \\ &= \sum_j D (e^{\hat{p}_j} e^{-\hat{p}_{j-1}} n_{j-1} - 2n_j + e^{\hat{p}_j} e^{-\hat{p}_{j+1}} n_{j+1}) \mathcal{P}([n_j], t), \end{aligned} \quad (9.35)$$

where D is the rate of random hops between neighboring sites and, following Section 4.11, we have defined operators $\hat{p}_j = -\partial/\partial n_j$. As a result, the full Master equation may be written as $\partial_t \mathcal{P} = \hat{\mathcal{H}}[\hat{p}, n] \mathcal{P}$, where the Hamiltonian operator $\hat{\mathcal{H}}$ is

$$\hat{\mathcal{H}}[\hat{p}, n] = \sum_j [D (e^{\hat{p}_j} e^{-\hat{p}_{j-1}} n_{j-1} - 2n_j + e^{\hat{p}_j} e^{-\hat{p}_{j+1}} n_{j+1}) + H(\hat{p}_j, n_j)], \quad (9.36)$$

where $H(\hat{p}_j, n_j)$ is the on-site reaction Hamiltonian (4.78).

To avoid exponentials of the operators, it is convenient to perform the local ColeHopf canonical operator transformation

$$\hat{\pi} = e^{\hat{p}}, \quad \hat{\varphi} = e^{-\hat{p}} n, \quad [\hat{\varphi}, \hat{\pi}] = 1 \quad (9.37)$$

The random walk part of the Hamiltonian (9.36) takes the much simpler form $\sum_j D \hat{\pi}_j (\hat{\varphi}_{j-1} - 2\hat{\varphi}_j + \hat{\varphi}_{j+1}) = \int d\mathbf{r} D \hat{\pi}(\mathbf{r}) \nabla_{\mathbf{r}}^2 \hat{\varphi}(\mathbf{r})$, where we have switched to continuous notation. To transform the local reaction Hamiltonian (4.78) consider, for example, the reaction $kA \xrightarrow{\lambda} (k+r)A$. The corresponding reaction rates are proportional to the number of ways to select k agents, which enter the reaction, out of n , that is, $W_{n \rightarrow n+r} = \lambda n(n-1) \dots (n-k+1)/k! = \lambda \hat{\pi}^k \hat{\varphi}^k / k!$. As a result, the corresponding reaction Hamiltonian (4.78) takes the form

$$kA \xrightarrow{\lambda_{kr}} (k+r)A; \quad \hat{H}_{kr}(\hat{\pi}, \hat{\varphi}) = \frac{\lambda_{kr}}{k!} (\hat{\pi}^{r+k} - \hat{\pi}^k) \hat{\varphi}^k. \quad (9.38)$$

The total reaction Hamiltonian is $H(\hat{\pi}, \hat{\varphi}) = \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{r=-k}^{\infty} H_{kr}(\hat{\pi}, \hat{\varphi})$. For example, the reaction set (4.76) leads to the following Cole-Hopf transformed Hamiltonian (cf. Eq. (4.81)):

$$H(\hat{\pi}, \hat{\varphi}) = \frac{\lambda}{2} (1 - \hat{\pi}^2) \hat{\varphi}^2 + \mu(1 - \hat{\pi})\hat{\varphi} + \sigma (\hat{\pi}^2 - \hat{\pi}) \hat{\varphi} \quad (9.39)$$

Notice that since $\hat{\pi} = e^{\hat{\varphi}}$, the fundamental normalization $H(p, n)|_{p=0} = 0$, Eq. (4.24), now reads as $H(\pi, \varphi)|_{\pi=1} = 0$. Notice also that the corresponding classical equation of motion $\partial_t \varphi = \partial_\pi H(\pi, \varphi)|_{\pi=1}$ is the same as the mean-field rate equation (4.80), if $\varphi = n \gg k$.

A convenient representation of the Cole-Hopf operator formalism is achieved with the help of the generating function, defined as

$$\mathcal{G}(\pi, t) = \sum_{n=0}^{\infty} \pi^n \mathcal{P}(n, t); \quad \partial_t \mathcal{G}(\pi, t) = \hat{H}(\pi, \hat{\varphi}) \mathcal{G}(\pi, t) \quad (9.40)$$

Here π is a real (or complex) number, while $\hat{\varphi} = \partial_\pi$, in agreement with the commutation relation (9.37). The equation of motion (9.40) for the generating function $\mathcal{G}(\pi, t)$ is an immediate consequence of its definition and the Master equation for the probability $\mathcal{P}(n, t)$.¹⁰ Notice that due to the conservation of probability

$\mathcal{G}(1, t) = 1$, and thus the condition $H(1, \varphi) = 0$ simply reflects the fact that $\mathcal{G}(1, t)$ is conserved.

Employing now the coherent state representation for the canonical pair π and $\hat{\varphi}$ along with the fact that the Hamiltonian is normally ordered, one may write the evolution operator for the generating function in the form of a functional integral over the set of fields $\pi_j(t)$ and $\varphi_j(t)$; compare Eq. (4.79), where j is the lattice index. The corresponding action in the continuous notations acquires the form¹¹

$$S[\varphi, \pi] = \int dt d\mathbf{r} [\pi \partial_t \varphi - D\pi \nabla_{\mathbf{r}}^2 \varphi - H(\pi, \varphi)] \quad (9.41)$$

where the local reaction Hamiltonian function $H(\pi(\mathbf{r}, t), \varphi(\mathbf{r}, t))$ is given by Eqs. (9.38) or, for example, (9.39). Despite close similarities with the action (9.19), the physical consequences of the action (9.41) are dramatically different. The formal reason for these differences is that the Hamiltonian $H(\pi, \varphi)$ does not have the structure $-\pi V'(\varphi) + T\pi^2$ and thus there is no Landau free energy $\mathcal{F}[\varphi]$ underlying the action (9.41). As a result, the system does not equilibrate to the static state described by the equilibrium statistical mechanics (9.10). The phase transitions are still possible, but their universality classes are different from those in the Hohenberg-Halperin classification.

If no agents are created from the empty state, that is, $k \neq 0$ in Eq. (9.38), the zero-dimensional models of Section 4.11 go to extinction in the long-time limit. If they are put on an infinite lattice, their behavior becomes more interesting. Depending on the parameters, the lattice sites may either go extinct as in $d = 0$, or maintain a fluctuating, but nonzero on average, population. In the latter case the extinct sites are repopulated by agents diffusing from neighboring non-empty sites. The transition between the two scenarios exhibits all the phenomenology of the dynamic second-order phase transitions. In particular, close to the transition there is a divergent correlation length $\xi \propto |\delta|^{-\nu}$ and divergent correlation time $\tau \propto |\delta|^{-\nu z}$, where δ is a critical parameter passing through zero at the transition point. In the active phase the average on-site population scales as $\langle n \rangle \propto \delta^\beta$. The set of critical exponents ν, z, β , and so on is remarkably universal and depends only on a few internal

⁰⁹ Employing the commutation relation (9.37), one finds, e.g. $\hat{\pi}^3 \hat{\varphi}^3 = e^{-3\partial_n} e^{\partial_n} n e^{\partial_n} n e^{\partial_n} n = e^{-2\partial_n} n e^{\partial_n} n(n+1)e^{\partial_n} = e^{-2\partial_n} n(n+1)(n+2)e^{2\partial_n} = (n-2)(n-1)n$.

¹⁰ Consider, e.g. reaction $A \xrightarrow{\mu} \emptyset$. The Master equation for the probability distribution is given by $\partial_t \mathcal{P}(n, t) = \mu(n+1)\mathcal{P}(n+1, t) - \mu n \mathcal{P}(n, t)$. Multiplying both sides by π^n and summing over n , one finds

$$\partial_t \mathcal{G}(\pi, t) = \mu \partial_\pi \mathcal{G}(\pi, t) - \mu \pi \partial_\pi \mathcal{G}(\pi, t) = \mu(1 - \pi) \partial_\pi \mathcal{G}(\pi, t) = \mu(1 - \pi) \hat{\varphi} \mathcal{G}(\pi, t), \text{ in agreement with } (9.38)$$

11 Another representation of the same operators is the Doi-Peliti formalism [149]. By analogy with quantum mechanics let us denote the state of the system with n agents as $|n\rangle$ and introduce creation/annihilation operators that act as $\hat{a}^\dagger |n\rangle = |n+1\rangle$ and $\hat{a} |n\rangle = n |n-1\rangle$ and thus obey the commutation relation $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$. A generic state of the system, defined as $|\Psi(t)\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \mathcal{P}(n, t) |n\rangle$, obeys the imaginary time "Schrödinger" equation $\partial_t |\Psi(t)\rangle = \hat{H}(\hat{a}^\dagger, \hat{a}) |\Psi(t)\rangle$, where the Hamiltonian may be derived from the Master equation. For example, for the simplest reaction $A \xrightarrow{\mu} \emptyset$, $\hat{H}(\hat{a}^\dagger, \hat{a}) = \mu \hat{a} - \mu \hat{a}^\dagger \hat{a} = \mu(1 - \hat{a}^\dagger) \hat{a}$; indeed, $\hat{a} |\Psi(t)\rangle = \sum_n (n+1) \mathcal{P}(n+1, t) |n\rangle$, while $\hat{a}^\dagger \hat{a} |\Psi(t)\rangle = \sum_n n \mathcal{P}(n, t) |n\rangle$. Comparing it with Eq. (9.38), one concludes that $\hat{a}^\dagger = \hat{\pi}$ and $\hat{a} = \hat{\varphi}$, which may be verified for an arbitrary reaction. Therefore the resulting coherent state action is the same as Eq. (9.41).

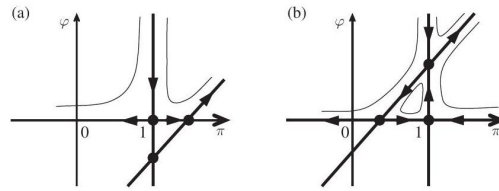


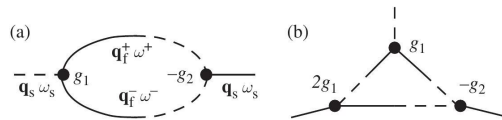
Figure 9.6 Phase portraits of the DP universality class: (a) empty state $\delta < 0$; (b) active state $\delta > 0$. At the transition all three zero-energy lines intersect at the same point $(1, 0)$. Notice the opposite sign convention of the critical parameter in comparison with Fig. 9.3. Indeed, here the "magnetic" state corresponds to $\delta > 0$.

symmetries of the model. In what follows we consider some of the universality classes and their geometric interpretation.

12.4.8 9.7.0.1 Directed Percolation

Consider a lattice version of the reaction model specified by Eq. (4.76). The corresponding action is given by Eqs. (9.41) and (9.39). Unlike the equilibrium models considered previously, here there is no potential function $V(\varphi)$ that bifurcates into two symmetric minima at the transition point. Nevertheless, the Hamiltonian function $H(\pi, \varphi)$ does exist and the phase transition may be associated with a qualitative rearrangement of its phase portrait; see Fig. 9.3 for the equilibrium case. As depicted in Fig. 4.4, the set of zero energy lines forms a triangle close to the bifurcation point.¹² One can thus identify the phase transition as the rearrangement of such a triangle, Fig. 9.6. The corresponding universality class is known as directed percolation (DP). Its geometric image is associated with Fig. 9.6, in the same way as the model A (i.e. dynamic Ising model) universality class is associated with Fig. 9.3.

To proceed with the RG description one needs to specify the simplest Hamiltonian $H(\pi, \varphi)$ that exhibits the rearrangement of its zero energy lines as a function of the critical parameter δ according to Fig. 9.6. As discussed in Section 4.11, such a universal Hamiltonian is given by Eq. (4.83). In (π, φ) variables it takes the form $H(\pi, \varphi) = (\pi - 1)(\delta - g_1 \varphi + g_2(\pi - 1)) \varphi$, where δ is the critical parameter and g_1, g_2 are running constants, whose bare values may be found from the comparison



¹² Figure 4.4 is plotted in the coordinates (p, n) , which are related to (π, φ) , through the area-preserving canonical transformation (9.37). Its qualitative structure is thus the same in (π, φ) coordinates.

Figure 9.7 One-loop renormalization of the propagator (a) and the nonlinear vertex g_1 (b) in the DP model. Full lines represent φ , while dashed lines represent π . The type of vertex is indicated next to the bold dots and $\mathbf{q}_f^\pm = \mathbf{q}_f \pm \mathbf{q}_s/2$; $\omega^\pm = \omega \pm \omega_s/2$. There are combinatorial factors of 2 for diagram (a) and 4 for (b).

with Eq. (9.39). It is convenient to shift the momentum as $\pi - 1 \rightarrow \pi$ and write the resulting Hamiltonian as

$$H(\pi, \varphi) = \pi (\delta - g_1 \varphi + g_2 \pi) \varphi. \quad (9.42)$$

Notice that the kinetic and random walk parts of the action (9.41) are not affected by the shift. The corresponding field theory, known in high-energy physics as the Reggeon field theory [151], was identified as the proper representation of DP by Janssen, Grassberger [152], and Cardy [155]. Its Gaussian propagators $\langle \pi \varphi \rangle$ are given by Eqs. (9.17a,b), where $\varphi^q = \pi/(2i)$. As in any non-equilibrium theory $\langle \pi \pi \rangle = 0$, which may be traced back to the conservation of probability, that is, $H(0, \varphi) = 0$ (after the shift). The peculiarity of reaction-diffusion models with the absorbing state is that $\langle \varphi \varphi \rangle = 0$ (there is no FDT!). This property originates from the fact that $H(\pi, 0) = 0$, due to the absence of creation from the empty state (cf. Eq. (9.38)), and therefore no terms $\propto \pi^2 \varphi^0$ are allowed. This latter property appears to be intact in the process of renormalization. There are two nonlinear three-leg vertices $g_1 \pi \varphi^2$ and $-g_2 \pi^2 \varphi$, which renormalize both the propagators and the coupling constants g_1 and g_2 .

The RG proceeds along the same lines as outlined in Section 9.4. The bare scaling of γ (i.e. constant in front of $\pi \partial_t \varphi$), D , and δ is the same as in Eq. (9.21), while the bare scaling of the nonlinear vertices is

$$g'_1 = b^{d+z+\tilde{\chi}+2\chi} g_1, \quad g'_2 = b^{d+z+2\tilde{\chi}+\chi} g_2.$$

Splitting the fields into slow and fast components gives rise to the following interaction vertices: (i) $g_1 \pi_s \varphi_f^2$; (ii) $2g_1 \pi_f \varphi_f \varphi_s$; (iii) $-g_2 \pi_f^2 \varphi_s$; and (iv) $-2g_2 \pi_s \pi_f \varphi_f$. Expanding e^{-S} in a power series in these vertices and performing Gaussian integrations over the fast fields with the help of Eqs. (9.17a,b), one finds the perturbative RG corrections. The one-loop renormalization of the propagator originates from

(i) $\times$ (iii) combination of vertices.¹³ The corresponding diagram is plotted in Fig. 9.7(a) and is given by

$$\begin{aligned} 8g_1 g_2 \int \frac{d\mathbf{q}_f d\omega}{(2\pi)^{d+1}} D_0^R(\mathbf{q}_f^+, \omega^+) D_0^A(\mathbf{q}_f^-, \omega^-) &= \frac{g_1 g_2}{\gamma} \int_{\Lambda}^{b\Lambda} \frac{d\mathbf{q}_f}{(2\pi)^d} \frac{1}{D\mathbf{q}_f^2 + \delta + \frac{D\mathbf{q}_s^2}{4} - \frac{i\gamma\omega_s}{2}} \\ &\approx \frac{g_1 g_2}{\gamma} \int_{\Lambda}^{b\Lambda} \frac{d\mathbf{q}_f}{(2\pi)^d} \frac{1}{D\mathbf{q}_f^2} - \left(\delta + \frac{D\mathbf{q}_s^2}{4} - \frac{i\gamma\omega_s}{2} \right) \frac{g_1 g_2}{\gamma} \int_{\Lambda}^{b\Lambda} \frac{d\mathbf{q}_f}{(2\pi)^d} \frac{1}{(D\mathbf{q}_f^2)^2} \end{aligned} \quad (9.43)$$

where $\mathbf{q}_f^\pm = \mathbf{q}_f \pm \mathbf{q}_s/2$; $\omega^\pm = \omega \pm \omega_s/2$ and $\mathbf{q}_s, \omega_s$ are the external slow momentum and frequency. They should be understood as $\mathbf{q}_s^2 \pi_s \varphi_s \rightarrow -\pi_s \nabla_{\mathbf{r}}^2 \varphi_s$ and $-i\omega_s \pi_s \varphi_s \rightarrow \pi_s \partial_t \varphi_s$. As a result, the last term on the right-hand side provides the one-loop renormalization of the running constants δ, D , and γ , respectively. The first δ -independent term on the right-hand side results in a shift of the critical point away from $\delta = 0$ and thus may be neglected.

The renormalization of the nonlinear coupling constant g_1 comes from the (i) $\times$ (ii) $\times$ (iii) combination of vertices.¹⁴ The corresponding diagram is plotted in Fig. 9.7(b) and is given by

$$-64g_1^2 g_2 \int \frac{d\mathbf{q}_f d\omega}{(2\pi)^{d+1}} [D_0^R(\mathbf{q}_f, \omega)]^2 D_0^A(\mathbf{q}_f, \omega) = \frac{2g_1^2 g_2}{\gamma} \int_{\Lambda}^{b\Lambda} \frac{d\mathbf{q}_f}{(2\pi)^d} \frac{1}{(D\mathbf{q}_f^2)^2} \quad (9.44)$$

The renormalization of g_2 comes from the (i) $\times$ (iv) $\times$ (iii) combination and is given by Eq. (9.44) with g_2 and $-g_1$ interchanged. We now put $b = 1 + l$, evaluate the integrals in Eqs.

(9.43), (9.44), exponentiate the result, and combine it with the bare scaling. As a result we find the set of RG equations

$$\begin{aligned}\partial_l \gamma &= \left(d + \tilde{\chi} + \chi - \frac{g_1 g_2}{2} K_d\right) \gamma, & \partial_l D &= \left(d + z - 2 + \tilde{\chi} + \chi - \frac{g_1 g_2}{4} K_d\right) D \\ \partial_l \delta &= (d + z + \tilde{\chi} + \chi - g_1 g_2 K_d) \delta, \\ \partial_l g_1 &= (d + z + \tilde{\chi} + 2\chi - 2g_1 g_2 K_d) g_1, & \partial_l g_2 &= (d + z + 2\tilde{\chi} + \chi - 2g_1 g_2 K_d) g_2,\end{aligned}\tag{9.45}$$

where $K_d = (1/\gamma D^2) \Lambda^{d-4} 2^{1-d} \pi^{-d/2} \Gamma(d/2)$. We can now use the freedom of choosing $\tilde{\chi}, \chi$ along with the scale of time to fix three of these five parameters. It is convenient to fix $\gamma = 1$ and D , that is, the parameters of the Gaussian action at the critical point, along with $\tilde{\chi} = \chi$ to maintain the symmetry of the action between π and φ . This is achieved by demanding that $d + 2\chi - g_1 g_2 K_d/2 = 0$

and $d + z - 2 + 2\chi - g_1 g_2 K_d/4 = 0$, leading to the following scaling dimensions: $z = 2 - g_1 g_2 K_d/4$, and $\tilde{\chi} = \chi = -d/2 + g_1 g_2 K_d/4$. The remaining RG equations are

$$\partial_l \delta = \left(2 - \frac{3}{4} g_1 g_2 K_d\right) \delta, \quad \partial_l g_{1,2} = \left(\frac{\epsilon}{2} - \frac{3}{2} g_1 g_2 K_d\right) g_{1,2}\tag{9.46}$$

where $\epsilon = 4 - d$. For $d < d_c = 4$ one thus finds the nontrivial fixed point, where $g_1^* g_2^* = \epsilon / (3K_d) + O(\epsilon^2)$. In a vicinity of this fixed point the equation for the critical parameter is $\partial_l \delta = (2 - \epsilon/4)\delta$, resulting in the correlation length critical exponent $\nu^{-1} = 2 - \epsilon/4 + O(\epsilon^2)$. We also find the dynamic critical exponent $z = 2 - \epsilon/12 + O(\epsilon^2)$ as well as the exponent $\chi = -d/2 + \epsilon/12 = -2 + 7\epsilon/12 + O(\epsilon^2)$. The order parameter exponent β is defined through $\langle \varphi \rangle \propto |\delta|^\beta$. Because of the scaling $\varphi \rightarrow b^\chi \varphi$ and $b \propto \xi \propto |\delta|^{-\nu}$, one finds $\beta = -\chi\nu = 1 - \epsilon/6 + O(\epsilon^2)$. This set of critical exponents is different from all of the equilibrium Hohenberg-Halperin universality classes.

12.4.9 9.7.0.2 Other Universality Classes of Reaction-Diffusion Models

The triangular structure of the phase portrait, Fig. 9.6, is very robust. Indeed, the two zero-energy lines are fixed: $\pi = 1$ by the conservation of probability and $\varphi = 0$ by the presence of the absorbing empty state. Therefore, changing a single critical parameter, one can adjust the position of only one additional line. As a result, most of the reaction-diffusion models with an absorbing state possess the triangular phase portrait and fall into the DP universality class [152, 156, 157, 158]. Yet there are some exceptions, which are achieved by fixing some additional zero-energy lines, or by increased degeneracy of the $\varphi = 0$ line.

Parity-Conserving Models Consider a set of reactions that all conserve parity of the state, for example, $2A \xrightarrow{2g} \emptyset$ and $A \xrightarrow{\delta} 3A$. Notice that the $d = 0$ model with initially an odd number of agents never goes extinct. A random walk on the lattice violates on-site parity conservation, allowing for an extinction. If $g \gg \delta$ one expects in the long run to find only empty or singly occupied sites. The further decrease of the population is possible only due to diffusion and annihilation of two agents who accidentally meet. This is obviously very different from DP models, where each site may go extinct due to internal reactions only. The corresponding Hamiltonian (9.38) takes the form

⁰¹³ The (ii) $\times$ (iv) combination is proportional to $D_0^R(t) D_0^A(t)$, which is zero due to causality. All other combinations vanish due to $\langle \pi\pi \rangle = \langle \varphi\varphi \rangle = 0$.

¹⁴ The (ii) $\times$ (ii) $\times$ (iv) combination is zero due to causality. All other combinations vanish due to $\langle \pi\pi \rangle = \langle \varphi\varphi \rangle = 0$.

$$H(\pi, \varphi) = g(1 - \pi^2)\varphi^2 + \delta(\pi^3 - \pi)\varphi = (1 - \pi^2)(g\varphi - \delta\pi)\varphi. \quad (9.47)$$

Its phase portrait is depicted in Fig. 9.8(a). Notice that the Hamiltonian and thus the action (9.41) possess the reflection symmetry $\varphi \rightarrow -\varphi$ and $\pi \rightarrow -\pi$, which is generic for any parity-conserving set of reactions. This symmetry is not violated

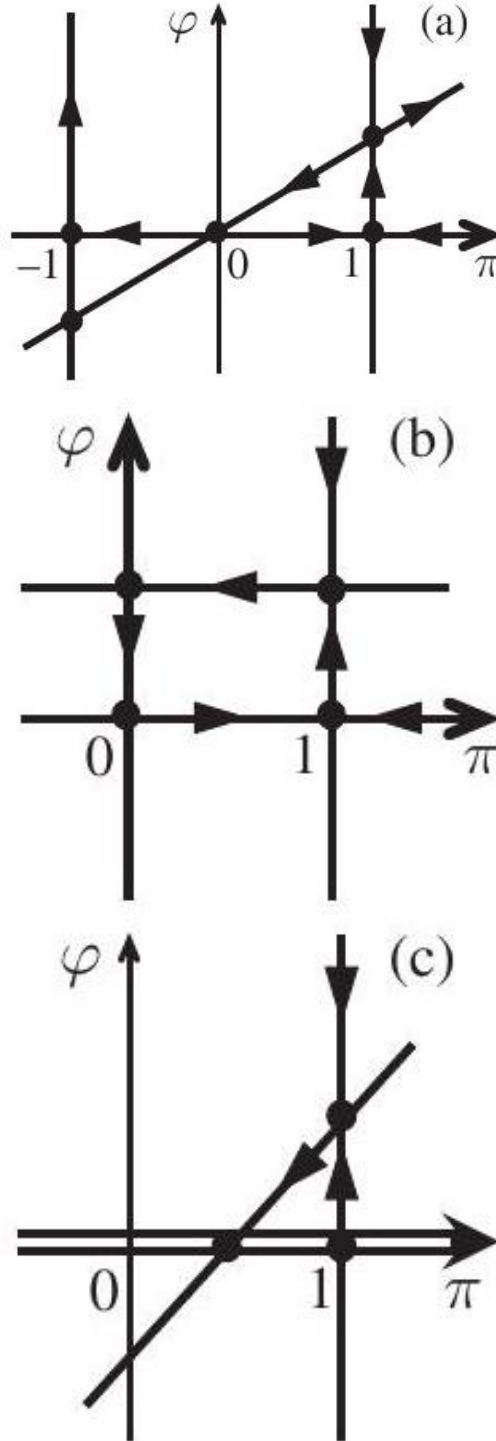


Figure 9.8 Near the transition phase portraits of (a) parity-conserving models; (b) models with non-accessible absorbing state; (c) multi-agent contact processes with $k = 2$. After [159].

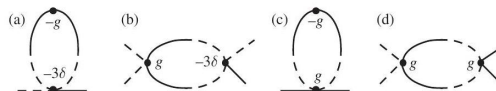


Figure 9.9 One-loop renormalization of the critical parameter δ , (a) or (b); and the nonlinear vertex g , (c) or (d) in the parity-conserving model. All diagrams have a combinatorial factor

of 2.

by the renormalization process. As a result, three zero-energy lines $\pi = \pm 1$ and $\varphi = 0$ are protected, while the fourth line (in our example $\varphi = \delta\pi/g$) must retain its reflection symmetry. Therefore, the Hamiltonian (9.47) is indeed the simplest representative of the parity-conserving class. The phase transition takes place when the line $\varphi = \delta\pi/g$ is approaching the horizontal position, that is, the renormalized $\delta \rightarrow 0$.¹⁵

Turning to the fluctuations, one notices that it is not possible to perform the shift of momentum $\pi - 1 \rightarrow \pi$, as in the DP case, and focus on the immediate vicinity of the $(1, 0)$ point of the phase plane. Because of the reflection symmetry, one has to keep the entire interval $\pi \in [-1, 1]$ under consideration; see Fig. 9.8(a). Therefore, one must choose the scaling dimension of the π -field to be zero, $\tilde{\chi} = 0$. The bare scaling of the constants thus reads

$$\gamma' = b^{d+\chi}\gamma, \quad D' = b^{d+z-2+\chi}D, \quad \delta' = b^{d+z+\chi}\delta, \quad g' = b^{d+z+2\chi}g. \quad (9.48)$$

Splitting the fields into slow and fast components, one obtains a number of vertices, of which only four contribute to the one-loop renormalization: (i) $-3\delta\pi_f^2\pi_s\varphi_s$; (ii) $-g\varphi_f^2$; (iii) $g\pi_f^2\varphi_s^2$; and (iv) $g\pi_s^2\varphi_f^2$. There is no one-loop renormalization of γ and D . The critical parameter δ is renormalized by diagram Fig. 9.9(a) or (b), which are built on (ii) $\times$ (i) and (iv) $\times$ (i) vertices, respectively. The fact that both of them contain the same loop (up to a sign) guarantees that the expression $(1 - \pi^2)$ in the Hamiltonian (9.47) is not renormalized. The running constant g is renormalized

by diagram Fig. 9.9(c) or (d), which are built on (ii) $\times$ (iii) and (iv) $\times$ (iii) vertices, respectively. Again, having the same loop in both of them is crucial to keep $(1 - \pi^2)$ unrenormalized. We fix two of the four constants by demanding that γ and D are not renormalized. This leads to $\chi = -d$ and $z = 2$. The remaining two RG equations are

$$\partial_l \delta = (2 - 3g\tilde{K}_d) \delta, \quad \partial_l g = (\epsilon - g\tilde{K}_d) g \quad (9.49)$$

where $\epsilon = 2 - d$ and $\tilde{K}_d = D\Lambda^2 K_d$. The critical dimension is thus $d_c = 2$. For $d < d_c$ there is a nontrivial fixed point $g^* = \epsilon/\tilde{K}_2$ and in its vicinity $\partial_l \delta = (2 - 3\epsilon)\delta$. We thus find the critical exponents in order ϵ to be $[160]v^{-1} = 2 - 3\epsilon$, $z = 2$, while $\beta = -\nu\chi = (2 - \epsilon)/(2 - 3\epsilon) \approx 1 + \epsilon$.

Models with Non-accessible Absorbing State In the previous example, sites with an odd number of agents were protected from extinction. One can extend this idea to all sites, forbidding any reaction that brings a site into the absorbing state $\emptyset$. (Of course, a site may still become empty due to diffusion out of it.) An example is $2A \xrightarrow{2g} A$ and $A \xrightarrow{\delta} 2A$. The corresponding Hamiltonian (9.38) takes the form

$$H(\pi, \varphi) = g(\pi - \pi^2)\varphi^2 + \delta(\pi^2 - \pi)\varphi = (\pi - \pi^2)(g\varphi - \delta)\varphi. \quad (9.50)$$

Its phase portrait is plotted in Fig. 9.8(b). Notice that $\pi = 0$ is a new line of zero energy. Inspecting the Hamiltonian (9.38), one notices that it is a generic feature of any reaction that has a non-empty final state $k + r \geq 1$. We shall see that this property is intact in the process of renormalization [159, 162]. To keep both the $\pi = 1$ and $\pi = 0$ lines, one must again choose the scaling dimension of π to be zero, $\tilde{\chi} = 0$. The bare scaling of the constants is thus given by Eq. (9.48). Splitting the fields into slow and fast components, one obtains four vertices that contribute to the renormalization: (i) $-\delta\pi_f^2\varphi_s$; (ii) $-g\pi_s\varphi_f^2$; (iii) $g\pi_f^2\varphi_s^2$; and (iv) $g\pi_s^2\varphi_f^2$. The critical parameter δ is renormalized by diagram Fig. 9.10(a) or (b), which are built on the (ii) $\times$ (i) and (iv) $\times$ (i) vertices, respectively. The fact that both of them contain the same loop (up to a sign) guarantees that the expression $(\pi - \pi^2)$ in the Hamiltonian (9.50) is not

¹⁵ Since δ is renormalized the transition point may not coincide with the bare rate of the $A \rightarrow 3A$ reaction being zero [160].

renormalized. The running constant g is renormalized by

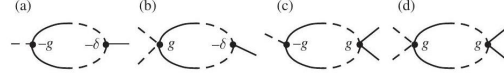


Figure 9.10 One-loop renormalization of the critical parameter δ , (a) or (b); and the nonlinear vertex g , (c) or (d) in the model with a non-accessible absorbing state. All diagrams have a combinatorial factor of 2.

diagram Fig. 9.10(c) or (d), which are built on the (ii) $\times$ (iii) and (iv) $\times$ (iii) vertices, respectively. Again, having the same loop in both of them is crucial to keep $(\pi - \pi^2)$ unrenormalized.

¹⁶ Fixing γ and D leads to $\chi = -d$ and $z = 2$, while the remaining RG equations are

$$\partial_l \delta = (2 - g\tilde{K}_d) \delta, \quad \partial_l g = (\epsilon - g\tilde{K}_d) g \quad (9.51)$$

where $\epsilon = 2 - d$. The critical dimension is thus $d_c = 2$. For $d < d_c$ there is a nontrivial fixed point $g^* = \epsilon/\tilde{K}_d$ and in its vicinity $\partial_l \delta = (2 - \epsilon)\delta = d\delta$. We thus find the critical exponents $v^{-1} = d$, $z = 2$, and $\beta = -v\chi = 1$. Using the fact that the only possible diagrams are those including the chains of "bubbles," one may show [162] that Eqs. (9.51) are actually exact to all orders in ϵ and thus we have found the critical exponents for any $d \leq 2$. For $d > 2$ the Gaussian exponents are $v = 1/2$, $z = 2$, and $\beta = 1$.

One may consider different reaction sets, for example, $2A \xrightarrow{2g} A$ and $A \xrightarrow{\delta} 3A$, with the Hamiltonian $H = (\pi - \pi^2)(g\varphi - \delta - \tilde{\delta}\pi)\varphi$, where $\tilde{\delta} = \delta$. The corresponding phase portrait has a tilted zero energy line $\varphi = (\delta + \tilde{\delta}\pi)/g$. Although the naive scaling of δ and $\tilde{\delta}$ is the same, one may argue [162] that the one-loop corrections make $\tilde{\delta}$ less relevant than δ and thus the phase portrait approaches that of the Hamiltonian (9.50), Fig. 9.8(b). As a result, these (and other similar) reactions belong to the same universality class.

Multi-agent Contact Processes One may consider reaction sets where all the reactions require at least k agents to be initiated. An example with $k = 2$, that is, a two-particle contact process with diffusion, is given by $2A \rightarrow \emptyset$, $2A \rightarrow 3A$, and $3A \rightarrow A$. It is easy to see that all terms in the corresponding Hamiltonian (9.38) are proportional to φ^k and therefore the $\varphi = 0$ zero-energy line is k times degenerate. One may show that this degeneracy is not removed in the process of renormalization. That is, no new vertices $\alpha\varphi, \varphi^2, \dots, \varphi^{k-1}$ are generated. The corresponding phase portrait in the vicinity of the transition is plotted in Fig. 9.8(c) for $k = 2$. After the shift $\pi - 1 \rightarrow \pi$ the minimal reaction Hamiltonian near the transition acquires the form

$$H(\pi, \varphi) = \pi(\delta - g_1\varphi + g_2\pi)\varphi^2 \quad (9.52)$$

where we again took $k = 2$. As in the DP case, to keep the triangular structure of the phase portrait, one has to impose the same scaling dimension for both fields, that is, $\tilde{\chi} = \chi$. Since both nonlinear vertexes include four fields, there is no oneloop renormalization of the propagator, similarly to Fig. 9.9. One thus finds in the

one-loop order $z = 2$ and $\tilde{\chi} = \chi = -d/2$. The three remaining one-loop RG equations are [163]

$$\partial_l \delta = (1 + \epsilon/2 + g_2\tilde{K}_d) \delta, \quad \partial_l g_1 = (\epsilon + 3g_2\tilde{K}_d) g_1, \quad \partial_l g_2 = (\epsilon + g_2\tilde{K}_d) g_2 \quad (9.53)$$

where $\epsilon = 2 - d$. Notice the opposite sign of the one-loop terms in comparison with Eqs. (9.49) and (9.51). It may be traced back to the opposite sign of the $\pi^2\varphi^2$ term in Eq. (9.52) versus Eqs. (9.47) and (9.50). As a result, for $d < d_c = 2$ the Gaussian fixed point, $g_{1,2}^* = 0$, is

¹⁶ In addition, the diagram Fig. 9.10(a) renormalizes the propagator parameters γ and D in a way similar to Eqs. (9.43) and (9.45). Since, however, the corresponding loop is proportional to the critical parameter δ , one may disregard such a renormalization in the vicinity of the transition.

unstable and the ϵ -expansion does not predict any new fixed point in its ϵ -vicinity. For $d > 2$ the Gaussian fixed point is locally stable, but for $g_2 > |\epsilon|/\tilde{K}_2 \sim |\epsilon|D$ the RG flows away from it. There is numerical evidence [157] that the strong-coupling fixed point, unreachable in the ϵ -expansion, may belong to the DP universality class.

12.4.10 9.8 KPZ Dynamics of Growing Interfaces

Another example of an intrinsically non-equilibrium system is a surface growing by a random deposition of atoms. A model that describes a wide class of such processes was suggested by Kardar, Parisi, and Zhang (KPZ) [164]. It is written in terms of the evolution equation for the height $h(\mathbf{r}, t)$ of a growing d -dimensional surface in a $d + 1$ -dimensional embedding space:

$$\partial_t h = D \nabla_{\mathbf{r}}^2 h + \frac{\lambda}{2} (\nabla_{\mathbf{r}} h)^2 + \xi \quad (9.54)$$

The first term on the right-hand side describes the diffusion of atoms along the surface. As explained by KPZ [164], the crucially important nonlinear term $\lambda (\nabla_{\mathbf{r}} h)^2 / 2$ has a purely geometric origin. Indeed, the growth occurs in the direction locally normal to the surface. Its angle θ with the direction of the h -axis is $\tan \theta = |\nabla_{\mathbf{r}} h|$. If an increment $\lambda \delta t$ is added along the normal, it is projected on the h -axis as $\delta h = \lambda \delta t / \cos \theta = \lambda \delta t (1 + (\nabla_{\mathbf{r}} h)^2)^{1/2}$. As a result, the rate of change of h is $\delta h / \delta t \approx \lambda + \lambda (\nabla_{\mathbf{r}} h)^2 / 2$. The average deposition rate λ may then be removed from the equation by going to the moving reference frame $h(\mathbf{r}, t) \rightarrow h(\mathbf{r}, t) + \lambda t$. The fluctuations in the deposition rate are represented by $\xi(\mathbf{r}, t)$, which may be taken to be a local Gaussian white noise

$$\langle \xi(\mathbf{r}, t) \xi(\mathbf{r}', t') \rangle = 2\Delta \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t'). \quad (9.55)$$

There is an important relation between KPZ and the Burgers equation with conservative noise [165]. Introducing the slope field $\mathbf{v} = -\nabla_{\mathbf{r}} h$ and taking the gradient of the KPZ equation (9.54), one finds

$$(\partial_t + \lambda \mathbf{v} \nabla_{\mathbf{r}}) \mathbf{v} = D \nabla_{\mathbf{r}}^2 \mathbf{v} + \vec{\zeta}, \quad (9.56)$$

where $\vec{\zeta}(\mathbf{r}, t) = -\nabla_{\mathbf{r}} \xi(\mathbf{r}, t)$ is the conservative (since $\int d\mathbf{r} \vec{\zeta}(\mathbf{r}, t) = 0$) vector noise. For $\lambda = 1$ this is the Burgers equation for the velocity of an irrotational fluid, $\text{curl } \mathbf{v} = 0$. Its left-hand side is written in terms of the convective time derivative $d/dt = \partial_t + (\partial \mathbf{r} / \partial t) \nabla_{\mathbf{r}}$, where $\mathbf{r}$ is the coordinate of a particle and $\mathbf{v} = \partial \mathbf{r} / \partial t$ is the velocity of particles at a point $\mathbf{r}$. This interpretation suggests the invariance of Eq. (9.56) with respect to the Galilean transformation

$$t' = t, \quad \mathbf{r}' = \mathbf{r} - \lambda \mathbf{v}_0 t, \quad \mathbf{v}'(\mathbf{r}', t') = \mathbf{v}(\mathbf{r}, t) - \mathbf{v}_0 \quad (9.57)$$

where $\mathbf{v}_0$ is an arbitrary constant vector and the invariance follows from $\partial_{t'} \mathbf{v}' = \partial_t \mathbf{v} + \lambda \mathbf{v}_0 \nabla_{\mathbf{r}} \mathbf{v}$ and $\nabla_{\mathbf{r}'} \mathbf{v}' = \nabla_{\mathbf{r}} \mathbf{v}$. The Galilean invariance must also preserve the noise correlator, which is indeed the case for the local (or even nonlocal) white noise, that is, $\sim \delta(t - t')$. One may notice that λ is just a constant parameter of the invariance transformation (much the same way as the speed of light is a parameter of the Lorentz transformation). In the original KPZ variables the last equation of the Galilean transformation (9.57) is changed to $h'(\mathbf{r}', t') = h(\mathbf{r}, t) + \mathbf{v}_0 \cdot \mathbf{r}$, which expresses the tilt invariance of the KPZ equation.

Since the KPZ equation (9.54) is scale-invariant, one expects (and indeed observes) its correlation functions to have a scaling form. Following the notation of Section 9.4, upon the scale transformation $\mathbf{r} \rightarrow b\mathbf{r}$ and $t \rightarrow b^z t$ the height field transforms as $h(\mathbf{r}, t) \rightarrow b^x h(b\mathbf{r}, b^z t)$. As a result, for example, the pair correlation function is expected to have the form

$$\langle [h(\mathbf{r}, t) - h(\mathbf{0}, 0)]^2 \rangle = r^{2\chi} f_{\text{KPZ}}(t/r^z), \quad (9.58)$$

where $f_{\text{KPZ}}(u)$ is a scaling function with asymptotic properties $f_{\text{KPZ}}(0) = \text{const}$ and $f_{\text{KPZ}}(u) \sim u^{2\chi/z}$ if $u \rightarrow \infty$. In the present context the exponent χ is known as the interface roughness exponent. Following [165] and [164], we shall attempt to find the exponents using the RG scheme.

Employing the MSR procedure of Section 4.3, one elevates the KPZ equation (9.54) to the exponent with the help of the auxiliary field $h^q(\mathbf{r}, t)$ and then performs averaging over the Gaussian white noise (9.55). As a result one obtains the action, which we write in the Hamiltonian notation, using the field $p(\mathbf{r}, t) = 2ih^q(\mathbf{r}, t)$ canonically conjugated to $h(\mathbf{r}, t)$,

$$S[h, p] = \int dt d\mathbf{r} \left[p \partial_t h - D p \nabla_{\mathbf{r}}^2 h - \frac{\lambda}{2} p (\nabla_{\mathbf{r}} h)^2 - \Delta p^2 \right] \quad (9.59)$$

We now split the fields into slow and fast components, as explained in Section 9.4, and integrate out the fast ones. The propagators of the fast components are, in fact, given by Eqs. (9.17) with $\varphi = h$, $\varphi^q = p/(2i)$, $\delta = 0$, and $T = \Delta$. The only nonlinear term in the action, $-\lambda p (\nabla_{\mathbf{r}} h)^2/2$, generates two types of vertex: (i) $-\lambda p_s (\nabla_{\mathbf{r}} h_f)^2/2$ and (ii) $-\lambda p_f (\nabla_{\mathbf{r}} h_f) (\nabla_{\mathbf{r}} h_s)$. Notice that the slow field $h_s(\mathbf{r}, t)$ appears in the nonlinear vertices only through its gradient $(\nabla_{\mathbf{r}} h_s)$, in other words, spatially flat realizations $h_s(t)$ do not enter the nonlinear vertices. This immediately implies that the coefficient in the term $p \partial_t h$ is not renormalized. Indeed, such a renormalization would require one to generate $p_s \partial_t h_s$ with the help of loops built on the (i) and (ii) vertices. Taking h_s to be time-dependent, but spatially flat, nullifies any such diagram, but not $p_s \partial_t h_s$. Therefore, no terms $\sim p_s \partial_t h_s$ can appear in any order of renormalization. We can thus choose the bare scaling dimension $\tilde{\chi}$ of the auxiliary field p in a way to rigidly fix the coefficient (one) in front of $p \partial_t h$ in any order. This requires (cf. Eq. (9.21)) that $d + \tilde{\chi} + \chi = 0$.

The non-renormalized coefficient of $\partial_t h$ along with the Galilean (i.e. tilt) invariance (9.57) of the KPZ equation dictates that λ is not renormalized either. Indeed, the Galilean invariance of the Burgers equation (9.56) preserves the convective nature of its left-hand side with the transformation parameter λ being a relative coefficient of the ∂_t and $\mathbf{v} \nabla_{\mathbf{r}}$ terms. Since the coefficient of $\partial_t \mathbf{v}$ is not renormalized, neither is the coefficient of $\mathbf{v} \nabla_{\mathbf{r}} \mathbf{v}$.¹⁷ This statement manifests itself in, for example, cancelation of the two diagrams Fig. 9.11(a), (b) (in the limit of zero external momenta and frequencies), representing the one-loop correction to λ . The same must happen in all higher orders [166]. Employing thus $\partial_t \lambda = (d + z - 2 + \tilde{\chi} + 2\chi)\lambda$ and demanding that λ is not renormalized, one arrives at the exact¹⁸ identity between the two scaling exponents for any fixed point with $\lambda \neq 0$,

$$\chi + z = 2 \quad (9.60)$$

where we employed $d + \tilde{\chi} + \chi = 0$, established earlier. The only two constants that exhibit perturbative renormalization are thus D and Δ .

The one-loop renormalization of Δ is given by the diagram of Fig. 9.11(c), which employs (i) $\times$ (i) vertices and reads as

$$\left(\frac{\lambda}{2}\right)^2 \int_{\Lambda}^{b\Lambda} \frac{d\mathbf{q}_f}{(2\pi)^d} \int \frac{d\omega}{2\pi} \mathbf{q}_f^4 [D_0^K(\mathbf{q}_f, \omega)]^2 = -\frac{\lambda^2 \Delta^2}{4} \int_{\Lambda}^{b\Lambda} \frac{d\mathbf{q}_f}{(2\pi)^d} \frac{\mathbf{q}_f^4}{(D\mathbf{q}_f^2)^3}, \quad (9.61)$$

where the factor $\mathbf{q}_f^4$ originates from the fact that each vertex (i) includes two gradients of the fast fields. The one-loop renormalization of D utilizes the (i) $\times$ (ii) combination of vertices,

Fig. 9.11(d). One has to keep track of the slow momentum $\mathbf{q}_s$ dependence of the external legs to get things right. The corresponding expression is

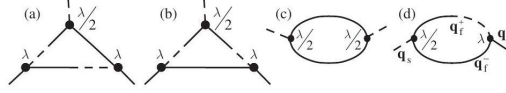


Figure 9.11 One-loop renormalization of the KPZ action (9.59). Diagrams (a) and (b), renormalizing λ , cancel each other (notice that (a) carries a combinatorial factor of 4, while (b) carries a factor of 2). Diagram (c) renormalizes Δ and (d) renormalizes D .

$$2\lambda^2 \int \frac{d\mathbf{q}_f d\omega}{(2\pi)^{d+1}} (\mathbf{q}_s \cdot \mathbf{q}_f^-) (\mathbf{q}_f^+ \cdot \mathbf{q}_f^-) D_0^R(\mathbf{q}_f^+, \omega) D_0^K(\mathbf{q}_f^-, \omega)$$

$$= \lambda^2 \Delta \int_{\Lambda}^{b\Lambda} \frac{d\mathbf{q}_f}{(2\pi)^d} \frac{(\mathbf{q}_s \cdot \mathbf{q}_f^-)(\mathbf{q}_f^+ \cdot \mathbf{q}_f^-)}{[D(\mathbf{q}_f^-)^2 + D(\mathbf{q}_f^+)^2] D(\mathbf{q}_f^-)^2} \approx \frac{\lambda^2 \Delta}{2D^2} \int_{\Lambda}^{b\Lambda} \frac{d\mathbf{q}_f}{(2\pi)^d} \frac{\mathbf{q}_s \cdot (\mathbf{q}_f - \mathbf{q}_s/2)}{\mathbf{q}_f^2 - (\mathbf{q}_s \cdot \mathbf{q}_f)}$$

$$\approx \frac{\lambda^2 \Delta}{2D^2} \int_{\Lambda}^{b\Lambda} \frac{d\mathbf{q}_f}{(2\pi)^d} \frac{1}{\mathbf{q}_f^2} \left(\frac{(\mathbf{q}_s \cdot \mathbf{q}_f)^2}{\mathbf{q}_f^2} - \frac{\mathbf{q}_s^2}{2} \right) = \frac{\lambda^2 \Delta}{2D^2} \left(\frac{1}{d} - \frac{1}{2} \right) \mathbf{q}_s^2 \tilde{K}_d,$$

where $\mathbf{q}_f^{\pm} = \mathbf{q}_f \pm \mathbf{q}_s/2$ and $\tilde{K}_d = \Lambda^{d-2} 2^{1-d} \pi^{-d/2} \Gamma(d/2)$. We kept here only the terms $\sim \mathbf{q}_s^2 = -\nabla_{\mathbf{r}}^2$. Combining these loop calculations with the bare scaling and using $d + \tilde{\chi} + \chi = 0$, one obtains the two nontrivial RG equations

$$\partial_t \Delta = \left(z - d - 2\chi + \bar{\lambda}^2 \tilde{K}_d \right) \Delta, \quad \partial_t D = \left(z - 2 + \frac{2-d}{d} \bar{\lambda}^2 \tilde{K}_d \right) D \quad (9.63)$$

where $\bar{\lambda}^2 = \lambda^2 \Delta / 4D^3$ is an effective running constant. Employing Eq. (9.60) along with $\partial_t \lambda = 0$, one may rewrite these two equations as a single closed RG equation for $\bar{\lambda}^2$:

$$\partial_t \bar{\lambda}^2 = \left(\epsilon + \frac{1-2\epsilon}{1-\epsilon/2} \bar{\lambda}^2 \tilde{K}_d \right) \bar{\lambda}^2, \quad (9.64)$$

where $\epsilon = 2 - d$. We have found thus that the critical dimension is $d_c = 2$, but the RG flow is very different from the equilibrium transitions, or even DP. Indeed, according to Eq. (9.64) there is no stable fixed point of order ϵ for $d \leq 2$, Fig. 9.12(a). Curiously, the RG predicts the order 1 fixed point for $d < 3/2$; we shall come back to this observation later. Most notably, for $d > 2$ the Gaussian fixed point $\bar{\lambda}^* = 0$ is stable, if the bare values of the parameters are such that $\bar{\lambda} < \bar{\lambda}_c = (|\epsilon|/\tilde{K}_2)^{1/2}$. In the Gaussian fixed point the correlation function (9.58) is given by Eq. (9.17c) with $\delta = 0$ and $T = \Delta$ and thus the critical exponents are $z = 2$ and $\chi = 1 - d/2$. The fact that $\chi < 0$ implies that the growing surface is essentially flat at large scales. For $\bar{\lambda} > \bar{\lambda}_c$ the RG runs away toward a strong coupling fixed point, describing a rough surface. We have found thus a phase transition

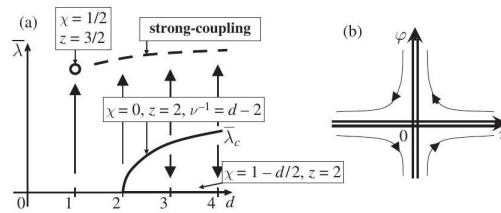


Figure 9.12 (a) KPZ critical exponents on the coupling constant $\bar{\lambda}$ versus surface dimensionality d plane. (b) Phase portrait of the critical KPZ Hamiltonian after a Cole-Hopf transformation $H(\pi, \varphi) = D\bar{\lambda}^2 \pi^2 \varphi^2$; see Eq. (9.66).

between the smooth and rough modes of the surface growth as a function of the effective coupling constant $\bar{\lambda}$ for $d > 2$. For $d \leq 2$ the smooth mode of the growth is absent and the

⁰¹⁷ On a more formal level, the Galilean invariance implies certain Ward identities for the exact generating function [166]. They connect the two-leg vertex $p\partial_t h$ with the three-leg vertex $p(\nabla_{\mathbf{r}} h)^2$. The non-renormalizability of the former thus implies the non-renormalizability of the latter. I am indebted to Uwe Täuber for clarification of this point.

¹⁸ Strictly speaking, our proof is only applicable to any fixed point that may be reached in the perturbative expansion. There are numerical indications, though, that the statement may be more general.

surface is always rough. Properties of the strong coupling fixed point are inaccessible in any perturbative RG treatment.

One can discuss, however, scaling properties of the surface, which happens to be right at the phase transition between the smooth and rough modes, that is, having $\bar{\lambda} = \bar{\lambda}_c$. They are described by the unstable fixed point $\bar{\lambda}^* = \bar{\lambda}_c$. Demanding that both Δ and D are not renormalized at this fixed point, one finds, for example, $z = 2 + \epsilon^2/(2 - 4\epsilon)$. Since the calculations were done in one-loop only, one should not trust ϵ^2 terms and the only conclusion is that $z = 2 + O(\epsilon^2)$ and $\chi = O(\epsilon^2)$. In fact, the two-loop calculation of Frey and Täuber [166] showed that there are no ϵ^2 corrections to $z = 2$ and $\chi = 0$ either, suggesting that these exponents may be exact at the unstable fixed point [167].

To show that this is indeed the case one may apply the Cole-Hopf transformation [168]

$$\varphi = \exp \left\{ \frac{\lambda}{2D} h - \frac{\lambda^2 \Delta}{4D^2} t \right\} \quad (9.65)$$

which transforms the KPZ equation (9.54) into a linear equation with multiplicative Stratonovich noise, $\partial_t \varphi = D \nabla_{\mathbf{r}}^2 \varphi - (\Delta \lambda^2 / 4D^2) \varphi + (\lambda / 2D) \varphi \xi$. With the help of the Stratonovich to Ito transformation (4.40) the latter is shown to be equivalent to the Ito-Langevin equation $\partial_t \varphi = D \nabla_{\mathbf{r}}^2 \varphi + (\lambda / 2D) \varphi \xi$. The corresponding MSR action is

$$S[\varphi, \pi] = \int dt d\mathbf{r} [\pi (\partial_t \varphi - D \nabla_{\mathbf{r}}^2 \varphi) - D \bar{\lambda}^2 \pi^2 \varphi^2] \quad (9.66)$$

From the fact that the only nonlinear vertex is $\pi^2 \varphi^2$ one observes that there are no corrections to the propagator $\langle \pi \varphi \rangle$ in any order of the perturbative expansion [168]. As a result, $z = 2$ in any perturbatively reachable fixed point, while D is

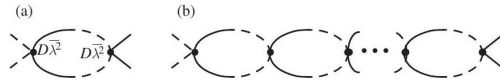


Figure 9.13 Renormalization of the Cole-Hopf transformed KPZ action (9.66). (a) One-loop diagram; (b) the only possible sequence of diagrams. It makes the one-loop RG equation perturbatively exact.

not renormalized. The only renormalization is that of $\bar{\lambda}^2$, given by the diagrams of Fig. 9.13. Since this sequence is nothing but successive applications of the one-loop renormalization, one concludes that the following one-loop RG equation

$$\partial_t \bar{\lambda}^2 = (\epsilon + \bar{\lambda}^2 \tilde{K}_d) \bar{\lambda}^2 \quad (9.67)$$

is actually exact. It coincides with Eq. (9.64) in the leading order of ϵ -expansion (i.e. to the precision Eq. (9.64) was derived). Due to the identity (9.60) one finds that $\chi = 0$ at the unstable fixed point, which exists for $d > 2$. Linearizing Eq. (9.67) near the unstable fixed point $(\bar{\lambda}^2)^* = |\epsilon| / \tilde{K}_d$, one finds the spatial correlation length critical exponent $v^{-1} = |\epsilon| = d - 2$ [168]. The scaling properties of the KPZ problem are summarized in Fig. 9.12(a).

Finally, let us mention that for $d = 1$ (i.e. $\mathbf{r} \rightarrow x$) one knows the exact stationary distribution function of the surface slopes ¹⁹

$$\mathcal{P}[h] = Z^{-1} \exp \left\{ -\frac{D}{2\Delta} \int dx (\partial_x h)^2 \right\} \quad (9.68)$$

This distribution function is exactly the same as the equilibrium distribution (9.10)²⁰ for the linear problem with $\lambda = 0$. In the latter case the KPZ equation (9.54) is a potential one (cf. Eq. (9.1)), with $\mathcal{F}[h] = \int dx D (\partial_x h)^2 / 2$. As a result, all static exponents in $d = 1$ coincide with their Gaussian, that is, $\lambda = 0$, counterparts. This way one finds [175] $\chi = 1 - d/2 = 1/2$.

The dynamic critical exponent $z = 3/2$ follows then from the exact relation (9.60). Curiously, but completely unjustifiably, one can arrive at the same exact results, applying the one-loop

Eqs. (9.63) and (9.64) to $d = 1$, that is, $\epsilon = 1$. Indeed, there is a stable fixed point with $(\bar{\lambda}^2)^* \tilde{K}_1 = 1/2$. Substituting it in Eqs. (9.63) and demanding that Δ and D are at the fixed point, one finds $\chi = 1/2$ and $z = 3/2$.

12.4.11 9.9 Large Deviations in Stochastic Systems

Here we discuss probability of certain atypical outcomes of the dynamical evolution of classical stochastic systems. Such rare events, or large deviations, although coming with an exponentially small probability, may nevertheless carry a large significance. An example is provided by a population extinction. The technique, discussed here is known as a weak noise theory, or a macroscopic fluctuation theory (MFT). It calls for a solution of semiclassical equations of motion obtained from a proper Martin-Siggia-Rose action with the boundary conditions encoding the rare event. We have already employed this strategy in the zero-dimensional setting in Section 4.11. Here we present its generalization to extended systems using the 1d KPZ model (see Section 9.8) as an example [169, 176, 179, 180, 181, 182]. Closely related methods appeared in the studies of turbulence and turbulent transport [183, 184, 185], diffusive lattice gases [171, 186, 187, 188] and stochastic reactions on lattices [69].

The question is as follows: find a probability distribution function $\mathcal{P}(H, t_0)$ for the interface height at $x = 0$ to advance by $H = h(0, t_0) - h(0, 0)$ during the time t_0 . One should also specify an initial state of the interface at $t = 0$, for example, as being flat, $h(x, 0) = 0$, or as $h(x, 0)$ being randomly taken from the stationary distribution (9.68). In the long time limit, $t_0 \gg t_* = D^5/(\lambda^4 \Delta^2)$, equation (9.58) dictates that $\langle H^2 \rangle \propto t_0^{2\chi/z}$ and, since the 1d KPZ fixed point is characterized by $\chi = 1/2$ and $z = 3/2$ (cf. Fig. 9.12(a)), one observes that typically $(H/h_*) \propto (t_0/t_*)^{1/3}$, where $h_* = D/\lambda$. One thus expects that in the long time limit the distribution function depends on the single dimensionless scaling variable

$$\mathcal{P}(H, t_0) = \mathcal{P}(y); \quad y = \left(\frac{H}{h_*}\right) \left(\frac{t_*}{t_0}\right)^{1/3} = \left(\frac{H^3 D^2}{t_0 \lambda \Delta^2}\right)^{1/3}. \quad (9.69)$$

Indeed, it was shown [189, 190, 192, 194] that $\mathcal{P}(y)$ is given by the orthogonal Tracy-Widom [195] distribution for the initially flat interface and by the BaikRains [196] distribution for the initial height taken from the stationary distribution. Both of them have non-Gaussian asymptotics: $\log \mathcal{P}(y) \propto -y^{3/2}$ for $y \gg 1$ and $\log \mathcal{P}(y) \propto -|y|^3$ for $y \ll -1$.

As we will see momentarily, MFT tackles the opposite limit of short times,²¹ $t_0 \ll t_*$. To this end let us transform to dimensionless coordinates $t/t_0 \rightarrow t$,

²¹ Since $t_* \sim \Delta^{-2}$, the short time limit $t_0 \ll t_*$ may be interpreted as the weak noise limit, $\Delta \ll D^{5/2}/(\lambda^2 \sqrt{t_0})$.

⁰¹⁹ To prove this statement one needs to consider the Fokker-Planck equation, which corresponds to the KPZ-Langevin process, cf. Eqs. (9.11) and (4.30),

$$\partial_t \mathcal{P}([h], t) = \int d\mathbf{r} \frac{\delta}{\delta h(\mathbf{r})} \left[- \left(D \nabla_{\mathbf{r}}^2 h + \frac{\lambda}{2} (\nabla_{\mathbf{r}} h)^2 \right) \mathcal{P}([h], t) + \Delta \frac{\delta \mathcal{P}([h], t)}{\delta h(\mathbf{r})} \right]$$

Let us show that the term $\sim \lambda$ with $\mathcal{P}$ given by Eq. (9.68) is the full derivative in $d = 1$. Indeed, it follows from: $\lambda [\partial_x^2 h - (D/2\Delta) (\partial_x h)^2 \partial_x^2 h] \mathcal{P} = \lambda \mathcal{P} \partial_x [\partial_x h - (D/6\Delta) (\partial_x h)^3]$. As a result it vanishes upon integration over dx and Eq. (9.68) is thus a solution of the stationary Fokker-Planck equation. Notice that the trick does not work in $d > 1$, indeed $(\nabla^\alpha h \nabla^\alpha h) (\nabla^\beta \nabla^\beta h)$ is not a full derivative. For the stationary path interpretation of the exact distribution function (9.68) see [169].

²⁰ An even more spectacular example, where the intrinsically non-equilibrium problem admits the static equilibrium distribution function in $d = 1$, is offered by the symmetric exclusion process [171, 174].

$x/\sqrt{Dt_0} \rightarrow x$, and fields $h/h_* \rightarrow h, p/p_* \rightarrow p$, where $p_* = D/(t_0\lambda\Delta)$. Then the MSR action (9.59) acquires the form

$$S[h, p] = \sqrt{\frac{t_*}{t_0}} \int_0^1 dt \int dx \left[p \partial_t h - p \partial_x^2 h - \frac{1}{2} p (\partial_x h)^2 - p^2 \right] \quad (9.70)$$

The corresponding functional integral should be equipped with the constraint, specifying the desired (rare) outcome of the evolution. In our example it takes the form

$$\delta(H/h_* - h(0, t_0) + h(0, 0)) = \int \frac{d\Lambda}{2\pi} e^{i\Lambda(H/h_* - h(0, t_0) + h(0, 0))}, \quad (9.71)$$

which adds the following boundary action

$$S_b[h, \Lambda] = -i\Lambda \frac{H}{h_*} + i\Lambda \int_0^1 dt \int dx h(x, t) \delta(x) (\delta(t-1) - \delta(t)) \quad (9.72)$$

In the short time limit $t_0 \ll t_*$ there is a large parameter in front of the parameterless bulk action (9.70), which justifies calculating the functional integral in the saddlepoint approximation. Taking variations of $S[h, p] + S_b[h, \Lambda]$ with respect to $p(x, t)$ and $h(x, t)$, one finds

$$\partial_t h = \partial_x^2 h + \frac{1}{2} (\partial_x h)^2 + 2p \quad (9.73a)$$

$$\partial_t p = -\partial_x^2 p + \partial_x (p \partial_x h) + \tilde{\Lambda} \delta(x) \delta(t-1) \quad (9.73b)$$

where $\tilde{\Lambda} = i\Lambda\sqrt{t_0/t_*}$ and we assumed an initially flat interface, $h(x, 0) = 0$, and thus no variation with respect to $h(x, 0)$. Therefore in the time interval $0 < t < 1$ the two fields obey the Hamiltonian equations of motion

$$\partial_t h = \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta p}; \quad \partial_t p = -\frac{\delta \mathcal{H}}{\delta h}; \quad \mathcal{H} = \int dx \left[p \partial_x^2 h + \frac{1}{2} p (\partial_x h)^2 + p^2 \right] \quad (9.74)$$

supplemented with the boundary conditions

$$h(x, 0) = 0; \quad p(x, 1) = \tilde{\Lambda} \delta(x) \quad (9.75)$$

The "future" boundary condition, imposed on the MSR "quantum" field $p(x, t)$ at the observation time $t = t_0$, follows from integrating Eq. (9.73b) over the infinitesimal area around the point $x = 0, t = 1$ and assuming that at any time $t < 1$ the fields are non-singular. Finally, the so-far-undetermined parameter $\tilde{\Lambda}$ should be fixed by the constraint $h(0, 1) = H/h_*$. The fact that $\tilde{\Lambda}$ happens to be real means that the integration contour over Λ in Eq. (9.71) is distorted to pass through a purely imaginary saddle point. Once the equations of motion (9.74) with the boundary conditions (9.75) are solved, the probability of the rare event is calculated as

$$\log \mathcal{P}(H, t_0) = -S[h, p] = -\sqrt{\frac{t_*}{t_0}} s\left(\frac{H}{h_*}\right); \quad s\left(\frac{H}{h_*}\right) = \int_0^1 dt \int dx p^2(x, t)$$

where the last equality follows from the fact that on the solutions of the equations of motion $\int dx (p \partial_t h - p^2) = \mathcal{H}$; compare Eq. (9.73a).

In general, dynamic MFT equations (9.74) are hard to solve analytically. A fast and efficient numerical algorithm was suggested by Chernykh and Stepanov [197, 69]. It calls for an iterative alternation of forward-in-time propagation of $h(x, t)$, with $p(x, t)$ fixed by the previous iteration, followed by the backward-in-time propagation of $p(x, t)$, with $h(x, t)$ fixed by the previous

iteration. This way, evolution of both fields is numerically stable due to the proper sign of the diffusion term.

An analytic progress is possible in limiting cases²² where $|H| \gg h_*$. Let us first consider a large positive $H \gg h_*$. In this case it is convenient to perform the canonical Cole-Hopf transformation (9.65), which brings MFT equations (9.74) to a symmetric form

$$\begin{aligned} \varphi &= e^{h/2}, \quad \pi = 2pe^{-h/2}; h = 2 \log \varphi, \quad p = \frac{1}{2}\pi\varphi; \\ \partial_t \varphi &= \partial_x^2 \varphi + \frac{1}{2}\pi\varphi^2; \partial_t \pi = -\partial_x^2 \pi - \frac{1}{2}\varphi\pi^2. \end{aligned} \quad (9.77)$$

These are Ablowitz-Kaup-Newell-Segur (AKNS) equations [198], solvable with the inverse scattering technique. Recently the technique was extended to treat some problems with the mixed boundary conditions, like (9.75) [199, 201]. The large H (and thus large $\tilde{\Lambda}$) problem is progressively well approximated by soliton solutions of AKNS equations. Generic N -soliton solutions are outlined in problem 9.10.3. The boundary conditions (9.75) are satisfied (in the limit $H \gg h_*$) by the following particular solution of (9.77); see Fig. 9.14:

$$\varphi(x, t) = \frac{e^{c^2 t} + \cosh cx}{e^{-c^2 t} + \cosh cx}; \quad \pi(x, t) = \frac{4c^2 e^{-c^2 t}}{e^{-c^2 t} + \cosh cx} \quad (9.78)$$

From $h(0, 1) = H/h_*$ and $h(0, t) = 2 \log \varphi(0, t) = 2c^2 t$, one finds $c^2 = H/(2h_*)$. For $c \gg 1$, one may approximate $p = \pi\varphi/2 \approx 2c^2 / \cosh^2 cx$, which leads to

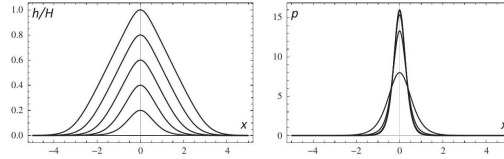


Figure 9.14 Optimal interface growth according to Eq. (9.78) with $H = 16h_*$. From bottom to top, $t/t_0 = 0, .2, .4, .6, .8, 1$. Notice that after a short initial transient time $\sim 2h_*/H \ll 1$, $p(x, t)$ (the right panel) saturates to a stationary soliton peak $p(x, t) \approx 2c^2 / \cosh^2 cx$, which solely determines the optimal action (9.76). Numerically one sees an equally short transient near $t = 1$, when the sharp soliton evolves into the delta-function $p(x, 1) = 4c\delta(x)$, due to the antidiffusion $\partial_t p = -\partial_x^2 p + \dots$. Both transients do not affect the leading asymptotic (in $H/h_* \gg 1$) of the action (9.79).

the following expression for the probability of a large positive height; compare Eq. (9.76),²³ [176, 179, 181]:

$$\log \mathcal{P}(H, t_0) = -\sqrt{\frac{t_*}{t_0}} \frac{16}{3} \left(\frac{H}{2h_*} \right)^{3/2} = -\frac{8}{3\sqrt{2}} \left(\frac{H^3 D^2}{t_0 \lambda \Delta^2} \right)^{1/2}. \quad (9.79)$$

This coincides (including the right numerical factor!) with the positive (Airy) tail of the Tracy-Widom distribution [195], obtained in the long time limit, Eq. (9.69) [190]. This remarkable coincidence is responsible for the validity of Eq. (9.79) at any time (as long as its right-hand side is larger than one), though our saddle-point MFT derivation is only justified at $t_0 \ll t_*$.

The situation is very different for a large negative height, where the (cubic) tail of the long time Tracy-Widom distribution is qualitatively distinct from the short time asymptotic. To derive the latter one notices [176, 179] that for $H \ll -h_*$ one may disregard the diffusive terms in the MFT equations (9.74), which brings them to the hydrodynamic form

²² One can also solve the case of $|H| \ll h_*$, where nonlinearity may be disregarded and the problem reduces to the Edwards-Wilkinson model; see Problem 9.10.2, where one finds Gaussian law $s(H) \propto H^2$, [179, 182].

$$\partial_t V = V \partial_x V + 2 \partial_x p; \quad \partial_t p = \partial_x (pV), \quad (9.80)$$

where $V(x, t) = \partial_x h(x, t)$. These equations describe a nonstationary inviscid flow of an effective gas with density p , velocity V , and a negative pressure $P(p) = -p^2$. They are supplemented with the boundary conditions $V(x, 0) = 0$ and $p(x, 1) = \tilde{\Lambda} \delta(x)$. Remarkably, they may be brought to the completely parameter-free form by the following rescaling: $x/\tilde{\Lambda}^{1/3} \rightarrow x$, $V/\tilde{\Lambda}^{1/3} \rightarrow V$, and $p/\tilde{\Lambda}^{2/3} \rightarrow p$. From here

one immediately concludes that the dimensionless action in Eq. (9.76) is $s(H) \propto \tilde{\Lambda}^{5/3}(H)$. Finally, from $V = \partial_x h$ and $h(0, 1) = H/h_*$, one deduces $\tilde{\Lambda} \propto (|H|/h_*)^{3/2}$. This leads to the large negative tail of the short time probability of the form [176, 179, 202, 203]

$$\log \mathcal{P}(H, t_0) \propto -\sqrt{\frac{t_*}{t_0}} \left(\frac{|H|}{h_*} \right)^{5/2} = -\left(\frac{|H|^5 \lambda}{t_0 \Delta^2} \right)^{1/2} \quad (9.81)$$

which is indeed independent of the diffusion coefficient D . Numerical factors may be found [179, 202] from solving the hydrodynamic equations (9.80). Notice that the negative tail does not conform to the large time scaling behavior (9.69) and its functional form, $|H|^{5/2}$, is different from the scaling of the negative Tracy-Widom tail, $|H|^3$ [195]. Recently the short time $|H|^{5/2}$ law was confirmed by mathematical tools [204].

We now briefly comment on the problem where the initial height profile $h(x, 0) = h_0(x)$, instead of being flat, is randomly drawn from the 1d exact stationary distribution (9.68). In this case the action $S[h, p] + S_b[h, \Lambda]$, (9.70), (9.72), should be supplemented with the statistical weight of an initial height, $S_{\text{ini}}[h_0] = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{t_k}{t_0}} \int dx (\partial_x h_0)^2$; compare Eq. (9.68). Variation over $h_0(x)$ leads then to the modified initial, $t = 0$, boundary condition of the form [182]

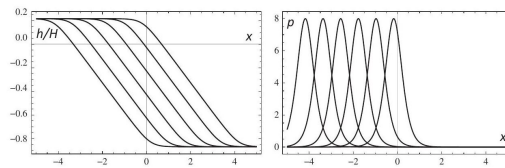
$$p(x, 0) - \partial_x^2 h(x, 0) = \tilde{\Lambda} \delta(x); \quad p(x, 1) = \tilde{\Lambda} \delta(x) \quad (9.82)$$

instead of Eq. (9.75). Notice that these boundary conditions are consistent with the exact conservation law $\int dx p(x, t) = \text{const}$, which follows from (9.73b).

One finds [182, 205, 202, 199] that at $H = H_c \approx 3.7063h_*$ the second derivative of the large deviation function, $\partial_H^2 \log \mathcal{P}(H, t_0)$, exhibits discontinuity, in the limit $t_0 \ll t_*$. It is caused by the dynamical second-order phase transition, associated with the spontaneous breaking of a symmetry at $H = H_c$ [182]. The symmetry, which is broken, is the reflection symmetry, $x \rightarrow -x$, of the optimal initial profile $h_0(x)$, which leads to the rare event $h(0, t_0) - h(0, 0) = H$. For $H < H_c$ the optimal initial profile, $h_0(x)$, is a symmetric (even) function of x . On the other hand, at $H > H_c$ the reflection symmetry is broken and there are two inequivalent asymmetric optimal initial profiles $h_0(x)$ and $h_0(-x)$. The corresponding optimal configuration is depicted in Fig. 9.15.

One may define an order parameter for this non-equilibrium phase transition as [202]

$$M = \int_0^\infty dx (\partial_x h_0)^2 - \int_{-\infty}^0 dx (\partial_x h_0)^2 \quad (9.83)$$



⁰²³ We used the fact that $\int_{-\infty}^\infty dx / \cosh^4 x = 4/3$.

Figure 9.15 Optimal interface evolution for stationary initial conditions, calculated using Eq. (9.90) for $H = 32h_* > H_c$. From left to right, $t/t_0 = 0, .2, .4, .6, .8, 1$. There is another optimal solution obtained by $x \rightarrow -x$ transformation. Since the h -ramp has height H/h_* and length c , the weight of such initial configuration is $S_{\text{ini}}[h_0] = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{t_*}{t_0}} c \left(\frac{H}{h_* c}\right)^2 = \sqrt{\frac{t_*}{t_0}} 2 \left(\frac{H}{2h_*}\right)^{3/2}$, where the ramp velocity $c = \sqrt{H/2h_*}$; Problem 9.10.3. The dynamical action (9.76) adds $S[h, p] = \sqrt{\frac{t_*}{t_0}} \frac{2}{3} \left(\frac{H}{2h_*}\right)^{3/2}$. The resulting total action is half that of the flat initial interface (9.79).

where $h_0(x) = h(x, 0)$ is the solution of Eqs. (9.74) with the boundary conditions (9.82). To explicitly break the reflection symmetry (analog of the magnetic field in a magnetic phase transition), one may study the probability of a "tilted" rare event $h(L, t_0) - h(0, 0) = H$. The analog of the Landau free energy is defined as $\lim_{t_0 \rightarrow 0} \sqrt{t_0} \log \mathcal{P}(H, L, t_0; M) = -\mathcal{F}(H, L; M)$, where all the realizations are conditioned by both the rare event, H, L , and the order parameter, M , through Eq. (9.83). One finds that $\mathcal{F}(H, L; M)$ exhibits all the properties of the mean-field second-order transition (e.g. long-ranged Ising) with the identification of H as an inverse temperature, L as an external magnetic field, and M as magnetization. Close to the transition it takes the form [202]

$$\mathcal{F}(H, L; M) = \alpha_1 (H_c - H) M^2 + \alpha_2 M^4 - \alpha_3 LM, \quad (9.84)$$

where $\alpha_{1,2,3} > 0$ are some effective parameters. The rare event probability is found by minimization of this function over the order parameter M . Notice that the phase transition takes place in the rare events probability function and not in the equilibrium free energy. It is a manifestation of the nonanalyticity in the rare events function, discussed in Section 4.13 in the context of few degrees of freedom.

In the symmetry-broken phase at $H \gg H_c$, the tail of the probability distribution function $\log \mathcal{P}(H, t_0)$ is given by Eq. (9.79) with the extra factor $1/2$ on its right-hand side, Fig. 9.15. This coincides with the proper tail of the Baik-Rains distribution [196]. The latter is known [192, 194] to describe the long time probability distribution (9.69) for the initial height taken from the stationary distribution. Therefore, the corresponding large H tail is applicable for any time. It's interesting to note that enforcing symmetric initial height, $h_0(x)$, (i.e. staying at the unstable $M = 0$ extremum of $\mathcal{F}(H, 0; M)$) eliminates the nonanalyticity and restores the Tracy-Widom tail (9.79), resulting in much smaller probability due to the extra factor of 2 in the exponent. An experimental verification of Baik-Rains distribution for an interface with the stationary initial conditions was obtained in [206], while the symmetry breaking was seen numerically in [207].

12.4.12 9.10 Problems

9.10.1 Edwards-Wilkinson Universality Class

Consider a linear stochastic system [208]:

$$\partial_t h = D \nabla_{\mathbf{r}}^2 h + \xi \quad (9.85)$$

where $\langle \xi(\mathbf{r}, t) \xi(\mathbf{r}', t') \rangle = 2\Delta \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t')$. Derive a corresponding MSR action and the scaling relation:

$$\langle [h(\mathbf{r}, t) - h(\mathbf{0}, 0)]^2 \rangle = r^{2-d} f_{\text{EW}}(t/r^2), \quad (9.86)$$

where $f_{\text{EW}}(u)$ is a scaling function with asymptotic properties $f_{\text{EW}}(0) = \text{const}$ and $f_{\text{EW}}(u) \sim u^{(2-d)/2}$ if $u \rightarrow \infty$; compare Eq. (9.58). That is, the roughness exponent is $\chi = 1 - d/2$ and $z = 2$ (cf. Fig. 9.12). Derive correlation function (9.86) in $d = 2$ case [209].

9.10.2 Height Distribution in 1d Edwards-Wilkinson Model

Show that the height $H = h(0, t_0) - h(0, 0)$ distribution function in the 1d Edwards-Wilkinson model of Problem 9.10.1 with the initially flat interface, $h(x, 0) = 0$, is Gaussian:

$$\mathcal{P}(H, t_0) \propto \exp \left\{ -\sqrt{\frac{\pi D}{t_0}} \frac{H^2}{2\Delta} \right\}. \quad (9.87)$$

From here it follows that $\langle H^2 \rangle \propto \sqrt{t_0}$ in agreement with the $d = 1$ case of (9.86). To this end solve explicitly the proper MFT equations $\partial_t h = \partial_x^2 h + 2p$ and $\partial_t p = -\partial_x^2 p$ with the boundary conditions (9.75) and evaluate the action (9.76).

Solve the same problem with the initial height $h(x, 0)$ taken from the stationary distribution (9.68). To this end repeat the same strategy with the modified boundary conditions (9.82) [179, 182]. Show that, provided $h(0, 0) = 0$, the optimal trajectory at all times satisfies [202]:

$$h(-x, t) = h(x, t); \quad h(x, t) + h(x, 1 - t) = H. \quad (9.88)$$

9.10.3 Soliton Solutions of Large Deviation Equations

Using Hirota substitution [210]

$$\varphi = \frac{v}{u}; \quad \pi = \frac{w}{u},$$

show that AKNS equations (9.77) are satisfied if the new functions u, v, w satisfy

$$(D_t - D_x^2)(v \cdot u) = 0; \quad (D_t + D_x^2)(w \cdot u) = 0; \quad D_x^2(u \cdot u) = \frac{1}{2}vw \quad (9.89)$$

where Hirota derivatives [210] are defined as $D_t(A \cdot B) = (\partial_t A)B - A(\partial_t B)$ and $D_x^2(A \cdot B) = (\partial_x^2 A)B - 2(\partial_x A)(\partial_x B) + A(\partial_x^2 B)$. Show that equations (9.89) are solved by the following N -soliton ansatz [182]:

$$u = \sum_{i=1}^N \eta_i; \quad v = \frac{1}{C} \sum_{i,j=1}^N (c_i - c_j)^2 \eta_i \eta_j; \quad w = 2C \quad (9.90)$$

where $\eta_i(x, t) = e^{c_i^2 t - c_i(x - X_i)}$. Here c_i, X_i, C are $2N + 1$ arbitrary constants specifying soliton velocities and initial positions. (There is also a time-reversed family of solutions with $t \rightarrow -t$ and $v \leftrightarrow w$.) Equation (9.78) corresponds to $N = 3$ with $c_1 = 0$ and $c_2 = -c_3 = c$; $X_2 = -X_3 = -\log 2/c$; $C = 2c^2$. If one is not concerned about the short, $\sim c^{-2} \ll 1$ initial transient, Fig. 9.14, the $i = 1$ static soliton may be discarded, leading to a simpler $N = 2$ solution: $\varphi(x, t) = e^{c^2 t} / \cosh cx$ and $\pi(x, t) = 4c^2 e^{-c^2 t} / \cosh cx$. The optimal asymmetric solitons for stationary initial conditions are given by $N = 3$ with $c_1 = 0, c_2 = c$, and $c_3 = -ce^{-c^2/2}$, while $X_i = -c_i$, where again $c^2 = H/(2h_*)$. It is depicted in Fig. 9.15.

12.5 Fermions

In this chapter we reformulate the basic constructions of Chapters 2 and 6 for fermionic particles. To this end, we introduce Grassmann variables and integrals and formulate the fermionic evolution operator on the closed time contour as a coherent state functional integral. We then use it to introduce the fermion Green functions, perturbation theory, and kinetic equation.

12.5.1 10.1 Grassmann Variables and Integrals

Following the same route as in Section 2.1, we start by considering a single quantum level occupied by fermionic particles. Due to the Pauli principle one may have either zero or one fermion in such a state and therefore the entire many-body space is spanned by two orthonormal basis states, $|0\rangle$ and $|1\rangle$. It is convenient to introduce fermionic annihilation and creation operators, $\hat{c}$ and $\hat{c}^\dagger$, which operate in this many-body Hilbert space according to the following rules:

$$\hat{c}|0\rangle = 0; \quad \hat{c}|1\rangle = |0\rangle; \quad \hat{c}^\dagger|0\rangle = |1\rangle; \quad \hat{c}^\dagger|1\rangle = 0. \quad (10.1)$$

One may notice the following properties of these operators

$$\hat{c}^\dagger \hat{c}|n\rangle = n|n\rangle; \quad \{\hat{c}, \hat{c}^\dagger\} = \hat{1}; \quad \hat{c}^2 = (\hat{c}^\dagger)^2 = 0 \quad (10.2)$$

where the curly brackets denote the anti-commutator $\{\hat{c}, \hat{c}^\dagger\} = \hat{c}\hat{c}^\dagger + \hat{c}^\dagger\hat{c}$ and $n = 0, 1$.

To introduce fermionic coherent states, one needs an algebra of anti-commuting Grassmann numbers. Those are the objects, denoted by $\psi, \psi', \dots$, which formally satisfy the following multiplication rules:

$$\psi\psi' = -\psi'\psi; \quad \psi^2 = 0, \quad f(\psi) = f_0 + f_1\psi \quad (10.3)$$

where $f(\psi)$ is an arbitrary function of the Grassmann ψ , which is defined by its first two Taylor expansion coefficients. Similarly, for a function of two variables one has $f(\psi, \psi') = f_{00} + f_{10}\psi + f_{01}\psi' + f_{11}\psi\psi'$, and so on. This fact allows us to introduce derivatives in the natural way, that is, $\partial\psi/\partial\psi = 1$ and therefore $\partial f(\psi)/\partial\psi = f_1$. Notice that the derivatives anti-commute, indeed

$$\frac{\partial}{\partial\psi} \frac{\partial}{\partial\psi'} f(\psi, \psi') = \frac{\partial}{\partial\psi} (f_{01} - f_{11}\psi) = -f_{11} = -\frac{\partial}{\partial\psi'} \frac{\partial}{\partial\psi} f(\psi, \psi').$$

We shall also need the concept of integration over the Grassmann variables [212], which is defined as

$$\int d\psi 1 = 0; \quad \int d\psi \psi = 1 \quad (10.4)$$

We stress that this is a definition, which can't be derived from "first principles." It is also convenient to agree that Grassmann numbers anti-commute with the fermionic annihilation and creation operators, that is,

$$\{\psi, \hat{c}\} = \{\psi, \hat{c}^\dagger\} = 0$$

By analogy with bosons, a fermionic coherent state is defined as an eigenstate of the annihilation operator $\hat{c}$. Since the Hilbert space has only two basis vectors, it must be a linear superposition of $|0\rangle$ and $|1\rangle$. It is easy to see that such a linear combination may not have ordinary numbers as coefficients, indeed $\hat{c}(x|0\rangle + y|1\rangle) = y|0\rangle \neq \lambda(x|0\rangle + y|1\rangle)$, unless $y = 0$ and then the eigenvalue is zero too. The difficulty may be avoided by using Grassmann numbers. Indeed, consider a state parametrized by the Grassmann number ψ ,

$$|\psi\rangle = |0\rangle - \psi|1\rangle = (1 - \psi\hat{c}^\dagger)|0\rangle = e^{-\psi\hat{c}^\dagger}|0\rangle. \quad (10.5)$$

Then $\hat{c}|\psi\rangle = -\hat{c}\psi|1\rangle = \psi|0\rangle = \psi|\psi\rangle$, and therefore the state $|\psi\rangle$ is indeed an eigenstate of the fermionic annihilation operator with the Grassmann eigenvalue ψ . In an analogous way we define the left coherent state $\langle\psi|$ as a left eigenstate of $\hat{c}^\dagger$ with the Grassmann eigenvalue $\bar{\psi}$,

$$\langle \psi | = \langle 0 | e^{-\hat{c}\bar{\psi}} = \langle 0 | (1 - \hat{c}\bar{\psi}) = \langle 0 | - \langle 1 | \bar{\psi}. \quad (10.6)$$

Indeed $\langle \psi | c^\dagger = (\langle 0 | - \langle 1 | \bar{\psi}) c^\dagger = \langle 0 | \bar{\psi} = \langle \psi | \bar{\psi}$. Here $\bar{\psi}$ is just another Grassmann number, completely unrelated to ψ , which we use to parametrize left states. The set of coherent states is not orthonormal and the overlap of any two coherent states is

$$\langle \psi | \psi' \rangle = (\langle 0 | - \langle 1 | \bar{\psi}) (|0\rangle - \psi' |1\rangle) = 1 + \bar{\psi} \psi' = e^{\bar{\psi} \psi'}. \quad (10.7)$$

One can write a resolution of unity in the fermionic coherent state representation as (compare with the bosonic expression (2.7))

$$\hat{1} = \int d\bar{\psi} \int d\psi e^{-\bar{\psi}\psi} |\psi\rangle \langle \psi|. \quad (10.8)$$

Indeed, employing $e^{-\bar{\psi}\psi} = 1 - \bar{\psi}\psi$ along with Eqs. (10.5) and (10.6) and keeping only the terms which contain both $\bar{\psi}$ and ψ (all others vanish upon integration, Eq. (10.4)), one finds $-\bar{\psi}\psi(|0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1|) = -\bar{\psi}\psi\hat{1}$ for the expression under the integral. Finally, performing the integrations according to Eq. (10.4), one proves Eq. (10.8). (Notice that one has to commute $d\psi$ and $\bar{\psi}$, which brings in a factor of minus one.)

Matrix elements of any normally ordered operator, that is, such that all fermionic creation operators are preceded by the annihilation ones, take the form

$$\langle \psi | \hat{H}(\hat{c}^\dagger, \hat{c}) | \psi' \rangle = H(\bar{\psi}, \psi') \langle \psi | \psi' \rangle = H(\bar{\psi}, \psi') e^{\bar{\psi}\psi'}. \quad (10.9)$$

The trace of an operator $\hat{\mathcal{O}}$ is calculated as

$$\begin{aligned} \text{Tr}\{\hat{\mathcal{O}}\} &= \sum_{n=0,1} \langle n | \hat{\mathcal{O}} | n \rangle = \sum_{n=0,1} \iint d\bar{\psi} d\psi e^{-\bar{\psi}\psi} \langle n | \psi \rangle \langle \psi | \hat{\mathcal{O}} | n \rangle \\ &= \iint d\bar{\psi} d\psi e^{-\bar{\psi}\psi} \sum_{n=0,1} \langle \psi | \hat{\mathcal{O}} | n \rangle \langle n | -\psi \rangle \\ &= \iint d\bar{\psi} d\psi e^{-\bar{\psi}\psi} \langle \psi | \hat{\mathcal{O}} | -\psi \rangle \end{aligned} \quad (10.10)$$

where we have employed resolution of unity first in the coherent state basis and then in the number state basis. The minus sign in $|-\psi\rangle = |0\rangle + \psi|1\rangle$ comes about from commuting left and right coherent states.

We shall also need rules of Gaussian integration over two sets of independent Grassmann variables, $\bar{\psi}_j$ and ψ_j , where $j = 1, 2, \dots, N$. The following identity,

$$Z[\bar{\chi}, \chi] = \int \prod_{j=1}^N [d\bar{\psi}_j d\psi_j] e^{-\sum_{ij} \bar{\psi}_i \hat{A}_{ij} \psi_j + \sum_j [\bar{\psi}_j \chi_j + \bar{\chi}_j \psi_j]} = \det \hat{A} e^{\sum_{ij} \bar{\chi}_i (\hat{A}^{-1})_{ij} \chi_j} \quad (10.11)$$

is valid for any invertible complex matrix $\hat{A}_{ij}$.¹ Here $\bar{\chi}_j$ and χ_j are two additional mutually independent (and independent from $\bar{\psi}_j$ and ψ_j) sets of Grassmann numbers. We first notice that $\int \mathbf{D}[\bar{\psi}\psi] e^{-\sum \bar{\psi} \hat{A} \psi} = \det \hat{A}$ (and not $1/\det \hat{A}$ as is the case for bosons). This follows from the fact that the only nonvanishing term comes from the N th order expansion of the exponent, that is, $(-\sum \bar{\psi}_i \hat{A}_{ij} \psi_j)^N / N!$, since

⁰¹ Actually, for existence of the integral even this restriction is not needed. For example, for $N = 1$ and $A = 0$ one has $Z = \bar{\chi}\chi$. More generally, if matrix $\hat{A}$ has a zero eigenvalue, Z is proportional to the projection of the vector χ on the direction of the corresponding zero-mode eigenfunction.

the number of variables should be exactly equal to the number of integrals. Within this expression only terms with all ψ_j and all $\bar{\psi}_i$ distinct survive the integration. The surviving terms have signs reflecting the parity of permutations, leading directly to $\det \hat{A}$. Finally, one notices that $\bar{\psi}\hat{A}\psi - \bar{\psi}\chi - \bar{\chi}\psi = (\bar{\psi} - \bar{\chi}\hat{A}^{-1})\hat{A}(\psi - \hat{A}^{-1}\chi) - \bar{\chi}\hat{A}^{-1}\chi$ and the shift of integration variables $\psi \rightarrow \psi + \hat{A}^{-1}\chi$ (and similarly for $\bar{\psi}$) works exactly as in ordinary integrals.

The Wick theorem is formulated in a way similar to the complex bosonic case, Eq. (2.21), with the exception that every combination is multiplied by the parity of the corresponding permutation. This follows from the anti-commutativity of the Grassmann derivatives, mentioned previously. For example,

$$\begin{aligned}\langle \psi_a \bar{\psi}_b \rangle &= \frac{1}{Z[0,0]} \frac{\delta^2 Z[\bar{\chi}, \chi]}{\delta \chi_b \delta \bar{\chi}_a} \Big|_{\chi=0} = \hat{A}_{ab}^{-1} \\ \langle \psi_a \psi_b \bar{\psi}_c \bar{\psi}_d \rangle &= \frac{1}{Z[0,0]} \frac{\delta^4 Z[\bar{\chi}, \chi]}{\delta \chi_d \delta \chi_c \delta \bar{\chi}_b \delta \bar{\chi}_a} \Big|_{\chi=0} = -\hat{A}_{ac}^{-1} \hat{A}_{bd}^{-1} + \hat{A}_{ad}^{-1} \hat{A}_{bc}^{-1}\end{aligned}\quad (10.12)$$

Notice that the first term on the right-hand side of the second expression comes with a sign opposite to that in Eq. (2.21).

12.5.2 10.2 Partition Function

Consider a single quantum state with energy ϵ_0 . This state is populated by spinless fermions (i.e. particles obeying the Pauli exclusion principle). In fact, one may have either zero or one particle in this state. The secondary quantized Hamiltonian of such a system has the form

$$\hat{H} = \epsilon_0 \hat{c}^\dagger \hat{c} \quad (10.13)$$

where $\hat{c}^\dagger$ and $\hat{c}$ are creation and annihilation operators of fermions on the state ϵ_0 .

One can consider the evolution operator along the closed time contour, $\mathcal{C}$ and the corresponding partition function, $Z = 1$, defined in exactly the same way as for bosonic systems, Eq. (2.13). The trace of the equilibrium density matrix is $\text{Tr} \{\hat{\rho}_0\} = 1 + \rho(\epsilon_0)$, where the two terms stand for the empty and singly occupied states. One divides the contour into $(2N - 2)$ time intervals, Fig. 2.1, of length $\delta_t \sim 1/N \rightarrow 0$, and introduces fermionic resolutions of unity in $2N$ points along the contour, $\mathcal{C}$, in the form (10.8). The rest of the algebra goes through exactly as in the bosonic case; see Section 2.2. As a result, one arrives at

$$Z = \frac{1}{\text{Tr} \{\hat{\rho}_0\}} \iint \prod_{j=1}^{2N} [d\bar{\psi}_j d\psi_j] \exp \left(i \sum_{j,j'=1}^{2N} \bar{\psi}_j G_{jj'}^{-1} \psi_{j'} \right) \quad (10.14)$$

where the $2N \times 2N$ matrix $G_{jj'}^{-1}$ is (for $N = 3$)

$$iG_{jj'}^{-1} \equiv \left[\begin{array}{cc|cc} -1 & & & -\rho(\epsilon_0) \\ h_- & -1 & & \\ & h_- & -1 & \\ \hline & & 1 & -1 \\ & & h_+ & -1 \\ & & & h_+ & -1 \end{array} \right] \quad (10.15)$$

where $h_\mp \equiv 1 \mp i\epsilon_0 \delta_t$. The main diagonal of this matrix originates from the resolutions of unity, Eq. (10.8), while the lower sub-diagonal comes from the matrix elements (10.9). Finally, the upper right element is $\langle \psi_1 | \hat{\rho}_0 | -\psi_{2N} \rangle$; compare Eq. (2.16). The only difference from the bosonic case is the negative sign in front of the $\rho(\epsilon_0)$ matrix element, originating from the

minus sign in the $|\psi_{2N}\rangle$ coherent state in the expression (10.10) for the fermionic trace. To check the normalization identity, let us evaluate the determinant of such a matrix:

$$\det [\hat{G}^{-1}] = 1 + \rho(\epsilon_0) (1 - h^2)^{N-1} \approx 1 + \rho(\epsilon_0) e^{(\epsilon_0 \delta t)^2 (N-1)} \xrightarrow{N \rightarrow \infty} 1 + \rho(\epsilon_0) \quad (10.16)$$

Employing the fact, Eq. (10.11), that the fermionic Gaussian integral is given by the determinant (unlike the inverse determinant for bosons) of the correlation matrix (10.15), one finds

$$Z = \frac{\det [\hat{G}^{-1}]}{\text{Tr} \{\hat{\rho}_0\}} = 1 \quad (10.17)$$

as it should be. Once again, the upper right element of the discrete matrix (10.15) is crucial for maintaining the correct normalization. Taking the limit $N \rightarrow \infty$ and introducing the continuum notation, $\psi_j \rightarrow \psi(t)$, one obtains

$$Z = \int \mathbf{D}[\bar{\psi}\psi] \exp(iS[\bar{\psi}, \psi]) = \int \mathbf{D}[\bar{\psi}\psi] \exp\left(i \int_{\mathcal{C}} dt [\bar{\psi}(t) \hat{G}^{-1} \psi(t)]\right) \quad (10.18)$$

where according to (10.14) and (10.15) the action is given by

$$S[\bar{\psi}, \psi] = \sum_{j=2}^{2N} \left[i\bar{\psi}_j \frac{\psi_j - \psi_{j-1}}{\delta t_j} - \epsilon_0 \bar{\psi}_j \psi_{j-1} \right] \delta t_j + i\bar{\psi}_1 [\psi_1 + \rho(\epsilon_0) \psi_{2N}] \quad (10.19)$$

with $\delta t_j \equiv t_j - t_{j-1} = \pm \delta t$, where $\pm$ signs correspond to the forward and backward branches of the time contour. Thus, the continuum form of the operator $\hat{G}^{-1}$ is the same as for bosons, Eq. (2.29): $\hat{G}^{-1} = i\partial_t - \epsilon_0$. Again, the upper right element of the discrete matrix (the last term in Eq. (10.19)), which contains information about the distribution function, is seemingly absent in the continuum notation.

Splitting the Grassmann field $\psi(t)$ into the two components $\psi^+(t)$ and $\psi^-(t)$ that reside on the forward and backward parts of the time contour, respectively, one may rewrite the action as

$$S[\bar{\psi}, \psi] = \int_{-\infty}^{+\infty} dt [\bar{\psi}^+(t) (i\partial_t - \epsilon_0) \psi^+(t) - \bar{\psi}^-(t) (i\partial_t - \epsilon_0) \psi^-(t)] \quad (10.20)$$

where the dynamics of ψ^+ and ψ^- are actually not independent from each other, owing to the presence of nonzero off-diagonal blocks in the discrete matrix (10.15).

12.5.3 10.3 Green Functions and Keldysh Rotation

The four fermionic Green functions: $G^{\mathbb{T}(\tilde{\mathbb{T}})}$ and $G^{<(>)}$ are defined in the same way as their bosonic counterparts; see Eq. (2.33). Inverting the discrete matrix (10.15), as required by the Gaussian identity (10.12), and going to the continuum limit, one finds (cf. Eq. (2.35)),

$$\langle \psi^+(t) \bar{\psi}^-(t') \rangle \equiv iG^<(t, t') = -n_F \exp\{-i\epsilon_0(t - t')\} \quad (10.21a)$$

$$\langle \psi^-(t) \bar{\psi}^+(t') \rangle \equiv iG^>(t, t') = (1 - n_F) \exp\{-i\epsilon_0(t - t')\} \quad (10.21b)$$

$$\langle \psi^+(t) \bar{\psi}^+(t') \rangle \equiv iG^{\mathbb{I}}(t, t') = \theta(t - t') iG^>(t, t') + \theta(t' - t) iG^<(t, t') \quad (10.21c)$$

$$\langle \psi^-(t) \bar{\psi}^-(t') \rangle \equiv iG^{\tilde{\mathbb{I}}}(t, t') = \theta(t' - t) iG^>(t, t') + \theta(t - t') iG^<(t, t') \quad (10.21d)$$

The difference from bosons is in the minus sign in the expression for $G^<$, due to the anti-commutation relations, and Bose occupation number is exchanged for the Fermi occupation number: $n_B \rightarrow n_F \equiv \rho(\epsilon_0) / (1 + \rho(\epsilon_0))$. Equation (10.22)

$$G^{\mathbb{I}}(t, t') + G^{\mathbb{T}}(t, t') - G^>(t, t') - G^<(t, t') = 0 \quad (10.22)$$

holds for the fermion fermionic Green functions in the same sense as for the boson ones; see the discussion following Eq. (2.38). Thus, one would like to perform the Keldysh rotation to take advantage of this relation.

It is customary to perform the Keldysh rotation in the fermionic case in a different manner from the bosonic one. Define the new fields as

$$\psi_1(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi^+(t) + \psi^-(t)), \quad \psi_2(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi^+(t) - \psi^-(t)). \quad (10.23)$$

Following Larkin and Ovchinnikov [28], it is agreed that the bar fields transform in a different way:

$$\bar{\psi}_1(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\bar{\psi}^+(t) - \bar{\psi}^-(t)), \quad \bar{\psi}_2(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\bar{\psi}^+(t) + \bar{\psi}^-(t)). \quad (10.24)$$

Since the Grassmann fields $\bar{\psi}$ are not conjugated to ψ , but rather are completely independent fields, they may be transformed in an arbitrary manner (as long as the transformation matrix has a nonzero determinant). Notice that there is no issue regarding the convergence of the integrals, since the Grassmann integrals are always convergent. We also avoid the superscripts cl and q, because the Grassmann variables never have a classical meaning. Indeed, one can never write a stationary point or any other equation in terms of $\bar{\psi}, \psi$; rather, they must always be integrated out at some stage of the calculations.

Employing Eqs. (10.23) and (10.24) along with Eqs. (10.21), one finds

$$-i \langle \psi_a(t) \bar{\psi}_b(t') \rangle = \hat{G}_{ab}(t, t') = \begin{pmatrix} G^{\text{R}}(t, t') & G^{\text{K}}(t, t') \\ 0 & G^{\text{A}}(t, t') \end{pmatrix}, \quad (10.25)$$

where hereafter $a, b = 1, 2$. The fact that the $(2, 1)$ element of this matrix is zero is a manifestation of the identity (10.22). The retarded, advanced, and Keldysh components of the Green function (10.25) are expressed in terms of $G^{\text{T}(\mathbb{T})}$ and $G^{<(>)}$ in exactly the same way as their bosonic analogs, Eqs. (2.41):

$$G^{\text{R}}(t, t') = G^{1,1}(t, t') = \frac{1}{2} (G^{\mathbb{T}} - G^{\mathbb{U}} + G^> - G^<) = \theta(t - t') (G^> - G^<), \quad (10.26a)$$

$$G^{\text{A}}(t, t') = G^{2,2}(t, t') = \frac{1}{2} (G^{\mathbb{T}} - G^{\mathbb{U}} - G^> + G^<) = \theta(t' - t) (G^< - G^>), \quad (10.26b)$$

$$G^{\text{K}}(t, t') = G^{1,2}(t, t') = \frac{1}{2} (G^{\mathbb{T}} + G^{\mathbb{U}} + G^> + G^<) = G^> + G^<. \quad (10.26c)$$

They therefore possess the same symmetry properties, Eqs. (2.42)-(2.45). In particular,

$$G^{\text{A}} = [G^{\text{R}}]^{\dagger}, \quad G^{\text{K}} = -[G^{\text{K}}]^{\dagger} \quad (10.27)$$

where the Green functions are understood as matrices in the time domain and the Hermitian conjugation includes complex conjugation along with interchanging of the two time arguments. Both retarded and advanced matrices have nonzero main diagonals, that is, $t = t'$, which are opposite to each other:

$$G^R(t, t) + G^A(t, t) = 0; \quad \int \frac{d\epsilon}{2\pi} [G^R(\epsilon) + G^A(\epsilon)] = 0. \quad (10.28)$$

This equation is not restricted to our toy model, but is completely general. An important consequence of Eq. (10.28) is

$$\text{Tr} \left\{ \hat{G}^{(1)} \circ \hat{G}^{(2)} \circ \dots \circ \hat{G}^{(l)} \right\} (t, t) = 0 \quad (10.29)$$

where the circular multiplication sign involves convolution in the time domain along with the 2×2 matrix multiplication. The argument (t, t) states that the first time argument of $\hat{G}^{(1)}$ and the last time argument of $\hat{G}^{(l)}$ are the same.

Note that the fermionic Green function has a different structure compared to its bosonic counterpart, Eq. (2.40), that is, positions of the R, A, and K components in the matrix are exchanged. The reason, of course, is the different convention for transformation of the bar fields. One could choose the fermionic convention to be the same as the bosonic (but not the other way around), thus having the same structure (2.40) for the fermions as for the bosons. The rationale for the LarkinOvchinnikov choice (10.25) is that the inverse Green function, $\hat{G}^{-1}$ and fermionic self-energy $\hat{\Sigma}_F$ have the same appearance as $\hat{G}$, namely

$$\hat{G}^{-1} = \begin{pmatrix} [G^R]^{-1} & [G^{-1}]^K \\ 0 & [G^A]^{-1} \end{pmatrix}, \quad \hat{\Sigma} = \begin{pmatrix} \Sigma^R & \Sigma^K \\ 0 & \Sigma^A \end{pmatrix} \quad (10.30)$$

whereas in the case of bosons $\hat{G}^{-1}$ (see Eq. (2.51)) and $\hat{\Sigma}$ (see Eq. (6.17)) look different from $\hat{G}$ (see Eq. (2.40)). This fact gives the form (10.25) and (10.30) a certain technical advantage.

For the single fermionic state, after the Keldysh rotation, the Green functions (10.21) allow us to find components of the matrix (10.25):

$$G^R(t, t') = -i\theta(t - t') e^{-i\epsilon_0(t-t')} \xrightarrow{\text{FT}} (\epsilon - \epsilon_0 + i0)^{-1}, \quad (10.31a)$$

$$G^A(t, t') = i\theta(t' - t) e^{-i\epsilon_0(t-t')} \xrightarrow{\text{FT}} (\epsilon - \epsilon_0 - i0)^{-1}, \quad (10.31b)$$

$$G^K(t, t') = -i(1 - 2n_F) e^{-i\epsilon_0(t-t')} \xrightarrow{\text{FT}} -2\pi i(1 - 2n_F) \delta(\epsilon - \epsilon_0), \quad (10.31c)$$

where the right-hand sides provide also the Fourier transforms with respect to $t - t'$. In thermal equilibrium $n_F(\epsilon) = (e^{(\epsilon - \mu)/T} + 1)^{-1}$ and one obtains

$$G^K(\epsilon) = \tanh \frac{\epsilon - \mu}{2T} [G^R(\epsilon) - G^A(\epsilon)] \quad (10.32)$$

This is the FDT for fermions. As in the case of bosons, the FDT is a generic feature of an equilibrium system, not restricted to the toy model. In general, it is convenient to parametrize the anti-Hermitian Keldysh Green function by a Hermitian matrix $F = F^\dagger$ as

$$G^K = G^R \circ F - F \circ G^A \quad (10.33)$$

The Wigner transform of $F = 1 - 2n_F$ is the fermionic distribution function. Equation (10.33) allows one to rewrite the fermionic Green function (10.25) in the following convenient form:

$$\hat{G} = \begin{pmatrix} G^R & G^K \\ 0 & G^A \end{pmatrix} = \hat{\mathcal{U}}^{-1} \circ \begin{pmatrix} G^R & 0 \\ 0 & G^A \end{pmatrix} \circ \hat{\mathcal{U}}, \quad \hat{\mathcal{U}} = \begin{pmatrix} 1 & F \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = e^{\hat{\sigma}_+ F}, \quad (10.34)$$

where $\hat{\sigma}_+ = (\hat{\sigma}_1 + i\hat{\sigma}_2)/2$ is acting in the Keldysh space.

12.5.4 10.4 Free Fermionic Fields and Their Action

One may proceed now to a system with many degrees of freedom. We shall assume that they are labeled by a momentum index $\mathbf{k}$ and spin index $\sigma = \uparrow, \downarrow = \pm 1$. To this end, one changes $\epsilon_0 \rightarrow \epsilon_{\mathbf{k},\sigma} = \mathbf{k}^2/(2m) + H_Z\sigma$, where H_Z is a Zeeman magnetic field,² and performs summations over $\mathbf{k}$ and σ . It is instructive to transform to the coordinate space representation $\psi_\sigma(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}} \psi_\sigma(\mathbf{k}, t)e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$, while $\bar{\psi}_\sigma(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}} \bar{\psi}_\sigma(\mathbf{k}, t)e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}$. Although $\bar{\psi}$ is not a complex conjugate of ψ , but is rather an independent Grassmann number, we choose the opposite Fourier transform convention, as if they are mutual complex conjugates. Then $\mathbf{k}^2/(2m) \rightarrow -\nabla_{\mathbf{r}}^2/(2m)$ and the Keldysh action for a noninteracting gas of fermions takes the form

$$S_0[\bar{\psi}, \psi] = \sum_{\sigma, \sigma'} \iint dx \, dx' \sum_{a,b=1}^2 \bar{\psi}_{a,\sigma}(x) \left[\hat{G}_{\sigma\sigma'}^{-1}(x, x') \right]^{ab} \psi_{b,\sigma'}(x'), \quad (10.35)$$

where $x = (\mathbf{r}, t)$ and the matrix correlator $\left[\hat{G}^{-1} \right]^{ab}$ has the structure (10.30) with

$$\left[G_{\sigma\sigma'}^{\text{R(A)}}(x, x') \right]^{-1} = \delta(x - x') \left(i\partial_t + \frac{1}{2m} \nabla_{\mathbf{r}}^2 - \mathbf{H}_Z \cdot \vec{s}_{\sigma\sigma'} \pm i0 \right), \quad (10.36)$$

where $\vec{s}_{\sigma\sigma'}$ is the usual three-component vector of Pauli matrices in spin space. Although in continuum notation the R and A components seem to be the same, one has to remember that in the discrete time representation they are matrices with structure below and above the main diagonal, respectively. The Keldysh component is a pure regularization, in the sense that it does not have a continuum limit. (The Keldysh component of the self-energy does have a nonzero continuum representation.) All this information is already properly taken into account in the structure of the Green function (10.25). The explicit form of the bare fermionic Green functions is

$$G_{\sigma\sigma'}^{\text{R(A)}}(\mathbf{k}, \epsilon) = \delta_{\sigma\sigma'} (\epsilon - \epsilon_{\mathbf{k},\sigma} \pm i0)^{-1} \quad (10.37a)$$

$$G_{\sigma\sigma'}^{\text{K}}(\mathbf{k}, \epsilon) = -2\pi i \delta_{\sigma\sigma'} F(\epsilon) \delta(\epsilon - \epsilon_{\mathbf{k},\sigma}) \quad (10.37b)$$

where $F(\epsilon) = 1 - 2n_F(\epsilon)$. In general, the Keldysh component of the Green function may be parametrized by the Hermitian matrix $F_{\sigma\sigma'}(x, x')$,

$$G_{\sigma\sigma'}^{\text{K}}(x, x') = \sum_{\sigma''} \int dx'' \left[G_{\sigma\sigma''}^{\text{R}}(x, x'') F_{\sigma''\sigma'}(x'', x') - F_{\sigma\sigma''}(x, x'') G_{\sigma''\sigma'}^{\text{A}}(x'', x') \right] \quad (10.38)$$

Projecting its Wigner transform onto the four Pauli matrices, one may define $F(x, p) = \text{Tr} \{ F_{\sigma\sigma'}(x, p) \}$ and $\mathbf{F}^\mu(x, p) = \text{Tr} \{ F_{\sigma\sigma'}(x, p) \hat{s}_{\sigma'\sigma}^\mu \}$ (where $\mu = x, y, z$), as the distribution functions of the fermionic density and the spin-density, respectively. One should not be alarmed that all components of the spin are determined simultaneously. This has the same semiclassical interpretation as the simultaneous specification of $x = (\mathbf{r}, t)$ and $p = (\mathbf{k}, \epsilon)$.

12.5.5 10.5 External Fields and Sources

According to the basic idea of the Keldysh technique, the partition function $Z = 1$ is normalized by construction; see Eq. (10.17). To make the entire theory meaningful one should introduce auxiliary source fields, which enable one to compute various observable quantities:

⁰² We have absorbed the factor $\hbar e/mc$ into the magnetic field units.

density of particles, currents, and so on. For example, one may introduce an external time-dependent scalar potential $V(\mathbf{r}, t)$ defined along the contour $\mathcal{C}$. Its interaction with the fermion density leads to the action $S_V = - \int d\mathbf{r} \int_{\mathcal{C}} dt V(\mathbf{r}, t) \bar{\psi}(\mathbf{r}, t) \psi(\mathbf{r}, t)$, where we have suppressed the spin index for brevity. Expressing it via the field components residing on the forward and backward contour branches, one finds

$$\begin{aligned} S_V &= - \int d\mathbf{r} \int_{-\infty}^{+\infty} dt [V^+ \bar{\psi}^+ \psi^+ - V^- \bar{\psi}^- \psi^-] = -2 \int d\mathbf{r} dt [V^{\text{cl}} \rho^{\text{q}} + V^{\text{q}} \rho^{\text{cl}}] \\ &= - \int d\mathbf{r} dt [V^{\text{cl}} (\bar{\psi}_1 \psi_1 + \bar{\psi}_2 \psi_2) + V^{\text{q}} (\bar{\psi}_1 \psi_2 + \bar{\psi}_2 \psi_1)] \end{aligned} \quad (10.39)$$

where the $V^{\text{cl(q)}}(\mathbf{r}, t)$ components are defined in the standard way for real boson fields, $V^{\text{cl(q)}} = (V^+ \pm V^-)/2$. The physical density of fermions (symmetrized over the two branches of the contour), given by $\rho^{\text{cl}} = \frac{1}{2} (\bar{\psi}^+ \psi^+ + \bar{\psi}^- \psi^-)$, is coupled to the quantum component of the source field, V^{q} . On the other hand, the quantum component of density, defined as $\rho^{\text{q}} = \frac{1}{2} (\bar{\psi}^+ \psi^+ - \bar{\psi}^- \psi^-)$, is coupled to the classical source component, V^{cl} , which is nothing but an external physical scalar potential, the same on the two branches. In the last line of Eq. (10.39) we performed rotation from $\psi^{\pm}$ to $\psi_{1(2)}$ according to Eqs. (10.23) and (10.24).

The notation may be substantially compactified by introducing two vertex fermionic $\hat{\gamma}$ -matrices:

$$\hat{\gamma}^{\text{cl}} \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \hat{\gamma}^{\text{q}} \equiv \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (10.40)$$

With the help of these definitions, the source action (10.39) may be written as

$$S_V = - \int d\mathbf{r} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \sum_{a,b=1}^2 [V^{\text{cl}} \bar{\psi}_a \gamma_{ab}^{\text{cl}} \psi_b + V^{\text{q}} \bar{\psi}_a \gamma_{ab}^{\text{q}} \psi_b] = - \text{Tr} \{ \vec{\Psi} \hat{V} \vec{\Psi} \} \quad (10.41)$$

where we have introduced the Keldysh doublet $\vec{\Psi}$ and matrix $\hat{V}$, defined as

$$\vec{\Psi} = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}, \quad \hat{V} = V^{\alpha} \hat{\gamma}^{\alpha} = \begin{pmatrix} V^{\text{cl}} & V^{\text{q}} \\ V^{\text{q}} & V^{\text{cl}} \end{pmatrix} \quad (10.42)$$

where $\alpha = (\text{cl}, \text{q})$.

In a similar way one may introduce an external vector potential into the formalism. The corresponding part of the action ${}^3S_A = - \int d\mathbf{r} \int_{\mathcal{C}} dt \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$ represents the coupling between $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ and the fermion current density defined as $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2mi} [\bar{\psi}(\mathbf{r}, t) \nabla_{\mathbf{r}} \psi(\mathbf{r}, t) - \nabla_{\mathbf{r}} \bar{\psi}(\mathbf{r}, t) \psi(\mathbf{r}, t)]$. By splitting $\int_{\mathcal{C}} dt$ into forward and backward parts and performing Keldysh rotation, one finds by analogy with the scalar potential case (10.39) that

$$S_A = - \text{Tr} \{ \vec{\Psi} \hat{\mathbf{A}} \mathbf{v}_F \vec{\Psi} \}, \quad \hat{\mathbf{A}} = \mathbf{A}^{\alpha} \hat{\gamma}^{\alpha} = \begin{pmatrix} \mathbf{A}^{\text{cl}} & \mathbf{A}^{\text{q}} \\ \mathbf{A}^{\text{q}} & \mathbf{A}^{\text{cl}} \end{pmatrix} \quad (10.43)$$

We have linearized the fermionic dispersion relation near the Fermi energy and employed the fact that $-i\nabla_{\mathbf{r}} \approx \mathbf{k}_F$ and $\mathbf{v}_F = \mathbf{k}_F/m$.

Let us now define the generating function as

$$Z [V^{\text{cl}}, V^{\text{q}}] \equiv \langle \exp(iS_V) \rangle, \quad (10.44)$$

where the angular brackets denote the functional integration over the Grassmann fields $\bar{\psi}$ and ψ with weight $\exp(iS_0)$, specified by the fermionic action (10.35). In the absence of

the quantum component, $V^q = 0$, the source field is the same on both branches of the time contour. Therefore, the evolution along the contour brings the system back to its exact original state. Thus, one expects that the classical component alone does not change the fundamental normalization identity, $Z = 1$. As a result,

$$Z[V^{\text{cl}}, 0] \equiv 1 \quad (10.45)$$

as we already discussed in Chapter 2; see Eq. (2.63). Indeed, one may verify this statement explicitly by expanding the generating function (10.44) in powers of V^{cl} and employing the Wick theorem. For example, to first order in V^{cl} one finds $Z[V^{\text{cl}}, 0] = 1 - \int dt V^{\text{cl}}(t) \text{Tr}[\hat{\gamma}^{\text{cl}} \hat{G}(t, t)] + \dots = 1$, where one uses that $\hat{\gamma}^{\text{cl}} = \hat{1}$ along with Eq. (10.29). It is straightforward to see that for exactly the same reasons all higher-order terms in V^{cl} vanish as well.

A lesson from Eq. (10.45) is that one necessarily has to introduce quantum sources (which change sign between the forward and backward branches of the contour). The presence of such source fields explicitly violates causality, thus making the generating function nontrivial. On the other hand, these fields usually do not have a physical meaning and play only an auxiliary role. In most cases one uses them to generate observables by an appropriate differentiation. Indeed, as was mentioned, the physical density is coupled to the quantum component of the source. In the end, one takes the quantum sources to be zero, restoring the causality of the action. Note that the classical component, V^{cl} , does not have to be taken to zero.

Let us see how it works. Suppose one is interested in an average fermion density $\rho^{\text{cl}}(x)$ at a space-time point x in the presence of a certain physical scalar potential V^{cl} . According to Eqs. (10.39) and (10.44) it is given by

$$\rho^{\text{cl}}(x; V^{\text{cl}}) = \frac{i}{2} \frac{\delta}{\delta V^q(x)} Z[V^{\text{cl}}, V^q] \Big|_{V^q=0} \quad (10.46)$$

where $x = (\mathbf{r}, t)$. The problem is simplified if the external field, V^{cl} , is weak in some sense. One may then restrict oneself to the linear response, by defining the polarization (or susceptibility)

$$\Pi^{\text{R}}(x, x') \equiv - \frac{\delta \rho^{\text{cl}}(x; V^{\text{cl}})}{\delta V^{\text{cl}}(x')} \Big|_{V^{\text{cl}}=0} = - \frac{i}{2} \frac{\delta^2 Z[V^{\text{cl}}, V^q]}{\delta V^{\text{cl}}(x') \delta V^q(x)} \Big|_{V^q=V^{\text{cl}}=0}. \quad (10.47)$$

We add the superscript R, anticipating on physical grounds that the response function must be retarded (causality). We shall demonstrate it shortly. According to Eqs. (10.39) and (10.44), the response function (10.47) is given by

$$\Pi^{\text{R}}(x, x') = 2i \langle \rho^{\text{cl}}(x) \rho^q(x') \rangle, \quad \delta \rho^{\text{cl}}(x; V^{\text{cl}}) = - \int dx' \Pi^{\text{R}}(x, x') V^{\text{cl}}(x'), \quad (10.48)$$

where the angular brackets again denote averaging with the fermionic action without the sources. This is the Kubo formula for the linear response.

In a similar way let us introduce the polarization matrix as

$$\hat{\Pi}^{\alpha\beta}(x, x') \equiv - \frac{i}{2} \frac{\delta^2 \ln Z[\hat{V}]}{\delta V^\beta(x') \delta V^\alpha(x)} \Big|_{\hat{V}=0} = \begin{pmatrix} 0 & \Pi^{\text{A}}(x, x') \\ \Pi^{\text{R}}(x, x') & \Pi^{\text{K}}(x, x') \end{pmatrix} \quad (10.49)$$

Owing to the normalization identity, Eq. (10.45), the logarithm is redundant for the R and A components and therefore the two definitions (10.47) and (10.49) are in agreement.

⁰³ The vector source $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ that we are using here differs from the actual vector potential by a factor of e/c . However, we refer to it as the vector potential and restore electron charge only in the final expressions.

The fact that $\Pi^{\text{cl,cl}} = 0$ is obvious from Eq. (10.45). To evaluate the polarization matrix, $\hat{\Pi}$, consider the Gaussian action (10.35). Adding the source term (10.41), one finds $S_0 + S_V = \int dx \bar{\Psi} [\hat{G}^{-1} - V^\alpha \hat{\gamma}^\alpha] \bar{\Psi}$. Integrating over the

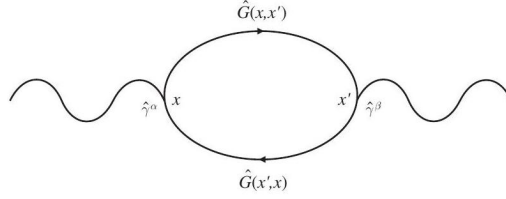


Figure 10.1 Polarization matrix $\hat{\Pi}_0^{\alpha\beta}(x, x')$: each solid line stands for the fermion matrix Green function (10.25), wavy lines represent external classical or quantum potentials $V^{\text{cl(q)}}$, and $x = (\mathbf{r}, t)$. The loop diagram is a graphic representation of the trace in Eq. (10.51).

Grassmann fields $\bar{\psi}, \psi$, one obtains according to the Gaussian identity (10.11) (cf. Eq. (2.68))

$$Z[V] = \frac{\det [\hat{G}^{-1} - iV^\alpha \hat{\gamma}^\alpha]}{\text{Tr} \{\hat{\rho}_0\}} = \det [\hat{1} - \hat{G}V^\alpha \hat{\gamma}^\alpha] = e^{\text{Tr} \ln [\hat{1} - \hat{G}V^\alpha \hat{\gamma}^\alpha]} \quad (10.50)$$

where Eq. (10.17) has been used. Since $Z[0] = 1$, the normalization is exactly right. One may now differentiate $\ln Z = \text{Tr} \ln [\hat{1} - \hat{G}V^\alpha \hat{\gamma}^\alpha]$ over V^α , according to Eq. (10.49). As a result, one finds for the polarization matrix of the Gaussian (i.e. noninteracting) fermions

$$\hat{\Pi}_0^{\alpha\beta}(x, x') = \frac{i}{2} \text{Tr} \left\{ \hat{\gamma}^\alpha \hat{G}(x, x') \hat{\gamma}^\beta \hat{G}(x', x) \right\}, \quad (10.51)$$

which has a transparent diagrammatic representation, Fig. 10.1.

Substituting the explicit form of the gamma matrices (10.40) and the Green functions (10.25), one obtains the response and correlation components of the polarization matrix ⁴

$$\Pi_0^{\text{R(A)}}(x, x') = \frac{i}{2} \left(G^{\text{R(A)}}(x, x') G^K(x', x) + G^K(x, x') G^{\text{A(R)}}(x', x) \right), \quad (10.52a)$$

$$\Pi_0^K(x, x') = \frac{i}{2} \left(G^K(x, x') G^K(x', x) + G^{\text{R}}(x, x') G^{\text{A}}(x', x) + G^{\text{A}}(x, x') G^{\text{R}}(x', x) \right). \quad (10.52b)$$

Notice the opposite sign of the fermionic polarization loop with respect to its bosonic analog, Eqs. (7.22)-(7.24) and Eq. (8.53). From the first line here and the properties of the Green functions it is obvious that $\Pi^{\text{R(A)}}(x, x')$ is indeed a lower (upper) triangular matrix in the time domain, justifying their superscripts. Moreover, from the symmetry properties of the fermionic Green functions

one finds $\Pi^{\text{R}} = [\Pi^{\text{A}}]^\dagger$ and $\Pi^K = -[\Pi^K]^\dagger$. Due to causality, one may write $G_{(x,x')}^{\text{R}} G_{(x',x)}^{\text{A}} + G_{(x,x')}^{\text{A}} G_{(x',x)}^{\text{R}} = - \left(G_{(x,x')}^{\text{R}} - G_{(x,x')}^{\text{A}} \right) \left(G_{(x',x)}^{\text{R}} - G_{(x',x)}^{\text{A}} \right)$ in Eq. (10.52b); indeed $G_{(t,t')}^{\text{R(A)}} G_{(t',t)}^{\text{R(A)}} = 0$. Employing then Eq. (10.32) along with the identity $\tanh(a) \tanh(b) - 1 = \coth(a-b) [\tanh(b) - \tanh(a)]$, one finds that in thermal equilibrium the $\hat{\Pi}(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t - t')$ matrix obeys bosonic FDT

$$\Pi^K(\mathbf{q}, \omega) = \coth \frac{\omega}{2T} [\Pi^{\text{R}}(\mathbf{q}, \omega) - \Pi^{\text{A}}(\mathbf{q}, \omega)] \quad (10.53)$$

As a result, the polarization matrix, $\hat{\Pi}$, possesses all the properties of the bosonic self-energy $\hat{\Sigma}$; see Eq. (6.17). Employing the explicit form (10.37) of the bare Green functions and integrating over energy with the help of the delta-function, one finds for the components of the fermionic polarization matrix

⁴ The fact that $\Pi^{\text{cl,cl}} = 0$ is an immediate consequence of $\hat{\gamma}^{\text{cl}} = \hat{1}$ and Eq. (10.29).

$$\Pi_0^{\text{R(A)}}(\mathbf{q}, \omega) = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \frac{F(\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}) - F(\epsilon_{\mathbf{k}, \sigma})}{\omega \pm i0 + \epsilon_{\mathbf{k}, \sigma} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}} \quad (10.54a)$$

$$\Pi_0^{\text{K}}(\mathbf{q}, \omega) = -i\pi \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \delta(\omega + \epsilon_{\mathbf{k}, \sigma} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}) [F(\epsilon_{\mathbf{k}, \sigma}) F(\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}) - 1] \quad (10.54b)$$

Again, notice the opposite sign in comparison with the corresponding bosonic expressions, Eqs. (7.25). However, in the present case $F = 1 - 2n_{\text{F}}$, while for bosons $F = 2n_{\text{B}} + 1$. As a result, in terms of the occupation numbers n_{FB} , Eqs. (7.25a) and (10.54a) agree, while Eqs. (7.25b) and (10.54b) differ only by a term $\propto n_{\text{F(B)}}^2$. Therefore in the classical limit, where $n_{\text{F}} \approx n_{\text{B}} \approx e^{-(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)/T} \ll 1$, the polarization matrix does not depend on the underlying quantum statistics.

12.5.6 10.6 Free Degenerate Fermi Gas

In view of the last remark, we already know the high-temperature limit of the fermionic polarization matrix. Indeed, it coincides with that of the bosonic one and was evaluated in Section 7.2. Here we focus on the opposite limit of the degenerate electron gas and restrict ourselves to $q \ll k_{\text{F}}$. Then we find for the retarded component of the polarization matrix

$$\Pi_0^{\text{R}}(\mathbf{q}, \omega) = \sum_{\mathbf{k}} \frac{n_{\text{F}}(\mathbf{k}_+) - n_{\text{F}}(\mathbf{k}_-)}{\omega + i0 - \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \mathbf{q}} = \int_{-1}^1 dz \int_0^\infty \frac{k^2 dk}{(2\pi)^2} \frac{n_{\text{F}}(\mathbf{k}_+) - n_{\text{F}}(\mathbf{k}_-)}{\omega + i0 - v_{\text{F}} q z}$$

where we suppressed the spin index, put $\mathbf{k}_{\pm} = \mathbf{k} \pm \mathbf{q}/2$, and introduced notation $z = \cos \theta$ and $\mathbf{v}_{\mathbf{k}} = \mathbf{k}/m$. We also notice that the Fermi occupation numbers are given by $n_{\text{F}}(\mathbf{k}_{\pm}) \approx n_{\text{F}}((k^2 \pm k q z)/2m)$, restricting the integration to the narrow energy strip of width $v_{\text{F}} q z$ around the Fermi energy. We can now go from the momentum integral to the energy one, introducing the density of states (DOS) $\nu(\epsilon) = m\sqrt{2m\epsilon}/2\pi^2$. Since $v_{\text{F}} q \ll \epsilon_{\text{F}}$, we can take the latter as a constant $v \equiv \nu(\epsilon_{\text{F}})$. This way we find for the retarded polarization component

$$\begin{aligned} \Pi_0^{\text{R}}(\mathbf{q}, \omega) &\approx \frac{v}{2} \int_{-1}^1 dz \frac{-v_{\text{F}} q z}{\omega + i0 - v_{\text{F}} q z} \\ &= v \left[1 + \frac{\omega}{2v_{\text{F}} q} \ln \left| \frac{v_{\text{F}} q - \omega}{v_{\text{F}} q + \omega} \right| \right] + i\pi v \frac{\omega}{2v_{\text{F}} q} \theta(v_{\text{F}} q - |\omega|) \end{aligned} \quad (10.55)$$

In this approximation there is only one scale of energy dependence $v_{\text{F}} q$. It misses the effects associated with the smaller scale $q^2/2m$ as well as the temperature T . Those bring corrections to Eq. (10.55), which sometimes are important to keep in mind. First, according to Eq. (10.55), $\Pi_0^{\text{R}}(\mathbf{q}, 0) = \nu$. More careful consideration, which keeps corrections $\sim q/k_{\text{F}}$, shows

$$\Pi_0^{\text{R}}(\mathbf{q}, 0) \approx v \left[1 - q^2 / (12k_{\text{F}}^2) \right]. \quad (10.56)$$

Moreover, according to Eq. (10.55), at $\omega = v_{\text{F}} q$ there is a logarithmic singularity in $\text{Re } \Pi_0^{\text{R}}(\mathbf{q}, \omega)$, while $\text{Im } \Pi_0^{\text{R}}(\mathbf{q}, \omega)$ abruptly drops to zero at the same point. The singularities in the real and imaginary parts are related through the Kramers-Kronig relation. They both are smeared by temperature. In particular, the imaginary part at $\omega \gg v_{\text{F}} q$ is larger than zero, although it is exponentially small. Approximating the Fermi distribution by the Maxwell one, that is, $n_{\text{F}}(\epsilon_{\mathbf{k}}) \approx e^{-(\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\text{F}})/T}$, one finds

$$\text{Im } \Pi_0^R(\mathbf{q}, \omega) \approx \frac{\pi v}{2} \frac{\omega}{v_F q} e^{-\frac{\epsilon_F}{T}} \left[\left(\frac{\omega}{v_F q} \right)^2 - 1 \right] \quad (10.57)$$

This is essentially the classical Landau damping result, Eq. (7.17). The real and imaginary parts of $\Pi_0^R(\mathbf{q}, \omega)$ are plotted in Fig. 10.2 as functions of ω for a fixed $q \ll k_F$. The Keldysh component of the polarization matrix in equilibrium is given by $\Pi_0^K(\mathbf{q}, \omega) = 2i \coth(\omega/2T) \text{Im } \Pi_0^R(\mathbf{q}, \omega)$; see Eq. (10.53).

12.5.7 10.7 Interactions

The normally ordered Hamiltonian of the two-particle fermion-fermion interaction has the form, cf. Eq. (6.11),

$$\hat{H}_{\text{int}} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_{\sigma, \sigma'} U(\mathbf{q}) \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}'\sigma'}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}\sigma'} \hat{c}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}\sigma}, \quad (10.58)$$

where $U(\mathbf{q})$ is the Fourier transform of the interaction potential, which we assume to be spin independent. The corresponding Grassmann action on the closed time contour is

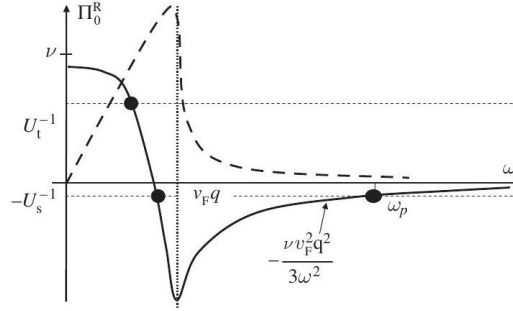


Figure 10.2 Real (full line) and imaginary (dashed line) parts of the retarded polarization component $\Pi_0^R(\mathbf{q}, \omega)$ of a degenerate Fermi gas, as functions of ω at a fixed $q \ll k_F$. Here U_s and U_t are singlet and triplet interaction constants; see Eqs. (10.64) and (10.65).

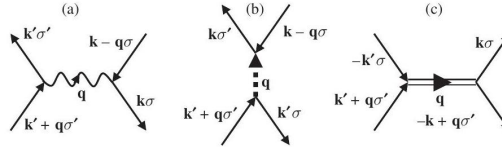


Figure 10.3 Three channels of fermion-fermion interactions, Eq. (10.60): (a) singlet channel, the wave line denotes the interaction potential $U(\mathbf{q})$; (b) spin-triplet channel, the dashed line denotes U_t ; (c) Cooper channel, the full double line denotes λ/ν .

$$S_{\text{int}} = -\frac{1}{2} \int_{\mathcal{C}} dt \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_{\sigma, \sigma'} U(\mathbf{q}) \bar{\psi}_{\mathbf{k}\sigma} \bar{\psi}_{\mathbf{k}'\sigma'} \psi_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}\sigma'} \psi_{\mathbf{k}-\mathbf{q}\sigma}, \quad (10.59)$$

where we have suppressed the time index t , running along the contour. Although Eq. (10.59) is an exact expression for the two-particle interaction, it is often convenient to rewrite it in such a way that the wavenumber $\mathbf{q}$ summation includes only momenta that are small with respect to the Fermi momentum. To this end we split the $\sum_{\mathbf{q}}$ into $q \ll k_F$ and $q \sim k_F$ parts, keep the former as is, and in the latter relabel momenta indices in two complementary ways, Fig. 10.3. As a result the four-fermion product in Eq. (10.59) takes the form

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \sigma, \sigma'} & [U(\mathbf{q}) \bar{\psi}_{\mathbf{k}\sigma} \bar{\psi}_{\mathbf{k}'\sigma'} \psi_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}\sigma'} \psi_{\mathbf{k}-\mathbf{q}\sigma} + U(\mathbf{k}' + \mathbf{q} - \mathbf{k}) \bar{\psi}_{\mathbf{k}'\sigma} \bar{\psi}_{\mathbf{k}\sigma'} \psi_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}\sigma'} \psi_{\mathbf{k}-\mathbf{q}\sigma} \\ & + U(\mathbf{k}' + \mathbf{k}) \bar{\psi}_{\mathbf{k}\sigma} \bar{\psi}_{-\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma'} \psi_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}\sigma'} \psi_{-\mathbf{k}'\sigma}] \end{aligned} \quad (10.60)$$

where $k, k' \sim k_F$, and $q \ll k_F$. This expression may be simplified if one neglects the momentum dependence of the interaction potential at large momenta. Then the second four-fermion product may be rewritten as

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \sigma, \sigma'} \bar{\psi}_{\mathbf{k}'\sigma} \bar{\psi}_{\mathbf{k}\sigma'} \psi_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}\sigma'} \psi_{\mathbf{k}-\mathbf{q}\sigma} &= - \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \sigma, \sigma'} \bar{\psi}_{\mathbf{k}\sigma'} \psi_{\mathbf{k}-\mathbf{q}\sigma} \bar{\psi}_{\mathbf{k}'\sigma} \psi_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}\sigma'} \\ &= - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \sigma', \sigma} \bar{\psi}_{\mathbf{k}\sigma'} \vec{S}_{\sigma'\sigma} \psi_{\mathbf{k}-\mathbf{q}\sigma} \sum_{\mathbf{k}', \sigma, \sigma'} \bar{\psi}_{\mathbf{k}'\sigma} \vec{S}_{\sigma\sigma'} \psi_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}\sigma'} \\ &\quad - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \bar{\psi}_{\mathbf{k}\sigma} \psi_{\mathbf{k}-\mathbf{q}\sigma} \sum_{\mathbf{k}', \sigma} \bar{\psi}_{\mathbf{k}'\sigma} \psi_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}\sigma} \end{aligned} \quad (10.61)$$

As for the last term in Eq. (10.60), one may use that

$$\sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \sigma, \sigma'} \bar{\psi}_{\mathbf{k}\sigma} \bar{\psi}_{-\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma'} \psi_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}\sigma'} \psi_{-\mathbf{k}'\sigma} = 2 \sum_{\mathbf{k}} \bar{\psi}_{\mathbf{k}\uparrow} \bar{\psi}_{-\mathbf{k}+\mathbf{q}\downarrow} \sum_{\mathbf{k}'} \psi_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}\downarrow} \psi_{-\mathbf{k}'\uparrow}. \quad (10.62)$$

Indeed, the diagonal terms with $\sigma' = \sigma$ vanish due to the anti-commutativity of Grassmann variables. One can now introduce the fermion density, vector spin-density, and Cooper pair fields as

$$\begin{aligned} \rho(\mathbf{q}, t) &= \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \bar{\psi}_{\mathbf{k}\sigma}(t) \psi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}(t); \quad \mathbf{s}(\mathbf{q}, t) = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \sigma, \sigma'} \bar{\psi}_{\mathbf{k}\sigma}(t) \vec{S}_{\sigma\sigma'} \psi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma'}(t); \\ \Phi(\mathbf{q}, t) &= \sum_{\mathbf{k}} \bar{\psi}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\downarrow}(t) \psi_{-\mathbf{k}\uparrow}(t); \quad \bar{\Phi}(\mathbf{q}, t) = \sum_{\mathbf{k}} \bar{\psi}_{-\mathbf{k}\uparrow}(t) \bar{\psi}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\downarrow}(t). \end{aligned}$$

In coordinate space one has the following slowly varying functions on the scale of the Fermi wavelength (indeed, by construction $q \ll k_F$):

$$\begin{aligned} \rho(\mathbf{r}, t) &= \sum_{\sigma} \bar{\psi}_{\sigma}(\mathbf{r}, t) \psi_{\sigma}(\mathbf{r}, t); \quad \mathbf{s}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2} \sum_{\sigma, \sigma'} \bar{\psi}_{\sigma}(\mathbf{r}, t) \vec{S}_{\sigma\sigma'} \psi_{\sigma'}(\mathbf{r}, t); \\ \Phi(\mathbf{r}, t) &= \psi_{\downarrow}(\mathbf{r}, t) \psi_{\uparrow}(\mathbf{r}, t); \quad \bar{\Phi}(\mathbf{r}, t) = \bar{\psi}_{\uparrow}(\mathbf{r}, t) \bar{\psi}_{\downarrow}(\mathbf{r}, t). \end{aligned} \quad (10.63)$$

In terms of these slow quantities the interaction action (10.60) takes the form

$$\begin{aligned} S_{\text{int}} &= - \int_C dt \left\{ \frac{1}{2} \iint d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \rho(\mathbf{r}, t) U_s(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \rho(\mathbf{r}', t) \right. \\ &\quad \left. - 2U_t \int d\mathbf{r} \mathbf{s}(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{s}(\mathbf{r}, t) + \frac{\lambda}{v} \int d\mathbf{r} \bar{\Phi}(\mathbf{r}, t) \Phi(\mathbf{r}, t) \right\} \end{aligned} \quad (10.64)$$

where U_t and $(\lambda/\nu) \sim U(k_F)$ are triplet and Cooper channel interaction constants ($\nu = \nu(\epsilon_F)$ is DOS at the Fermi energy), and $U_s(\mathbf{q}) = U(\mathbf{q}) - U_t$ is the singlet channel interaction potential.

We shall postpone discussion of the triplet channel until Section 10.8 and the Cooper channel until Chapter 17 and focus here on the singlet, that is, density-density, interactions. To proceed we perform a Hubbard-Stratonovich transformation with the help of the real scalar boson field $\varphi(\mathbf{r}, t)$ (cf. Eq. (7.3)),

$$e^{-\frac{i}{2} \int_C dt \iint d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \rho U_s \rho} = \int \mathbf{D}[\varphi] e^{i \int_C dt \left\{ \frac{1}{2} \iint d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \varphi(\mathbf{r}, t) U_s^{-1}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \varphi(\mathbf{r}', t) - \int d\mathbf{r} \varphi(\mathbf{r}, t) \rho(\mathbf{r}, t) \right\}} \quad (10.65)$$

where U_s^{-1} is an inverse singlet interaction potential, that is, $U_s^{-1} \circ U_s = 1$. One notices that the auxiliary bosonic field, $\varphi(\mathbf{r}, t)$, enters the fermionic action in exactly the same way as a scalar source field, V , see Section 10.5. Following the same approach, one introduces

$\varphi^{\text{cl}(q)} = (\varphi^+ \pm \varphi^-)/2$ and rewrites the fermion-boson interaction term as $\varphi^\alpha \sum_\sigma \bar{\psi}_{a\sigma} \gamma_{ab}^\alpha \psi_{b\sigma}$, where the summations over $a, b = (1, 2)$ and $\alpha = (\text{cl}, q)$ are assumed. The free bosonic term takes the form $\varphi^\alpha U_s^{-1} \hat{\sigma}_1^{\alpha\beta} \varphi^\beta$, where $\hat{\sigma}_1$ is the first Pauli matrix acting in the bosonic Keldysh space.

At this stage the Fermionic action is quadratic in Grassmann fields and one may perform the Gaussian integration according to Eq. (10.11). The result is the effective bosonic action written in terms of the two-component fluctuating scalar potential φ^α , as well as the source fields V^α :

$$S[\varphi, V] = \int dt d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \varphi(\mathbf{r}, t) U_s^{-1}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\sigma}_1 \varphi(\mathbf{r}', t) - i \text{Tr} \ln \{1 - \hat{G}[V^\alpha + \varphi^\alpha] \hat{\gamma}^\alpha\} \quad (10.66)$$

compare Eq. (7.4). We have reduced an interacting fermionic problem to a theory of an effective nonlinear bosonic field. The latter is nothing but the longitudinal component of the photon field. Its dynamics and self-interactions originate from the polarization of the Fermi gas, through the expansion of the logarithm.

To proceed we shall restrict ourselves to the random phase approximation (RPA), already discussed in Section 7.4. It neglects all terms in the expansion of the logarithm beyond the second order (the first order in V_{cl} vanishes due to Eq. (10.29), while the first order in V_q is absent due to the charge neutrality of the unperturbed system). The second-order term in the expansion is conveniently expressed through the polarization matrix $\Pi_0^{\alpha\beta}$, Eqs. (10.49)-(10.51), of the noninteracting fermions. The resulting effective bosonic theory is Gaussian with the action

$$S_{\text{RPA}}[\varphi, V] = \iint dx dx' \left\{ \varphi [\hat{U}_{\text{RPA}}]^{-1} \varphi + \varphi \hat{\Pi}_0 V + V \hat{\Pi}_0 \varphi + V \hat{\Pi}_0 V \right\} \quad (10.67)$$

where the inverse RPA screened interaction in the singlet channel is

$$[\hat{U}_{\text{RPA}}(x, x')]^{-1} = U_s^{-1}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\sigma}_1 + \hat{\Pi}_0(x, x'); \quad (10.68)$$

compare Eq. (7.20). The fermionic polarization matrix $\hat{\Pi}_0$ plays the role of the (minus) self-energy, $\hat{\Sigma}$ (cf. Eqs. (6.16) and (6.17)), in the effective bosonic theory. As was mentioned at the end of Section 10.5, it indeed possesses all the proper symmetries and the causality properties. In particular, $i\Pi_0^K = -2F \text{Im} \Pi_0^R$ is negative, see Fig. 10.2 and Eqs. (10.55) and (10.57), providing convergence of the functional integrals over φ^α . It describes thermal and quantum fluctuations of the photon field.

Since the RPA action (10.67) is quadratic in the photon fields φ^α , one may integrate them out and evaluate the generating function $Z[V]$, Eq. (10.44). Performing the corresponding Gaussian integral according to Eq. (2.22), one finds $\ln Z_{\text{RPA}}[V] = iV (\hat{\Pi}_0 - \hat{\Pi}_0 \circ \hat{U}_{\text{RPA}} \circ \hat{\Pi}_0) V = iV \hat{\Pi}_{\text{RPA}} V$. Since, according to Eq. (10.68), $U_{\text{RPA}} = (1 + U_s \hat{\sigma}_1 \hat{\Pi}_0)^{-1} U_s \hat{\sigma}_1$, simple matrix algebra leads to $\hat{\Pi}_{\text{RPA}} = \hat{\Pi}_0 \circ (1 + U_s \hat{\sigma}_1 \hat{\Pi}_0)^{-1}$. The response component of this RPA screened polarization matrix acquires the form

$$\Pi_{\text{RPA}}^{R(A)}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{\Pi_0^{R(A)}(\mathbf{q}, \omega)}{1 + U_s(\mathbf{q}) \Pi_0^{R(A)}(\mathbf{q}, \omega)} \quad (10.69)$$

The Keldysh component is $\Pi_{\text{RPA}}^K = (1 + U_s \Pi_0^R)^{-1} \Pi_0^K (1 + U_s \Pi_0^A)^{-1}$. If one writes that $\Pi_0^K = B(\Pi_0^R - \Pi_0^A)$, where B is the boson distribution function of the scalar potential φ , one finds $\Pi_{\text{RPA}}^K = B(\Pi_{\text{RPA}}^R - \Pi_{\text{RPA}}^A)$. In equilibrium, where $B = \coth(\omega/2T)$, this relation is a manifestation of FDT. It is valid, however, even out of equilibrium and states that the

RPA screened correlation component $\Pi_{\text{RPA}}^{\text{K}}$ is expressed through the same bosonic distribution function B as the bare polarization Π_0^{K} . With the help of Eqs. (10.54) the bosonic distribution function B may be found in terms of the fermionic distribution F . The latter is a solution of the fermionic kinetic equation, discussed in the next chapter.

The response is resonant if the equation $1 + U_s(\mathbf{q})\Pi_0^{\text{R}}(\mathbf{q}, \omega) = 0$ has a complex solution $\omega = \omega(\mathbf{q})$ with $\text{Im } \omega \ll \text{Re } \omega$. For the long-range Coulomb interactions $U_s(\mathbf{q}) \approx 4\pi e^2/\mathbf{q}^2$, this condition determines the plasma mode with the frequency $\omega_p^2 = 4\pi e^2 \rho_0/m$ (indeed, $\nu m v_F^2/3 = \rho_0$ is the fermion density); see Fig. 10.2.⁵ For $q \ll \kappa_{\text{TF}}^{-1}$, where $\kappa_{\text{TF}}^{-1} = \sqrt{4\pi e^2 v} \sim \omega_p/v_F$ is the (inverse) Thomas-Fermi screening radius, the plasmon mode is underdamped. The small Landau damping, Eq. (10.57), originates from the excitations of high-energy resonant electrons with velocity $v = \omega_p/q \gg v_F$. Their occupation number is well approximated by the classical Maxwell distribution $n_F \approx e^{-(mv^2/2 - \epsilon_F)/T} \ll 1$. Therefore, if the longwavelength plasmon excitations are excited (e.g. by a strong optical pulse), their kinetics is described by the semiclassical theory developed in Sections 7.4 and 7.5. Indeed, the real part of the retarded polarization (10.55) is provided by fermions in the narrow strip of energies $\sim v_F q$ around the Fermi surface. On the other

hand, fermions responsible for Landau damping live far above the Fermi surface, suggesting a description in terms of coupled plasmon and high-energy electron distribution functions; see Section 7.5.

For short-range interactions, $U(\mathbf{q}) \xrightarrow{q \rightarrow 0} U_s$, the resonant excitation is the acoustic zero sound mode $\omega = v_{\text{zs}} q$. According to Fig. 10.2 and Eq. (10.55) the corresponding speed of sound is $v_{\text{zs}} = v_F \sqrt{U_s v/3}$ in the limit $U_s v \gg 1$ and $v_{\text{zs}} \approx v_F (1 + 2e^{-(U_s v)^{-2}})$ in the opposite case $U_s v < 1$. The zero sound mode should be distinguished from the ordinary sound, which is also present in Fermi liquids and is discussed in Section 11.2. The zero sound is a collisionless phenomenon originating due to the presence of the dynamic collective field φ . On the other hand, the ordinary sound is a result of hydrodynamic oscillations of the fermionic density and pressure, established by the fast local equilibration due to the frequent collisions. Therefore, their domains of existence are separated by the condition $\omega \tau_{\text{sc}} \gg 1$ for the zero sound versus $\omega \tau_{\text{sc}} \ll 1$ for the ordinary one. Here $\tau_{\text{sc}} \sim \epsilon_F/T^2$ is the characteristic fermion collision time, Sections 11.1 and 11.2. Notice that for weak repulsive interactions the zero sound velocity exceeds the Fermi velocity, $v_{\text{zs}} \gtrsim v_F$, while at the same time the ordinary sound velocity approaches $v_s \approx v_F/\sqrt{3}$.

12.5.8 10.8 Stoner Instability

We focus now on the triplet interaction channel in Eq. (10.64). The crucial observation is that it comes with the opposite sign (i.e. effective attraction) in comparison with the repulsive singlet channel interaction. The reason for this peculiarity is the minus sign obtained due to commutation of the Grassmann variables in Eq. (10.61), which is a manifestation of the Fermi statistics. One can split the triplet term in Eq. (10.59) with the help of an auxiliary vector field $\mathbf{h}(\mathbf{r}, t)$ defined along the closed contour:

$$e^{2i \int_C dt \, d\mathbf{r} s U_t s} = \int \mathbf{D}[\mathbf{h}] e^{i \int_C dt \, d\mathbf{r} \left\{ -\frac{1}{2} \mathbf{h} U_t^{-1} \mathbf{h} - 2\mathbf{h}(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{s}(\mathbf{r}, t) \right\}} \quad (10.70)$$

The fluctuating exchange magnetic field $\mathbf{h}(\mathbf{r}, t)$ enters the fermionic action in exactly the same way as the Zeeman field $\mathbf{H}_Z$; see Eq. (10.36). One can now separate it into classical and quantum components $\mathbf{h}^\alpha = (\mathbf{h}^+ \pm \mathbf{h}^-)/2$ in exactly the same way as was done previously

⁰⁵ As shown in Fig. 10.2, the equation $-U_s^{-1} = \text{Re } \Pi_0^{\text{R}}(\mathbf{q}, \omega)$ has another solution with $\omega_{\text{ea}} \approx 0.83 v_F q$. Such an electron-acoustic mode is heavily overdamped (indeed, $\text{Im } \Pi_0^{\text{R}}(\mathbf{q}, \omega_{\text{ea}}) \approx 1.3 v$) and therefore is not resonant; see also Section 7.3.

for the fluctuating scalar potential. At this stage one may perform Gaussian integration over the fermionic fields. The result is the effective bosonic action written in terms of the exchange magnetic field.⁶

$$S[\mathbf{h}, \mathbf{H}_Z] = - \int_{-\infty}^{\infty} dt \, d\mathbf{r} \mathbf{h}(\mathbf{r}, t) U_t^{-1} \hat{\sigma}_1 \mathbf{h}(\mathbf{r}, t) - i \text{Tr} \ln \left\{ 1 - \hat{G} [(\mathbf{H}_Z^\alpha + \mathbf{h}^\alpha) \vec{s}] \hat{\gamma}^\alpha \right\} \quad (10.71)$$

Notice again the opposite sign of the free boson term in comparison with Eq. (10.66); $\hat{\sigma}$ and $\hat{s}$ are Pauli matrices in the Keldysh and spin spaces correspondingly.

One can now expand the logarithm in powers of the effective magnetic field $\mathbf{H}_Z^\alpha + \mathbf{h}^\alpha$. We focus first on the quadratic term. Since the bare fermionic Green functions are diagonal in the spin indices, Eqs. (10.37), the resulting term acquires the form of the scalar product $(\mathbf{H}_Z^\alpha + \mathbf{h}^\alpha) \cdot (\mathbf{H}_Z^\beta + \mathbf{h}^\beta)$. The coefficient is nothing but the bare polarization matrix $\hat{\Pi}_0^{\alpha\beta}$. As a result one finds for the quadratic RPA action in the triplet channel (we omit the Zeeman field for brevity)

$$S_{\text{RPA}}[\mathbf{h}] = \iint dx \, dx' \mathbf{h}^\alpha(x) \left[-U_t^{-1} \hat{\sigma}_1^{\alpha\beta} \delta(x - x') + \hat{\Pi}_0^{\alpha\beta}(x, x') \right] \mathbf{h}^\beta(x') \quad (10.72)$$

We employ now Eqs. (10.55) and (10.56) for the free fermion polarization operator at $\omega < v_F q$ along with the $T = 0$ FDT to obtain for the zero-temperature action⁷

$$S_{\text{RPA}}[\mathbf{h}] = \sum_{\mathbf{q}} \left\{ -2 \int dt \mathbf{h}^{q*}(\mathbf{q}, t) [\gamma(\mathbf{q}) \partial_t + D \mathbf{q}^2 + \delta] \mathbf{h}^{\text{cl}}(\mathbf{q}, t) + \frac{i\gamma(\mathbf{q})}{\pi} \iint \frac{dt \, dt'}{(t - t')^2} |\mathbf{h}^q(\mathbf{q}, t) - \mathbf{h}^q(\mathbf{q}, t')|^2 \right\} \quad (10.73)$$

where $\gamma(\mathbf{q}) = \pi\nu/(2v_F q)$, while $D = \nu/(12k_F^2)$ and $\delta = U_t^{-1} - \nu$. This action ought to be compared with the model action (9.32), used to discuss quantum phase transitions in Section 9.6. The main difference between the two is that the damping coefficient $\gamma(\mathbf{q})$ appears to be q -dependent (we shall discuss nonlinear terms in what follows). Remarkably, the parameter δ may become negative if $vU_t > 1$, see Fig. 10.2. As we already know, this indicates the tendency of the system to develop an ordered state with a nonzero expectation value of $\mathbf{h}^{\text{cl}}$. Such transition is known as the Stoner ferromagnetic transition.

To find the order parameter in the magnetic phase, one needs to add nonlinear terms to the action (10.73). They may be found by expanding the logarithm in Eq. (10.71) in powers of $\mathbf{h}$. This is a cumbersome procedure. One may try to use the fact that the Pauli magnetization of the free electron gas is given by $M(H_Z) = -\frac{i}{2} \partial Z[H_Z] / \partial H_Z^q|_{H_Z^q=0}$. For a static field it may be easily calculated by counting the number of up and down spins below a common H_Z -dependent chemical potential, resulting in $M(H_Z) = vH_Z - gH_Z^3 + \dots$, where $g = 3v/(16\epsilon_F^2)$ in $d = 3$. Since $\mathbf{H}_Z$ and $\mathbf{h}$ enter the action (10.71) in the same way, the last term in the Pauli magnetization translates into the following nonlinear action for quasi-static exchange magnetic field $\mathbf{h}$:

⁰⁶ Strictly speaking, here one has to include all three interaction channels to have the scalar potential φ^α , exchange magnetic field $\mathbf{h}^\alpha$, and the complex pairing potential Δ^α inside the logarithm simultaneously. However, in the expansion of the logarithm to the second order, discussed here, the different channels do not mix. They start interacting with each other in higher orders, which describe nonlinear interactions of the bosonic fields.

⁰⁷ We have omitted higher orders of the expansion of $\Pi_0^R(\mathbf{q}, \omega)$, Eq. (10.55), in powers of $(\omega/v_F q)^2$, since they bring only terms irrelevant in the RG sense, i.e. at large distances and times.

$$S_{\text{int}}[\mathbf{h}] = -2 \int dt \, d\mathbf{r} g (\mathbf{h}^q \cdot \mathbf{h}^{\text{cl}}) (\mathbf{h}^{\text{cl}} \cdot \mathbf{h}^{\text{cl}}) \quad (10.74)$$

This term provides saturation of the magnetization in the ferromagnetic phase $\delta < 0$. Other possible nonlinear terms, such as, for example, $(\mathbf{h}^q \cdot \mathbf{h}^q) (\mathbf{h}^q \cdot \mathbf{h}^{\text{cl}})$, have the same scaling dimensions as (10.74), as discussed in Section 9.6.

The resulting so-called Hertz-Millis [213] model, Eqs. (10.73) and (10.74), of the Stoner transition may be analyzed using the RG machinery. The only difference with the model of Section 9.6 is the damping $\gamma(\mathbf{q})$ diverging at small q . This is a manifestation of the conserved nature of the order parameter $\mathbf{h}$. Indeed, the corresponding classical equation of motion takes the form $\partial_t \mathbf{h}(\mathbf{q}, t) = [\gamma(\mathbf{q})]^{-1}(\dots)$. Since $[\gamma(0)]^{-1} = 0$, the $\mathbf{q} = 0$ component of the magnetization does not evolve. The bare scaling dimensions of the coupling constants, read out of the action (10.73) and (10.74), are $[\gamma] = d + 1 + 2\chi$, $[D] = d + z - 2 + 2\chi$, $[\delta] = d + z + 2\chi$, and $[g] = d + z + 4\chi$. Demanding that the Gaussian part of the critical action is scale invariant, that is, $[\gamma] = [D] = 0$, one finds $z = 3$ and $\chi = -(d + 1)/2$, while $[\delta] = 2$. One thus finds that $[g] = 1 - d$ and therefore the critical dimension is $d_c = 1$. For $d > 1$, the Gaussian exponents are exact and we conclude that $\nu = 1/2$, while $z = 3$. Since the characteristic momentum scale is the inverse correlation length, that is, $q \propto |\delta|^\nu$, while the characteristic frequency is $\omega \propto |\delta|^{\nu z}$, we conclude that $\omega \ll v_F q \ll \epsilon_F$, justifying approximations made while writing the quadratic part of the action (10.73). Gaussian scaling is valid throughout the quantum critical region, Fig. 9.5, and crosses over to the classical one in the vicinity of a finite T transition. For $d < 4$ the latter is $\nu = 1/2 + \epsilon/12$ and $z = 3 + O(\epsilon^2)$, where $\epsilon = 4 - d$.

It was recently understood [215, 216], however, that the Hertz-Millis model actually fails to describe the ferromagnetic transition in the fermionic system. The reason is that the effective bosonic theory (10.71) is obtained by integrating out gapless fermionic degrees of freedom. As a result the effective vertices of the bosonic theory are nonlocal functions of time (and space). Following Hertz-Millis [213], we have incorporated this fact into the Gaussian part of the action (10.73), but disregarded it in the nonlinear part (10.74). This happens to be badly inconsistent⁸ (as was probably first noticed in [217]). In contrast to Eq. (10.74), the actual quartic vertex includes a long-ranged time-nonlocal part [216] (there is also a nonlocal cubic term of the form $\mathbf{h} \cdot [\mathbf{h} \times \mathbf{h}]$). The nonlocality is effectively cut off by

the field $\mathbf{h}$ itself, leading to a nonanalytic effective bosonic potential of the form $\mathcal{F}[\mathbf{h}] = \delta h^2 + g_1 h^4 \ln h + g h^4$ [215].⁹ The nonanalytic $h^4 \ln h$ term transforms the continuous transition into the weak first-order transition.

12.5.9 10.9 Problems

10.9.1 Fermionic Bogoliubov Transformation

Consider a quadratic Hamiltonian for a spin-1/2 fermionic state:

$$\hat{H} = \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \epsilon_0 \hat{c}_\sigma^\dagger \hat{c}_\sigma + \Delta (\hat{c}_\uparrow^\dagger \hat{c}_\downarrow^\dagger + \hat{c}_\downarrow \hat{c}_\uparrow) = (\hat{c}_\uparrow^\dagger, \hat{c}_\downarrow) \begin{pmatrix} \epsilon_0 & \Delta \\ \Delta & -\epsilon_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{c}_\uparrow \\ \hat{c}_\downarrow^\dagger \end{pmatrix} + \epsilon_0. \quad (10.75)$$

Show that with the help of the unitary transformation

$$\begin{pmatrix} \hat{c}_\uparrow \\ \hat{c}_\downarrow^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\alpha) & \sin(\alpha) \\ -\sin(\alpha) & \cos(\alpha) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{\mathbf{c}}_1 \\ \hat{\mathbf{c}}_2^\dagger \end{pmatrix}, \quad (10.76)$$

⁸I am indebted to A. Chubukov and J. Schmalian for discussing this issue.

where $\{\hat{c}_a, \hat{c}_b^\dagger\} = \delta_{a,b}$, $a, b = 1, 2$, and $\tan(2\alpha) = -\Delta/\epsilon_0$, the Hamiltonian (10.75) is diagonalized: $\hat{H} = \sum_{a=1,2} \sqrt{\epsilon_0^2 + \Delta^2} \hat{c}_a^\dagger \hat{c}_a + \epsilon_0 - \sqrt{\epsilon_0^2 + \Delta^2}$. Show that its normalized ground state, $|0\rangle$, found from the condition $\hat{c}_a|0\rangle = 0$, is given by the coherent state of the fermionic pair

$$|0\rangle = \cos(\alpha) e^{\tanh(\alpha) \hat{c}_1^\dagger \hat{c}_2^\dagger} |0\rangle, \quad (10.77)$$

9 The nonanalyticity may be noticed already in the $\text{Re } \Sigma^R(\epsilon)$ at $\xi_k = \epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_F = 0$ calculated at the quantum transition point, $\delta = 0$ and $T = 0$. To this end let us calculate $\Sigma^K(\epsilon)$, Eq. (11.6),

$$\Sigma^K(\epsilon) = \frac{i}{2} \sum_{\mathbf{q}, \omega} (\text{sign}(\epsilon + \omega) \text{sign}(\omega) - 1) (-2\pi i) \delta(\epsilon + \omega - \mathbf{v}_F \mathbf{q}) \left[\frac{3}{i\gamma(\mathbf{q})\omega - D\mathbf{q}^2} - \frac{-3}{i\gamma(\mathbf{q})\omega + D\mathbf{q}^2} \right]$$

where we used the fact that $G^R - G^A = -2\pi i \delta(\epsilon + \omega - v_F q \cos \theta)$ along with the retarded/advanced RPA propagators of the three-component vector $\mathbf{h}$ -field, Eq. (10.73), and $\coth(\omega/2T)^{T \rightarrow 0} \text{sign}(\omega)$. Integration over the angle $z = \cos \theta$ is performed with the help of the energy delta-function, bringing the factor $(v_F q)^{-1}$. The remaining radial momentum integration takes the form

$$\int_0^\infty \frac{q^2 dq}{(2\pi)^2} \frac{1}{v_F q} \frac{-6i\gamma(q)\omega}{(Dq^2)^2 + \gamma^2(q)\omega^2} = -\frac{6i}{(2\pi)^2} \frac{\gamma\omega}{v_F D} \frac{1}{3} \int_0^\infty \frac{d(Dq^3)}{(Dq^3)^2 + \gamma^2\omega^2} = -\frac{i}{(2\pi)^2} \frac{\pi \text{sign}(\omega)}{v_F D}$$

where $\gamma = q\gamma(q)$. Performing ω -integration, one finally finds $\Sigma^K(\epsilon) = -i\epsilon/(4\pi v_F D) = -3i\epsilon k_F^2/(\pi v_F v) = -3\pi i\epsilon$. According to $T = 0$ FDT, $\Sigma^K(\epsilon) = \text{sign}(\epsilon) 2i \text{Im } \Sigma^R(\epsilon)$ and thus $\text{Im } \Sigma^R(\epsilon) = -3\pi |\epsilon|/2$. Finally, using the Kramers-Kronig relation, the absolute value nonanalyticity in the imaginary part translates into the nonanalytic term $\text{Re } \Sigma^R = (3/2)\epsilon \ln |\epsilon|$ in the real part of the self-energy. As a result, the inverse dressed Green function $[G_0^R]^{-1} - \Sigma^R \sim \epsilon \ln |\epsilon|$ indicates nonlocality in time of the renormalized fermionic action. In $d = 2$ the corresponding singularity is much stronger, $\text{Re } \Sigma^R \propto \epsilon^{2/3}$ [218].

where $|0\rangle$ is the fermionic vacuum state, $\hat{c}_\sigma|0\rangle = 0$. Find three other states in the new Hilbert state basis formed by $\hat{c}_1^\dagger|0\rangle$, $\hat{c}_2^\dagger|0\rangle$, and $\hat{c}_1^\dagger \hat{c}_2^\dagger|0\rangle$. Verify that the new basis is orthonormal.

Write the Hamiltonian (10.75) as a 4×4 matrix in the fermionic two-body space, using $|0\rangle, \hat{c}_1^\dagger|0\rangle, \hat{c}_2^\dagger|0\rangle, \hat{c}_1^\dagger \hat{c}_2^\dagger|0\rangle$ as the basis. Diagonalize it and verify that the new basis is formed by the eigenstates of the Hamiltonian with the proper eigenenergies. Notice that, since the Hamiltonian (10.75) conserves the fermion parity (but not the fermion number), the even and odd particle number subspaces block-diagonalize the two-body matrix Hamiltonian. The advantage of the Bogoliubov unitary transformation over this brute-force calculation is that the former may be immediately generalized to the case of N spin-1/2 fermions, where both ϵ_0 and Δ are $N \times N$ matrices. The brute force approach requires handling $2^{2N} \times 2^{2N}$ Hamiltonian, which is block-diagonalized into two $2^{2N-1} \times 2^{2N-1}$ matrices. This is not an easy exercise even for $N = 2$.

10.9.2 Random Matrices via Fermionic Replica

Consider a Hermitian $N \times N$ matrix $\hat{H}$. Its real eigenvalues are denoted as ϵ_j , where $j = 1, 2, \dots, N$. Verify that its density of states may be written as

$$\nu(\epsilon) = \sum_{j=1}^N \delta(\epsilon - \epsilon_j) = \frac{1}{\pi} \text{Im } \text{Tr}(\hat{E} - \hat{H})^{-1} = \frac{1}{\pi} \frac{\partial}{\partial \epsilon} \text{Im } \log \det(\hat{E} - \hat{H}), \quad (10.78)$$

where $\hat{E} = (\epsilon - i0)\hat{1}$ is proportional to the unit matrix. The determinant may be written as the fermionic multiple integral (10.11), but the logarithm presents a problem. To overcome it one may use the replica trick [279], stating

$$\log Z = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{Z^n - 1}{n}, \quad \nu(\epsilon) = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{\pi n} \text{Im } \partial_\epsilon Z^n \quad (10.79)$$

where $Z = \det(\hat{E} - \hat{H})$. For an integer $n > 0$ one therefore obtains

$$Z^n = \int \prod_{a=1}^n \prod_{j=1}^N \left[d\bar{\psi}_j^{(a)} d\psi_j^{(a)} \right] e^{-\sum_{a=1}^n \sum_{i,j=1}^N \bar{\psi}_i^{(a)} (\hat{E} - \hat{H})_{ij} \psi_j^{(a)}} \quad (10.80)$$

Let us assume now that the matrix $\hat{H}$ has random entrees (obeying Hermiticity conditions) taken from independent Gaussian distributions. The corresponding probability distribution is

$$P(\hat{H}) = \mathcal{N} e^{-\frac{N}{2} \text{Tr } \hat{H}^2} = \mathcal{N} e^{-\frac{N}{2} \sum_{i,j=1}^N |H_{ij}|^2}, \quad (10.81)$$

where the factor $N/2$ in the exponent is chosen to maintain a finite support for the density of states in the $N \rightarrow \infty$ limit (see the following discussion).

Find the normalization factor, $\mathcal{N}$, from $\int \mathbf{D}[\hat{H}] P(\hat{H}) = 1$, where $\mathbf{D}[\hat{H}] = \prod_{i < j}^N d(\text{Re } H_{ij}) d(\text{Im } H_{ij}) \prod_i^N dH_{ii}$. Average the replicated partition function over the Gaussian ensemble of Hermitian matrices and show that

$$\langle Z^n \rangle_{\hat{H}} = \int \prod_{a=1}^n \prod_{j=1}^N \left[d\bar{\psi}_j^{(a)} d\psi_j^{(a)} \right] e^{-\sum_{a=1}^n \sum_{i,j=1}^N \bar{\psi}_i^{(a)} \hat{E}_{ij} \psi_j^{(a)} - \frac{1}{2N} \sum_{a,b=1}^n \tilde{T}_{ab} \tilde{T}_{ba}} \quad (10.82)$$

where $\langle Z^n \rangle_{\hat{H}} = \int \mathbf{D}[\hat{H}] P(\hat{H}) Z^n$ and $\tilde{T}_{ab} = \sum_{j=1}^N \bar{\psi}_j^{(a)} \psi_j^{(b)}$ is an $n \times n$ matrix. Pay special attention on rearranging the product of four Grassmann variables in the exponent, keeping a proper sign. Decouple the $\sum_{a,b=1}^n \tilde{T}_{ab} \tilde{T}_{ba}$ term in the exponent with the help of an auxiliary Hubbard-Stratonovich Hermitian $n \times n$ matrix $\check{Q}_{ab}$ and perform the Gaussian integral over the Grassmann variables $[d\bar{\psi}_j^{(a)} d\psi_j^{(a)}]$. Show that

$$\langle Z^n \rangle_{\hat{H}} = \int \mathbf{D}[\hat{H}] e^{-\frac{N}{2} \text{Tr } \hat{H}^2 + n \text{Tr } \log(\hat{E} - \hat{H})} = \int \mathbf{D}[\check{Q}] e^{N[-\frac{1}{2} \text{Tr } \check{Q}^2 + \text{Tr } \log(\check{E} - i\check{Q})]}, \quad (10.83)$$

where $\check{E}_{ab} = (\epsilon - i0)\delta_{ab}$. This is a remarkable duality between the integrals over $N \times N$ and $n \times n$ Hermitian matrices, proven with the help of the Grassmann integrals. Its advantage is that the $\check{Q}$ -integral contains $N \gg 1$ as a factor in the exponent. This allows one to perform the $\check{Q}$ -integration in the stationary point approximation. First let's shift the integration variable $\check{Q} \rightarrow \check{Q} - i\check{E}$ to find

$$\partial_\epsilon \langle Z^n \rangle_{\hat{H}} = \int \mathbf{D}[\check{Q}] iN \text{Tr}(\check{Q} - i\check{E}) e^{N[-\frac{1}{2} \text{Tr}(\check{Q} - i\check{E})^2 + \text{Tr } \log(-i\check{Q})]}. \quad (10.84)$$

Perform variation of the exponent over the $\check{Q}$ -matrix and show that the saddle-point condition is given by the matrix equation

$$(\check{Q} - i\check{E}) = \check{Q}^{-1} \quad (10.85)$$

Since $\check{E} \propto \hat{1}$, the stationary $\check{Q}$ -matrix may be diagonalized by a unitary transformation and the stationary point condition becomes an algebraic equation for the set of its eigenvalues λ_a , found from $(\lambda - i\epsilon) = 1/\lambda$. This admits two solutions: $\lambda_{\pm} = \pm \sqrt{1 - \epsilon^2/4} + i\epsilon/2$. Consider first a replica symmetric stationary point $\lambda_a = \lambda_+$, for $a = 1, \dots, n$. Then

$$\partial_\epsilon \langle Z^n \rangle_{\hat{H}} \propto n N (\lambda_+ - i\epsilon) e^{nN[-\frac{1}{2}(\lambda_+ - i\epsilon)^2 + \log(-i\lambda_+)]} \quad (10.86)$$

The proportionality coefficient, which includes Gaussian fluctuations around the stationary point, may be shown to have a form of $[\dots]^n$, and therefore it goes to one, if $n \rightarrow 0$. Substitute this into (10.79) and show that

$$v_0(\epsilon) = \frac{N}{\pi} \sqrt{1 - \frac{\epsilon^2}{4}}; \quad |\epsilon| < 2, \quad (10.87)$$

and $v_0(\epsilon) = 0$ for $|\epsilon| > 2$. This result is known as the Wigner semicircle law for the average density of states of random matrices.

Since each λ_a may take two stationary values, $\lambda_\pm$, there are 2^n stationary configurations in total. One may show [285] that in the limit $n \rightarrow 0$, besides one replica symmetric configuration, considered previously, only n other survive. Those are given by $n - 1$ eigenvalues set to λ_+ and one eigenvalue set to λ_- . They lead to a $1/N$ oscillatory correction to the average density of states of the form $\delta\nu(\epsilon) \propto \cos[2\pi \int_{-2}^{\epsilon} d\epsilon' \nu_0(\epsilon') + \pi]$. This is a function with exactly N maxima.

¹⁰ It reflects the discrete nature of the underlying spectra before the ensemble averaging. The same technique may be applied to the correlation functions of the density of states, for example, $\langle \nu(\epsilon) \nu(\epsilon') \rangle_{\hat{H}}$; see [285] and Section 15.2 for more information about this object.

10.9.3 Fermionic Lindbladian Action

Consider a fermionic analog of the bosonic parametrically driven oscillator, discussed in Section 5.5. The model consists of two fermionic states, labelled as $\sigma = \uparrow, \downarrow$ and thus having four-dimensional many-body Hilbert space. These two states are coupled to a Gaussian fermionic bath, through the fermion exchange. The corresponding closed time contour action is $S = S_0 + S_{\text{bath}}$, where

$$S_0 = \int_C dt \left[\sum_{\sigma} \bar{\psi}_{\sigma} (i\partial_t - \varepsilon_{\sigma}) \psi_{\sigma} - \Delta (e^{2i\omega_p t} \bar{\psi}_{\uparrow} \bar{\psi}_{\downarrow} + e^{-2i\omega_p t} \psi_{\downarrow} \psi_{\uparrow}) \right], \quad (10.88a)$$

$$S_{\text{bath}} = \int_C dt \sum_{s, \sigma} [\bar{\Psi}_{\sigma s} (i\partial_t - \varepsilon_s) \Psi_{\sigma s} + g_s (\bar{\Psi}_{\sigma s} \psi_{\sigma} + \bar{\psi}_{\sigma} \Psi_{\sigma s})], \quad (10.88b)$$

where ε_s and g_s are spectra of the bath and the fermion exchange amplitudes; both are assumed to be spin-independent. Perform the gauge transformation $e^{-i\omega_p t} \psi_{\sigma} \rightarrow \psi_{\sigma}$ and the fermionic Keldysh rotation. Integrate out the Gaussian bath (assume it to be at equilibrium with temperature T) to arrive at the effective dissipative action for the system:

$$S_{\text{diss}} = - \int d\epsilon \sum_{a, b; \sigma} \bar{\psi}_{\sigma}^a(\epsilon) \Sigma^{ab}(\epsilon) \psi_{\sigma}^b(\epsilon) \quad (10.89)$$

where $a, b = 1, 2$ are the Keldysh indexes and

$$\Sigma^{\text{R}, \text{A}}(\epsilon) = \mp \frac{i}{2} J(\epsilon + \omega_p); \quad \Sigma^{\text{K}}(\epsilon) = -iJ(\epsilon + \omega_p) \tanh\left(\frac{\epsilon + \omega_p}{2T}\right), \quad (10.90)$$

¹⁰ The oscillatory function is a consequence of the exponent in (10.84), which takes the form $e^{(n-1)A(\lambda_+) + A(\lambda_-)} \xrightarrow{n \rightarrow 0} e^{A(\lambda_-) - A(\lambda_+)}$, where $A(\lambda) = N[-(\lambda - i\epsilon)^2/2 + \log(-i\lambda)]$. It is easy to check that $i(A(\lambda_-) - A(\lambda_+))$ is given by the expression under the cosine. where $J(\epsilon) = \pi \sum_s g_s^2 \delta(\epsilon - \varepsilon_s)$ is the bath spectral function. For the nearly resonant drive

$|\varepsilon_\sigma - \omega_p| \ll \omega_p$, one may define $\kappa_\sigma = J(\varepsilon_\sigma)/2$ to approximate the dissipative action with the local in time form. As a result, the effective action of the two-state system $S_0 + S_{\text{diss}}$ is

$$S = \int dt \left[\sum_\sigma (\bar{\psi}_\sigma^1, \bar{\psi}_\sigma^2) \begin{pmatrix} i\partial_t - \delta_\sigma + i\kappa_\sigma & 2i\kappa_\sigma \tanh(\varepsilon_\sigma/2T) \\ 0 & i\partial_t - \delta_\sigma - i\kappa_\sigma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_\sigma^1 \\ \psi_\sigma^2 \end{pmatrix} - \Delta (\bar{\psi}_\uparrow^1 \bar{\psi}_\downarrow^2 + \bar{\psi}_\uparrow^2 \bar{\psi}_\downarrow^1 - \psi_\uparrow^1 \psi_\downarrow^2 - \psi_\uparrow^2 \psi_\downarrow^1) \right], \quad (10.91)$$

where $\delta_\sigma = \varepsilon_\sigma - \omega_p$.

Consider now the Lindblad equation for the reduced density matrix, $\hat{\rho}$, of the two fermionic states system. It is a 4×4 matrix, obeying the following Lindblad equation:

$$\partial_t \hat{\rho}(t) = -i [\hat{H}_p, \hat{\rho}(t)] + \sum_a \gamma_a \left(\hat{L}_a \hat{\rho}(t) \hat{L}_a^\dagger - \frac{1}{2} \{ \hat{L}_a^\dagger \hat{L}_a, \hat{\rho}(t) \} \right), \quad (10.92)$$

where for our model $\hat{H}_p [\hat{c}_\sigma^\dagger, \hat{c}_\sigma] = \sum_\sigma \delta_\sigma \hat{c}_\sigma^\dagger \hat{c}_\sigma + \Delta (\hat{c}_\uparrow^\dagger \hat{c}_\downarrow^\dagger + \hat{c}_\downarrow \hat{c}_\uparrow)$, $a = 1, \dots, 4$ with $\hat{L}_{1,2} = \hat{c}_\sigma$ and $\hat{L}_{3,4} = \hat{c}_\sigma^\dagger$. Following Section 5.3 develop the functional integral representation for the evolution operator corresponding to the fermionic Lindblad equation. To this end, discretize the time axis and introduce two sets of coherent states, $|\psi_{j,\sigma}^+\rangle$ and $|\psi_{j,\sigma}^-\rangle$, such that $\hat{c}_\sigma |\psi_{j,\sigma}^\pm\rangle = \psi_{j,\sigma}^\pm |\psi_{j,\sigma}^\pm\rangle$, at each discretization point. With their help write the instantaneous density matrix operator as

$$\hat{\rho}_j = \iint d[\bar{\psi}_j^+, \psi_j^+] d[\bar{\psi}_j^-, \psi_j^-] e^{-\bar{\psi}_j^+ \psi_j^+ - \bar{\psi}_j^- \psi_j^-} |\psi_j^+\rangle \langle \psi_j^+| \hat{\rho}_j |\psi_j^-\rangle \langle \psi_j^-|. \quad (10.93)$$

Proceeding as in Section 5.3, show that the partition function $Z = \text{Tr}\{\hat{\rho}(t)\} = 1$ may be represented as a functional integral $Z = \int \mathbf{D} [\bar{\psi}_\sigma, \psi_\sigma] e^{iS}$ with the action

$$S(\bar{\psi}_\sigma^+, \psi_\sigma^+, \bar{\psi}_\sigma^-, \psi_\sigma^-) = \sum_\sigma \int dt [\bar{\psi}_\sigma^+ i\partial_t \psi_\sigma^+ - \bar{\psi}_\sigma^- i\partial_t \psi_\sigma^- - K(\bar{\psi}_\sigma^+, \psi_\sigma^+, \bar{\psi}_\sigma^-, \psi_\sigma^-)] \quad (10.94)$$

$$K(\bar{\psi}_\sigma^+, \psi_\sigma^+, \bar{\psi}_\sigma^-, \psi_\sigma^-) = H_p(\bar{\psi}_\sigma^+, \psi_\sigma^+) - H_p(\bar{\psi}_\sigma^-, \psi_\sigma^-) + i \sum_a \gamma_a \left(\bar{L}_a(\bar{\psi}_\sigma^-, \psi_\sigma^-) L_a(\bar{\psi}_\sigma^+, \psi_\sigma^+) - \frac{1}{2} \bar{L}_a L_a(\bar{\psi}_\sigma^+, \psi_\sigma^+) - \frac{1}{2} \bar{L}_a L_a(\bar{\psi}_\sigma^-, \psi_\sigma^-) \right), \quad (10.95)$$

where the three types of normally ordered operators $\hat{L}_a^\dagger [\hat{c}_\sigma^\dagger, \hat{c}_\sigma]$, $\hat{L}_a [\hat{c}_\sigma^\dagger, \hat{c}_\sigma]$, and $\hat{L}_a^\dagger \hat{L}_a [\hat{c}_\sigma^\dagger, \hat{c}_\sigma]$ correspondingly yield the three functions $\bar{L}_a(\bar{\psi}_\sigma, \psi_\sigma)$, $L_a(\bar{\psi}_\sigma, \psi_\sigma)$, and $\bar{L}_a L_a(\bar{\psi}_\sigma, \psi_\sigma)$ upon the substitution $\hat{c}_\sigma^\dagger \rightarrow \bar{\psi}_\sigma$ and $\hat{c}_\sigma \rightarrow \psi_\sigma$.

In particular, for $\hat{L}_{1,2} = \hat{c}_{\uparrow,\downarrow}$ and $\hat{L}_{3,4} = \hat{c}_{\uparrow,\downarrow}^\dagger$ the dissipative part of (10.95) takes the form

$$i \sum_\sigma \gamma_\sigma \left(\bar{\psi}_\sigma^- \psi_\sigma^+ - \frac{1}{2} \bar{\psi}_\sigma^+ \psi_\sigma^+ - \frac{1}{2} \bar{\psi}_\sigma^- \psi_\sigma^- \right) - i \sum_\sigma \tilde{\gamma}_\sigma \left(\bar{\psi}_\sigma^+ \psi_\sigma^- - \frac{1}{2} \bar{\psi}_\sigma^+ \psi_\sigma^+ - \frac{1}{2} \bar{\psi}_\sigma^- \psi_\sigma^- \right) \\ = -\frac{i}{2} \sum_\sigma (\bar{\psi}_\sigma^1, \bar{\psi}_\sigma^2) \begin{pmatrix} \gamma_\sigma + \tilde{\gamma}_\sigma & 2(\gamma_\sigma - \tilde{\gamma}_\sigma) \\ 0 & -\gamma_\sigma - \tilde{\gamma}_\sigma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_\sigma^1 \\ \psi_\sigma^2 \end{pmatrix}$$

where $\gamma_{\uparrow,\downarrow} = \gamma_{1,2}$ and $\tilde{\gamma}_{\uparrow,\downarrow} = \gamma_{3,4}$. Notice the minus sign in front of $\hat{L}_{3,4} = \hat{c}_{\uparrow,\downarrow}^\dagger$ part, which is due to the normal ordering and Grassmann anti-commutation. Show that the two actions (10.91) and (10.94) are equivalent, provided

$$\gamma_{1,2} = \gamma_\sigma = \kappa_\sigma \left[1 + \tanh\left(\frac{\varepsilon_\sigma}{2T}\right) \right]; \quad \gamma_{3,4} = \tilde{\gamma}_\sigma = \kappa_\sigma \left[1 - \tanh\left(\frac{\varepsilon_\sigma}{2T}\right) \right]. \quad (10.96)$$

This establishes the fact that the Lindblad equation (10.92), with $\hat{L}_{1,2} = \hat{c}_\sigma$ and $\hat{L}_{3,4} = \hat{c}_\sigma^\dagger$ and the coupling constants (10.96), describes the evolution of the reduced density matrix of the

driven-dissipative fermionic system, described earlier. The fact that the bath is in equilibrium translates into the Lindbladian analog of the FDT: the ratio of up, $\hat{c}_\sigma^\dagger$, and down, $\hat{c}_\sigma$, transition rates is $\tilde{\gamma}_\sigma/\gamma_\sigma = e^{-\varepsilon_\sigma/T}$.

A generic Keldysh Lindbladian quadratic action for a system with N fermion states may be written as ¹¹

$$S = \int dt \bar{\Psi} \begin{pmatrix} i\partial_t - \check{H}_p + i\check{Q} & i\check{D} \\ 0 & i\partial_t - \check{H}_p - i\check{Q} \end{pmatrix} \Psi, \quad (10.97)$$

where the $4N$ component Keldysh-Nambu spinors are

$$\bar{\Psi} = (\bar{\psi}_j^1, \psi_j^2, \bar{\psi}_j^2, \psi_j^1); \quad \Psi = (\psi_j^1, \bar{\psi}_j^2, \psi_j^2, \bar{\psi}_j^1)^T \quad (10.98)$$

$j = 1, \dots, N$, and $\check{H}_p, \check{Q}$, and $\check{D}$ are $2N \times 2N$ Hermitian matrices

$$\check{Q} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \gamma + \tilde{\gamma} & \eta_s^\dagger \\ \eta_s & \gamma^T + \tilde{\gamma}^T \end{pmatrix}; \quad \check{D} = \begin{pmatrix} \gamma - \tilde{\gamma} & \eta_a^\dagger \\ \eta_a & \tilde{\gamma}^T - \gamma^T \end{pmatrix}, \quad (10.99)$$

where $N \times N$ matrices γ and $\tilde{\gamma}$ are Hermitian, while η_s is complex symmetric and η_a is complex antisymmetric. This action is equivalent to the Lindblad equation (10.92) with the Hamiltonian $\hat{H}_p = (\hat{c}^\dagger, \hat{c}) \check{H}_p (\hat{c}, \hat{c}^\dagger)^T$ and the set of jump operators $\hat{L}_a = \sum_{j=1}^N (\mu_{aj} \hat{c}_j + v_{aj} \hat{c}_j^\dagger)$, where

$$\gamma_{ij} = \sum_{a=1}^{2N} \mu_{ai}^* \mu_{aj}; \quad \tilde{\gamma}_{ij} = \sum_{a=1}^{2N} v_{ai} v_{aj}^*; \quad \eta_{ij} = \sum_{a=1}^{2N} v_{ai}^* \mu_{aj} \quad (10.100)$$

and $\eta_{s,a} = \eta \pm \eta^T$.

Green functions corresponding to the action (10.97) are given by

$$\check{G}^{R, A}(\epsilon) = (\epsilon - \check{H}_p \pm i\check{Q})^{-1}; \quad \check{G}^K(\epsilon) = -\check{G}^R(\epsilon) i\check{D} \check{G}^A(\epsilon). \quad (10.101)$$

There are $2N$ complex poles of $\check{G}^R(\epsilon)$ at $\epsilon = \epsilon_a, a = 1, \dots, 2N$. They form pairs with opposite real parts and same nonpositive imaginary part. These poles determine $\mathcal{N}^2 = (2^N)^2$ eigenvalues of the Lindbladian super-operator, given by $\lambda_{\{n_a\}} = -i \sum_{a=1}^{2N} n_a \epsilon_a$, where $n_a = 0, 1$. There is at least one zero eigenvalue $\lambda_{\{0\}} = 0$. To find the corresponding stationary density matrix, one needs to diagonalize the Hermitian matrix $i\check{G}^K(t=0) = \int \frac{d\epsilon}{2\pi} i\check{G}^K(\epsilon)$ with a unitary matrix $\check{U}$ and real eigenvalues, denoted as $\pm \tanh(\beta_j/2)$. The stationary state of the Lindblad equation is given by $\hat{\rho}_{ss} \propto e^{-\sum_j \beta_j \hat{d}_j^\dagger \hat{d}_j}$, where $(\hat{d}^\dagger, \hat{d}) = (\hat{c}^\dagger, \hat{c}) \check{U}^\dagger$.

12.6 Kinetic Theory and Hydrodynamics

In this chapter we derive the kinetic equation and collision integral for electron-electron interactions. We then show how the hydrodynamic description of the Fermi liquid emerges from such a kinetic equation. Finally collective hydrodynamic modes are discussed.

12.6.1 11.1 Kinetic Equation

We now consider the kinetic equation for the fermionic distribution function $F_{\sigma\sigma'}(x, x')$, defined in Eq. (10.38). In this section we restrict ourselves to the singlet component $F = F^0 = \text{Tr} F_{\sigma\sigma}$, while the spin-density components defined as $\mathbf{F}^\mu = \text{Tr} F_{\sigma\sigma'} \hat{s}_{\sigma'\sigma}^\mu$ with $\mu = x, y, z$ are

¹¹ I am indebted to Foster Thompson for developing this representation and explaining it to me.

discussed in Section 11.4. According to Eqs. (10.54), knowledge of the fermionic distribution function is crucial to evaluate, for example, the polarization matrix away from equilibrium.

Following Section 6.3, one starts from the Dyson equation for the dressed fermionic Green function:

$$(\hat{G}_0^{-1} - \hat{\Sigma}) \circ \hat{G} = \hat{1}. \quad (11.1)$$

The subscript "0" indicates the bare inverse Green function. It has only diagonal components $[G_0^{R(A)}]^{-1}$, given by Eq. (10.36), while its Keldysh component is a pure regularization. The fermionic self-energy matrix $\hat{\Sigma}$ has the same structure as $\hat{G}^{-1}$, Eq. (10.30), with a finite Keldysh component. Thus the R and A components of the Dyson equation take the simple form

$$\left(i\partial_t + \frac{1}{2m} \nabla_r^2 - V^{\text{cl}} - \Sigma^{R(A)} \right) G^{R(A)} = \delta(t - t') \delta(r - r'). \quad (11.2)$$

Employing the parametrizations (10.38) $G^K = G^R \circ F - F \circ G^A$, where F is a Hermitian matrix, one may rewrite the Keldysh component of the Dyson equation as (cf. Eq. (6.24))

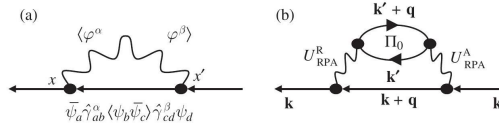


Figure 11.1 (a) Fermionic self-energy. (b) States entering the collision integral (11.11); incoming states are $\mathbf{k}$ and $\mathbf{k}' + \mathbf{q}$, while outgoing states are $\mathbf{k}'$ and $\mathbf{k} + \mathbf{q}$. Only states that conserve total energy participate in the collision integral.

$$- \left[\left(i\partial_t + \frac{1}{2m} \nabla_r^2 - V^{\text{cl}} \right); F \right] = \Sigma^K - (\Sigma^R \circ F - F \circ \Sigma^A). \quad (11.3)$$

This equation is the quantum kinetic equation for the fermionic distribution F . Its left-hand side is the kinetic term, while the right-hand side contains the collision integral. Upon Wigner transformation and restriction of the distribution function to the mass-shell, the kinetic term acquires exactly the same form (6.51) as in the case of a complex boson field. In what follows we focus on the structure of the fermionic collision integral.

The simplest diagram, Fig. 11.1(a), for the fermionic self-energy matrix, $\hat{\Sigma}_{ad}$, where $a, d = (1, 2)$ are the Keldysh indices, is obtained by expanding the Hubbard-Stratonovich vertex $e^{-i(\bar{\psi}_a \hat{\gamma}_{ab}^\alpha \psi_b) \varphi^\alpha}$, Eq. (10.65), to second order and averaging with the help of the Wick theorem over both fermion and boson fields. As a result, one finds

$$\begin{aligned} i\hat{\Sigma}_{ad}(x, x') &= \hat{\gamma}_{ab}^\alpha \langle \psi_b(x) \bar{\psi}_c(x') \rangle \hat{\gamma}_{cd}^\beta \times \langle \varphi^\beta(x') \varphi^\alpha(x) \rangle \\ &= \left(\hat{\gamma}^\alpha i\hat{G}(x, x') \hat{\gamma}^\beta \right)_{ad} \times \frac{i}{2} \hat{U}^{\beta\alpha}(x', x), \end{aligned} \quad (11.4)$$

where we used $\langle \psi_b(x) \bar{\psi}_c(x') \rangle = i\hat{G}_{bc}(x, x')$ for the fermion fields while the real boson fields' averages are $\langle \varphi^\beta(x') \varphi^\alpha(x) \rangle = \frac{i}{2} \hat{U}^{\beta\alpha}(x', x)$, see, for example, Eq. (10.65). Here summations over all repeated indices are understood. This leads to

$$\hat{\Sigma}_{ad} = \frac{i}{2} \left[\left(\hat{\gamma}^{\text{cl}} \hat{G} \hat{\gamma}^{\text{cl}} \right)_{ad} U^K + \left(\hat{\gamma}^{\text{cl}} \hat{G} \hat{\gamma}^q \right)_{ad} U^A + \left(\hat{\gamma}^q \hat{G} \hat{\gamma}^{\text{cl}} \right)_{ad} U^R \right]. \quad (11.5)$$

Finally, one finds for the $\Sigma^R = \Sigma_{11}$, $\Sigma^A = \Sigma_{22}$, and $\Sigma^K = \Sigma_{12}$ components of the fermionic self-energy

$$\begin{aligned}
\Sigma^{\text{R(A)}}(x, x') &= \frac{i}{2} \left[G^{\text{R(A)}}(x, x') U^K(x', x) + G^K(x, x') U^{\text{A(R)}}(x', x) \right] \\
\Sigma^K(x, x') &= \frac{i}{2} \left[G^K(x, x') U^K(x', x) + G^{\text{R}}(x, x') U^{\text{A}}(x', x) + G^{\text{A}}(x, x') U^{\text{R}}(x', x) \right] \\
&= \frac{i}{2} \left[G^K(x, x') U^K(x', x) - (G^{\text{R}}(x, x') - G^{\text{A}}(x, x')) (U^{\text{R}}(x', x) - U^{\text{A}}(x', x)) \right],
\end{aligned} \tag{11.6}$$

where in the last equality one has used that $G^{\text{R(A)}}(x, x') U^{\text{R(A)}}(x', x) = 0$, due to causality. For the same reason, $\Sigma_{21} = \frac{i}{2} (G^{\text{A}} U^{\text{A}} + G^{\text{R}} U^{\text{R}}) = 0$. As expected, the retarded and advanced components are lower and upper triangular matrices in time space, correspondingly, with $\Sigma^{\text{R}} = [\Sigma^{\text{A}}]^\dagger$, while $\Sigma^K = -[\Sigma^K]^\dagger$. Notice the close resemblance of expressions (11.6) to their bosonic counterparts, Eqs. (6.36)-(6.38).

We now perform a Wigner transform and introduce the mass-shell fermionic distribution function $\tilde{F}(\mathbf{r}, t, \mathbf{k})$, as discussed in Section 6.7. This way, Eq. (11.3) takes the form of the kinetic equation

$$[\partial_t + \mathbf{v}_k \nabla_{\mathbf{r}} - (\nabla_{\mathbf{r}} V^{\text{cl}}) \nabla_{\mathbf{k}}] \tilde{F}(\mathbf{r}, t, \mathbf{k}) = I^{\text{coll}}[\tilde{F}] \tag{11.7}$$

where we neglected renormalizations coming from $\text{Re } \Sigma$ for simplicity. The collision integral is given by the right-hand side of Eq. (11.3), where Eqs. (11.6) are substituted. The latter are algebraic in the real space-time, but they take the form of the convolutions in the momentum-energy space. One may simplify it by noticing that $G^{\text{R}} - G^{\text{A}} = -2\pi i \delta(\epsilon + \omega - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})$, to perform the energy ω integration. As a result, one finds for the collision integral

$$I^{\text{coll}}[\tilde{F}] = \frac{i}{2} \sum_{\mathbf{q}} \left\{ [\tilde{F}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \tilde{F}(\mathbf{k})] U^K + [\tilde{F}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \tilde{F}(\mathbf{k}) - 1] [U^{\text{R}} - U^{\text{A}}] \right\} \tag{11.8}$$

where we have suppressed the space and time dependence of $\tilde{F}$ and arguments of the interaction propagators are $\hat{U}(\mathbf{q}, \omega) = \hat{U}(\mathbf{q}, \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}})$. If one understands such an interaction as the bare instantaneous interaction potential, Eq. (10.65) (i.e. $U^{\text{R}} = U^{\text{A}} = U_s(\mathbf{q})$, while $U^K = 0$), one finds $I^{\text{coll}} = 0$ and therefore there is no collisional relaxation. Thus, one has to employ an approximation for $\hat{U}$ that contains some retardation. The simplest and most convenient one is RPA, where $\hat{U}_{\text{RPA}} = (U_s^{-1} \hat{\sigma}_1 + \hat{\Pi}_0)^{-1}$, see Eqs. (10.67) and (10.68), with the frequencydependent matrix $\hat{\Pi}_0$, which is thus nonlocal in time. Employing Eq. (10.49), it is convenient to write the components of this matrix relation in the following way:

$$U_{\text{RPA}}^{\text{R(A)}} = U_{\text{RPA}}^{\text{R}} (U_s^{-1} + \Pi_0^{\text{A(R)}}) U_{\text{RPA}}^{\text{A}}; \quad U_{\text{RPA}}^{\text{K}} = -U_{\text{RPA}}^{\text{R}} \Pi_0^{\text{K}} U_{\text{RPA}}^{\text{A}}. \tag{11.9}$$

This brings Eq. (11.8) to the form

$$\begin{aligned}
I^{\text{coll}}[\tilde{F}] &= -\frac{i}{2} \sum_{\mathbf{q}} |U_{\text{RPA}}^{\text{R}}(\mathbf{q}, \omega)|^2 \\
&\times \left\{ [\tilde{F}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \tilde{F}(\mathbf{k})] \Pi_0^{\text{K}}(\mathbf{q}, \omega) - [\tilde{F}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \tilde{F}(\mathbf{k}) - 1] [\Pi_0^{\text{R}}(\mathbf{q}, \omega) - \Pi_0^{\text{A}}(\mathbf{q}, \omega)] \right\}
\end{aligned} \tag{11.10}$$

where $\omega = \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}}$. We employ now Eqs. (10.54), which express components of the polarization matrix $\hat{\Pi}_0(\mathbf{q}, \omega)$ through the fermionic distribution function, and substitute them in Eq. (11.10). This way, we find the collision integral depicted in Fig. 11.1(b):

$$I^{\text{coll}}[\tilde{F}] = -\frac{\pi}{2} \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{k}'} |U_{\text{RPA}}^{\text{R}}(\mathbf{q}, \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}})|^2 \delta(\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}} + \epsilon_{\mathbf{k}'}) \quad (11.11)$$

$$\times \left\{ [\tilde{F}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \tilde{F}(\mathbf{k})] [\tilde{F}(\mathbf{k}') \tilde{F}(\mathbf{k}' + \mathbf{q}) - 1] - [\tilde{F}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \tilde{F}(\mathbf{k}) - 1] [\tilde{F}(\mathbf{k}' + \mathbf{q}) - \tilde{F}(\mathbf{k}')] \right\}$$

compare it with the corresponding bosonic result (8.79). Notice that the total energy and momentum in the inelastic cross section of the diagram in Fig. 11.1(b) are equal to the external energy and momentum. The right-hand side acquires a more familiar form if expressed in terms of the fermionic occupation numbers $\tilde{F}(\mathbf{k}) = 1 - 2n_{\mathbf{k}}$. Then the expression in the curly brackets on the right-hand side is $8 \{n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}n_{\mathbf{k}'}(1 - n_{\mathbf{k}})(1 - n_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}) - n_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}n_{\mathbf{k}}(1 - n_{\mathbf{k}'})(1 - n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})\}$; recall also that the left-hand side of the kinetic equation is $-2\partial_t n_{\mathbf{k}} + \dots$. This shows that for the "in" process states $\mathbf{k}$ and $\mathbf{k}' + \mathbf{q}$ should be empty, while states $\mathbf{k}'$ and $\mathbf{k} + \mathbf{q}$ are occupied, and vice versa for the "out" process. Because of the energy conservation $\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}} = \epsilon_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}'}$, one may show that the collision integral is nullified if $\tilde{F}(\mathbf{k}) = F^{\text{eq}}(\epsilon_{\mathbf{k}}) = \tanh(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)/2T$; this is the equilibrium fermionic distribution function. As a result, the right-hand side of the kinetic equation (11.3) is zero in equilibrium, thus $\Sigma^K = (\Sigma^{\text{R}} - \Sigma^{\text{A}}) \tanh(\epsilon - \mu)/2T$. Since the bare Green functions obey the same relation, it justifies the FDT (10.32) for the full dressed equilibrium Green function.

The square of the matrix element in the collision integral is given by the RPA screened interaction potential $|U_{\text{RPA}}^{\text{R}}(\mathbf{q}, \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}})|^2$. The latter is itself a function of the fermionic distribution function $\tilde{F}$. It is often the case, however, that $\omega = \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}} \approx v_F q \ll \epsilon_F$. In this limit $\Pi_0^{\text{R}}(\mathbf{q}, \omega) \approx v$ is independent of the distribution; see Eq. (10.55). If also $q \ll \kappa_{\text{TF}}^{-1} = \sqrt{4\pi e^2 \nu}$, one finds the universal result $U_{\text{RPA}}^{\text{R}} \approx 1/\nu$.

Let us look at the relaxation of a particle excited to a state $\mathbf{k}$ with the energy $\epsilon_{\mathbf{k}}$ above the Fermi energy. If the rest of the system is in equilibrium, say at zero temperature, then one may focus on the "out" term of the collision integral. This leads to $\partial_t n_{\mathbf{k}} = -n_{\mathbf{k}}/\tau_{\text{sc}}$, where the "out" relaxation rate is

$$\frac{1}{\tau_{\text{sc}}} = \frac{2\pi}{v^2} \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{k}'} n_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}(1 - n_{\mathbf{k}'}) (1 - n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) \delta(\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}} + \epsilon_{\mathbf{k}'}) \propto \frac{\xi_{\mathbf{k}}^2}{\epsilon_F} \quad (11.12)$$

where $\xi_{\mathbf{k}} \equiv \epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_F$.¹ The fact that $1/\tau_{\text{sc}} \ll |\xi_{\mathbf{k}}| \ll \epsilon_F$ is crucial for the consistency of the semiclassical quasiparticle representation employed here.

12.6.2 11.2 Hydrodynamics of the Fermi Liquid

The hydrodynamics considers non-equilibrium excitations, which are characterized by spatial and temporal scales that are much larger than the mean free path and the mean free time between two-particle collisions. From the point of view of such excitations the collisions are very frequent and thus they tend to locally equilibrate the liquid. The local equilibrium distribution is constrained by the local values of conserved quantities (aka conserved charges). The conserved charges are special because they cannot equilibrate locally on the fast timescale of the mean free time. Indeed, being conserved, they require transport across large spatial scales dictated by long wavelength perturbations. Hydrodynamics provides equations of motion for the conserved charges.

In our example of spinless electrons there are three conserved charges: number of particles (i.e. electric charge), momentum, and energy. Indeed the collision integral (11.11) describes two incoming and two outgoing particles with the incoming momentum $\mathbf{k} + (\mathbf{k}' + \mathbf{q})$ and the equal outgoing momentum $(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + \mathbf{k}'$ and energies $\epsilon_{\mathbf{k}} + \epsilon_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}} = \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \epsilon_{\mathbf{k}'}$ (cf. delta-function in Eq. (11.11)). These conservation laws imply

$$\sum_{\mathbf{k}} I^{\text{coll}}[n] = \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{k} I^{\text{coll}}[n] = \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} I^{\text{coll}}[n] = 0 \quad (11.13)$$

valid locally at every point $(\mathbf{r}, t)$. These equalities may be, of course, checked directly using Eq. (11.11) and its symmetry properties upon exchange of $\mathbf{k}$ and

¹ To see this one may use that at $T = 0$

$$1/\tau_{\text{sc}} = - \sum_{\mathbf{q}} \int d\omega |U_{\text{RPA}}^{\text{R}}(\mathbf{q}, \omega)|^2 2 \text{Im} \Pi^{\text{R}}(\mathbf{q}, \omega) (1 - n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) \delta(\omega + \epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})$$

According to Eq. (10.55), $\text{Im} \Pi^{\text{R}} = \pi \nu \omega / (2v_{\text{F}} q)$ for $|\omega| < v_{\text{F}} q$, where $\omega = \epsilon_{\mathbf{k}} + \mathbf{q} - \epsilon_{\mathbf{k}} \approx \mathbf{k} \cdot \mathbf{q} / m = kqz/m \approx v_{\text{F}} qz$ with $z = \cos \theta$. Because of the factor $(1 - n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})$ the state $\mathbf{k} + \mathbf{q}$ is empty, leading to $\epsilon_{\text{F}} < \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} < \epsilon_{\mathbf{k}}$. This leads to $-\xi_{\mathbf{k}} = \epsilon_{\text{F}} - \epsilon_{\mathbf{k}} < kqz/m < 0$ and therefore the lower limit of the angular z -integration is $-\xi_{\mathbf{k}} / (v_{\text{F}} q)$. As a result

$$\frac{1}{\tau_{\text{sc}}} = -\pi v \int \frac{q^2 dq}{4\pi^2} |U_{\text{RPA}}^{\text{R}}(q)|^2 \int_{-\xi_{\mathbf{k}}/(v_{\text{F}} q)}^0 dz = \frac{v \xi_{\mathbf{k}}^2}{8\pi v_{\text{F}}^2} \int dq |U_{\text{RPA}}^{\text{R}}(q)|^2 \propto \frac{v \xi_{\mathbf{k}}^2}{v_{\text{F}}^2} \frac{k_{\text{F}}}{v^2},$$

where we used that $U_{\text{RPA}}^{\text{R}}(q) \approx 1/v$, while the q -integration is to be cut off at $q \approx k_{\text{F}}$. Recalling that $v \sim m k_{\text{F}}$, one obtains Eq. (11.12).

$\mathbf{k}'$. Therefore the kinetic equation (11.7), which we write here in terms of the occupation numbers $n_{\mathbf{k}} = (1 - \tilde{F}(\mathbf{k}))/2$, takes the form

$$[\partial_t + \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} - \nabla_{\mathbf{r}} V \cdot \nabla_{\mathbf{k}}] n_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) = -\frac{1}{2} I^{\text{coll}}[n] \quad (11.14)$$

where $V(\mathbf{r}, t)$ is an effective potential. It leads to the three continuity relations:

$$\partial_t \rho + \text{div} \mathbf{J} = 0; \quad \partial_t p^{\mu} + \partial_{\nu} \Pi^{\mu\nu} = -\partial_{\mu} V \rho; \quad \partial_t E_e + \text{div} \mathbf{J}_h = -\frac{1}{m} \nabla_{\mathbf{r}} V \cdot \mathbf{p} \quad (11.15)$$

for the charge, momentum, and energy densities, defined as

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t); \quad \mathbf{p}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{k} n_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t); \quad E_e(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t). \quad (11.16)$$

Here $\mu = x, y, z$ and $\xi_{\mathbf{k}} = \epsilon_{\mathbf{k}} - \mu$. The corresponding fluxes, according to Eq. (11.14), are given by

$$\begin{aligned} \mathbf{J}(\mathbf{r}, t) &= \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{v}_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) \\ \Pi^{\mu\nu}(\mathbf{r}, t) &= \sum_{\mathbf{k}} k^{\mu} v_{\mathbf{k}}^{\nu} n_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) \\ \mathbf{J}_h(\mathbf{r}, t) &= \sum_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}} \mathbf{v}_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) \end{aligned} \quad (11.17)$$

In deriving the right-hand sides of Eqs. (11.15) we have used integration by parts, for example, $\sum_{\mathbf{k}} k^{\mu} \nabla_{\mathbf{k}}^{\nu} n_{\mathbf{k}} = -\delta^{\mu\nu} \sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}} = -\delta^{\mu\nu} \rho$, and assumed absence of particles at $k \rightarrow \infty$. The right-hand side of the momentum equation reflects change of the total momentum by an external force, $-\partial_{\mu} V$, while that of the energy equation reflects the work done on a moving

liquid by this force. Though formally exact, these equations are of no practical use yet, since they require knowledge of the distribution function $n_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t)$. The latter is to be determined from solving the kinetic equation (11.14).

To make a progress we use the assumed slowness of charges and fluxes on the scale of the mean free path/time. This means that in the zeroth approximation the sought distribution function nullifies the collision integral. To find a generic form of such distribution, let us rewrite the "in minus out" part of the collision integral as

$$\begin{aligned} & n_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}_1} (1 - n_{\mathbf{k}'}) (1 - n_{\mathbf{k}'_1}) - n_{\mathbf{k}'} n_{\mathbf{k}'_1} (1 - n_{\mathbf{k}}) (1 - n_{\mathbf{k}_1}) \\ &= n_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}_1} n_{\mathbf{k}'} n_{\mathbf{k}'_1} \left[\frac{1 - n_{\mathbf{k}'}}{n_{\mathbf{k}'}} \frac{1 - n_{\mathbf{k}'_1}}{n_{\mathbf{k}'_1}} - \frac{1 - n_{\mathbf{k}}}{n_{\mathbf{k}}} \frac{1 - n_{\mathbf{k}_1}}{n_{\mathbf{k}_1}} \right], \end{aligned} \quad (11.18)$$

where $\mathbf{k}$ and $\mathbf{k}_1 = \mathbf{k}' + \mathbf{q}$ are the incoming momenta, while $\mathbf{k}'$ and $\mathbf{k}'_1 = \mathbf{k} + \mathbf{q}$ — the outgoing ones. To nullify the square bracket on the right-hand side of this expression it is necessary and sufficient that $\ln[(1 - n_{\mathbf{k}})/n_{\mathbf{k}}]$ is a linear function of the three conserved charges. This way, one finds

$$\frac{1 - n_{\mathbf{k}}}{n_{\mathbf{k}}} = \exp \left\{ \frac{\epsilon_{\mathbf{k}} - \mathbf{k} \cdot \mathbf{u} - \mu}{T} \right\}, \quad (11.19)$$

where μ , $\mathbf{u}$, and T^{-1} are three arbitrary multipliers for the particle number, momentum, and energy, correspondingly. If these three quantities are space- and time-independent constants, the kinetic equation is identically satisfied (in the absence of an external force). The hydrodynamic approximation promotes them to being slow functions: $\mu \rightarrow \mu + \delta\mu(\mathbf{r}, t)$, $\mathbf{u} \rightarrow \mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$, and $T \rightarrow T + \delta T(\mathbf{r}, t)$. This way, the collision integral is still nullified identically, while the left-hand side of the kinetic equation (11.14), although nonzero, is small as long as all the variations are slow. The corresponding distribution function is

$$n_{\mathbf{k}}^{(0)} = \frac{1}{e^{\frac{\epsilon_{\mathbf{k}} - \mathbf{k} \cdot \mathbf{u} - \mu}{T}} + 1} \approx n_F(\xi_{\mathbf{k}}) - \frac{\partial n_F(\xi_{\mathbf{k}})}{\partial \xi_{\mathbf{k}}} \left(\mathbf{k} \cdot \mathbf{u} + \delta\mu + \frac{\xi_{\mathbf{k}} \delta T}{T} \right), \quad (11.20)$$

where n_F is the Fermi distribution and we expanded to the first order in slowly varying components.

We now use this quasi-equilibrium distribution to evaluate the conserved charges (11.16) and their fluxes (11.17). We use $\sum_{\mathbf{k}} = \int d\xi_{\mathbf{k}} \nu(\xi_{\mathbf{k}}) \int d\Omega_{\mathbf{k}}$, where $\nu(\xi_{\mathbf{k}})$ is the density of states and $\int d\Omega_{\mathbf{k}}$ is the angular integral in the momentum space. Furthermore we assume sufficiently low temperature, which allows us to put $\partial n_F / \partial \xi_{\mathbf{k}} \approx -\delta(\xi_{\mathbf{k}})$, though $\int d\xi \xi^2 \partial n_F / \partial \xi = -T^2 \pi^2 / 3$. Finally, to simplify notations, we use an isotropic dispersion relation $\epsilon_{\mathbf{k}} = \epsilon_k$. This way, one finds

$$\delta\rho(\mathbf{r}, t) = v\delta\mu(\mathbf{r}, t); \quad \mathbf{p}(\mathbf{r}, t) = m\rho\mathbf{u}(\mathbf{r}, t); \quad \delta E_e(\mathbf{r}, t) = c_V \delta T(\mathbf{r}, t), \quad (11.21)$$

where $v = v(\epsilon_F) = \delta\rho/\delta\mu$ is the compressibility, $\rho_0 = vk_F v_F / 3$ is the average density and $c_V(T) = \nu T \pi^2 / 3$ is the specific heat. In the first and third expressions here we have subtracted space-time-independent background density, $\rho_0(\mu)$, and the energy density, $E_0(\mu, T)$, that is, the Fermi pressure. Turning to the fluxes (11.17), one obtains

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = \rho\mathbf{u}(\mathbf{r}, t); \quad \Pi^{\mu\nu}(\mathbf{r}, t) = E_0(\mu + \delta\mu(\mathbf{r}, t), T) \delta^{\mu\nu}; \quad \mathbf{J}_h(\mathbf{r}, t) = 0. \quad (11.22)$$

Substituting these charges and fluxes into the conservation laws (11.15), one obtains dissipationless hydrodynamic equations of the Fermi liquid. They are the continuity and the Newton-Euler equations:

$$\partial_t \rho + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}) = 0; \quad m \partial_t(\rho \mathbf{u}) = -\nabla_{\mathbf{r}} E_0(\rho, T) - \rho \nabla_{\mathbf{r}} V \quad (11.23)$$

Due to the absence of the heat current, $\mathbf{J}_h = 0$, in this approximation, the temperature should be time independent $T = \text{const}$.

To include the heat flux as well as the viscosity of the Fermi liquid one needs to go beyond the quasi-equilibrium approximation (11.19) for the distribution function. To this end, we look for a solution of the kinetic equation (11.14) in the form of $n_{\mathbf{k}} = n_{\mathbf{k}}^{(0)} + \delta n_{\mathbf{k}}$, where $n_{\mathbf{k}}^{(0)}(\mathbf{r}, t)$ is the quasi-equilibrium solution (11.19) and $\delta n_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t)$ is a small deviation. As we will see momentarily, the smallness of $\delta n_{\mathbf{k}}$ is controlled by the ratio of the mean scattering time(length), $\tau_{\text{sc}} (v_F \tau_{\text{sc}})$ and characteristic time(space) scale of the perturbations. On the left-hand side of the kinetic equation (11.14) one may keep only $n_{\mathbf{k}}^{(0)}$ and disregard $\delta n_{\mathbf{k}}$. On the right-hand side, $n_{\mathbf{k}}^{(0)}$ nullifies the collision integral and therefore $\delta n_{\mathbf{k}}$ ought to be kept. One may linearize the collision integral in the small deviation, reducing it to a linear functional of $\delta n_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t)$, which is in general nonlocal in $\mathbf{k}$ -space. To simplify presentation we treat this functional in the relaxation (scattering) time approximation, that is, substitute it by a local linear relation:

$$-\frac{1}{2} I^{\text{coll}}[n] \approx -\frac{1}{\tau_{\text{sc}}} \delta n_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t); \quad \frac{1}{\tau_{\text{sc}}} \propto \frac{T^2}{\epsilon_F} \quad (11.24)$$

where we used Eq. (11.12) and put $\xi_{\mathbf{k}} = \epsilon_{\mathbf{k}} - \mu \approx T$. The more accurate treatment (see Refs. [245, 246] and Problem 12.6.1) leads to qualitatively the same results. With the help of Eqs. (11.14) and (11.24) one finds

$$\delta n_{\mathbf{k}} = -\tau_{\text{sc}} [\partial_t + \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \nabla_{\mathbf{r}}] n_{\mathbf{k}}^{(0)} \approx \tau_{\text{sc}} \frac{\partial n_F}{\partial \xi_{\mathbf{k}}} [\partial_t + \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \nabla_{\mathbf{r}}] \left(\mathbf{k} \cdot \mathbf{u} + \delta \mu + \frac{\xi_{\mathbf{k}} \delta T}{T} \right) \quad (11.25)$$

Let us first use this expression to find a heat current $\mathbf{J}_h$, Eq. (11.17). Since $\partial n_F / \partial \xi$ is an even function of ξ , only the last term on the RHS of Eq. (11.25), which is odd in ξ , contributes to $\mathbf{J}_h$. Integrating over ξ and angles, one finds $\mathbf{J}_h = -\kappa \nabla_{\mathbf{r}} \delta T$, where the thermal conductivity is given by $\kappa = \tau_{\text{sc}} c_V v_F^2 / 3$. Since $\tau_{\text{sc}} \sim T^{-2}$ and $c_V \sim T$, the thermal conductivity scales as $\kappa \sim T^{-1}$ and grows upon decreasing the temperature. One should keep in mind, though, that the hydrodynamic treatment runs out of its validity at very small temperatures, where $l_{\text{sc}} = v_F \tau_{\text{sc}} > (\nabla_{\mathbf{r}})^{-1}$ – the characteristic length of the thermal gradient. Employing the energy continuity relation (11.15) along with Eq. (11.21), one finds the Fick's diffusion equation for the temperature variations

$$\partial_t \delta T(\mathbf{r}, t) = D_h \nabla_{\mathbf{r}}^2 \delta T(\mathbf{r}, t) \quad D_h = \frac{\kappa}{c_V} = \frac{v_F^2 \tau_{\text{sc}}}{3} \quad (11.26)$$

Finally, we look for the $\sim \tau_{\text{sc}}$ contribution to the momentum flux tensor $\Pi^{\mu\nu}$. Only even in ξ terms on the right-hand side of Eq. (11.25) contribute. Due to angular integration, only $\mathbf{v}_{\mathbf{k}} \nabla_{\mathbf{r}}(\mathbf{k} \cdot \mathbf{u})$ and $\partial_t \delta \mu$ remain. Straightforward calculation ² yields

$$\delta \Pi^{\mu\nu} = -\tau_{\text{sc}} \frac{v v_F^2 k_F^2}{15} \left[\delta^{\mu\nu} \left(\partial_{\lambda} u^{\lambda} + \frac{5}{v_F k_F} \partial_t \delta \mu \right) + \partial_{\mu} u^{\nu} + \partial_{\nu} u^{\mu} \right], \quad (11.27)$$

according to the continuity relation (11.23), $\partial_t \delta \mu = -\frac{\rho_0}{\nu} \operatorname{div} \mathbf{u} = -\frac{v_F k_F}{3} \partial_{\lambda} u^{\lambda}$. As a result one finds for the momentum flux tensor

$$\Pi^{\mu\nu} = E_0 \delta^{\mu\nu} - \eta \left[\partial_{\mu} u^{\nu} + \partial_{\nu} u^{\mu} - \frac{2}{3} \delta^{\mu\nu} \partial_{\lambda} u^{\lambda} \right]; \quad \eta = \tau_{\text{sc}} \frac{v v_F^2 k_F^2}{15} \quad (11.28)$$

The coefficient η in front of the traceless symmetric part of the momentum flux tensor is called viscosity. We found that viscosity of the Fermi liquid increases at low temperatures as

$\sim T^{-2}$, [219]. The viscosity term results in a dissipation added to the Euler equation (11.23), which acquires the form

$$m\partial_t(\rho\mathbf{u}) = -\nabla_{\mathbf{r}}\left(E_0 - \frac{\eta}{3}\text{div}\mathbf{u}\right) + \eta\nabla_{\mathbf{r}}^2\mathbf{u} - \rho\nabla_{\mathbf{r}}V \quad (11.29)$$

This equation is employed in the next section to discuss damping of the hydrodynamic modes.

12.6.3 11.3 Hydrodynamic Modes

Here we look at small harmonic deviations from a stationary uniform Fermi liquid. To this end we use $\nabla_{\mathbf{r}}E_0 = (\partial E_0/\partial\mu)(\partial\mu/\partial\rho)\nabla_{\mathbf{r}}\rho$ and $\partial E_0/\partial\mu = \rho_0$ along with $\partial\mu/\partial\rho = 1/\nu$. Neglecting for a moment viscosity, we take divergence of both sides of the Euler equation (11.23) and use the continuity equation to find

$$m\partial_t^2\rho = \frac{\rho_0}{v}\nabla_{\mathbf{r}}^2\rho + \rho_0\nabla_{\mathbf{r}}^2V \quad (11.30)$$

Here V is an effective potential, which we use to incorporate the collisionless part of the inter-particle interactions.

For a short-range interacting Fermi liquid like ^3He or atomic gases, one may employ the local density approximation to write $V(\mathbf{r},t) = g(\rho(\mathbf{r},t) - \rho_0)$, where g is an interaction constant. This brings Eq. (11.30) to the form of the acoustic wave equation $\partial_t^2\rho - v_s^2\nabla_{\mathbf{r}}^2\rho = 0$, where the sound velocity is

given by $v_s^2 = \rho_0(v^{-1} + g)/m$. (In other words, ρ_0V should have been considered as a part of the pressure E_0 , which serves to renormalize the thermodynamic compressibility $\partial\mu/\partial\rho = v^{-1} + g$.) This is the hydrodynamic (or ordinary) sound mode, mentioned at the end of Section 10.7. Using compressibility of the noninteracting Fermi gas $v = 3\rho_0/v_F k_F$, one finds $v_s^2 = v_F^2/3$ (valid if $g \rightarrow 0$). The hydrodynamic sound mode is different from the collisionless zero-sound mode, Section 10.7. For not-too-strong interactions its velocity, v_s , is less than the Fermi velocity, and therefore it overlaps with the particle-hole continuum where $\text{Im}\Pi_0^R(\mathbf{q},\omega) \neq 0$, Fig. 10.2. Yet, as is discussed in what follows, it is underdamped for $\omega\tau_{sc} \ll 1$. This should be contrasted with the zero sound-mode with the velocity above the particle-hole continuum, $v_{zs} \gtrsim v_F$, yet overdamped by the Landau damping mechanism in the same regime $\omega\tau_{sc} \ll 1$.

For charged particles, like electrons, the effective potential satisfies the Poisson equation $\nabla_{\mathbf{r}}^2V = 4\pi e^2(\rho(\mathbf{r},t) - \rho_0)$. Substituting it in Eq. (11.30) and passing to the Fourier representation, one finds the dispersion relation of the collective hydrodynamic mode

$$\omega_{\mathbf{q}}^2 = \omega_p^2 + v_F^2 q^2/3 \quad (11.31)$$

where $\omega_p = \sqrt{4\pi e^2\rho_0/m}$ is the plasma frequency. Therefore, the dispersion of the hydrodynamic mode is basically the same as that of the collisionless plasmon mode, Eq. (7.14). However, its nature is quite different and, in particular, its damping is due to the viscosity rather than to the Landau damping.

To discuss dissipation of the hydrodynamic modes we include the viscous terms through Eq. (11.29). Along with the continuity equation it leads to the friction term in the equation for the Fourier components of the density:

$$\partial_t^2\rho_{\mathbf{q}} = -\omega_{\mathbf{q}}^2\rho_{\mathbf{q}} - 2\gamma_{\mathbf{q}}\partial_t\rho_{\mathbf{q}}; \quad \gamma_{\mathbf{q}} = \frac{2}{3}\frac{\eta q^2}{\rho_0 m} \quad (11.32)$$

⁰² Here we used $\int d\Omega_{\mathbf{k}} n^\mu n^\nu n^\lambda n^\eta = \frac{1}{d(d+2)} (\delta^{\mu\nu}\delta^{\eta\lambda} + \delta^{\mu\eta}\delta^{\nu\lambda} + \delta^{\mu\lambda}\delta^{\nu\eta})$, where $\mathbf{n}$ is a unit vector in momentum space, along with $\int d\Omega_{\mathbf{k}} n^\mu n^\nu = \frac{1}{d}\delta^{\mu\nu}$.

where $\omega_{\mathbf{q}}$ is either the plasmon dispersion (11.31) for electrons, or $\omega_{\mathbf{q}} = v_s q$ for neutral gases, while $\gamma_{\mathbf{q}}$ is the friction coefficient. This viscous damping of hydrodynamic modes should be compared with the Landau damping, given by $\text{Im} \Pi_0^{\text{R}}(\mathbf{q}, \omega_{\mathbf{q}})$, Eq. (10.57). The latter is applicable for the collective modes in the collisionless regime $\omega \tau_{\text{sc}} \gg 1$. Notice that the viscous friction $\gamma_{\mathbf{q}} \sim T^{-2}$ is decreasing upon increasing the temperature. On the other hand, the Landau damping is rapidly increasing with the temperature. Focusing on the short-range acoustic case, one observes that the hydrodynamic sound mode is underdamped as long as $\gamma_q \ll v_s q$, dictating $q \ll 3v_s \rho_0 m / (2\eta) \propto l_{\text{sc}}^{-1}$, where $l_{\text{sc}} = v_F \tau_{\text{sc}}$ and we put $v_s \sim v_F$. This coincides with the region of validity of the hydrodynamic approximation, $ql_{\text{sc}} \ll 1$. Therefore, throughout the hydrodynamic regime the sound mode is underdamped. It is propagating with the inverse decay length, $\xi_q^{-1} = \gamma_q / v_s \sim q^2 l_{\text{sc}} \ll q$.

12.6.4 11.4 Magnetization Dynamics

We now discuss the role of the spin degrees of freedom in the kinetics of the Fermi liquid. In general, the spin part of the kinetic equation is written for the matrix distribution function $\hat{F}_{\sigma\sigma'}(x, x')$ defined in Eq. (10.38). Keeping the Zeeman magnetic field in the Hamiltonian, one writes the kinetic equation as

$$-\left[\left(i\partial_t + \frac{1}{2m}\nabla_r^2 - V^{\text{cl}} - \mathbf{H}_Z \cdot \vec{s}\right); \hat{F}\right] = -i\hat{I}^{\text{coll}}[\hat{F}] \quad (11.33)$$

where both the distribution function and the collision integral are matrices in spin space as well as in (x, x') space. One can now introduce the scalar and spin-vector components of the distribution function, as $F(x, p) = \text{Tr}\{\hat{F}(x, p)\}$ and $\mathbf{F}^\mu(x, p) = \text{Tr}\{\hat{F}(x, p)\hat{s}^\mu\}$ (where $\mu = x, y, z$, and $\hat{s}^\mu$ are Pauli matrices in the spin space). We now perform the Wigner transformations and restrict the distribution function to the mass-shell, as discussed in Section 6.7. This way we find the scalar and vector on-shell distribution functions $\tilde{F}(\mathbf{r}, t, \mathbf{k})$ and $\tilde{\mathbf{F}}(\mathbf{r}, t, \mathbf{k})$. The former one was the subject of the previous sections, while here we focus on the latter.

There is a subtlety involved in restricting the distribution matrix onto the massshell. Indeed, in the presence of, for example, a static Zeeman field, $\mathbf{H}_Z$, the massshells of spin up and down electrons are different by the respective shifts $\pm H_Z$ in the reference frame where the magnetic field is in the z -direction. This calls for two different mass-shell restrictions for the diagonal elements of $F_{\sigma\sigma'}$, but creates ambiguity in treatment of the off-diagonal ones. We avoid it by treating magnetic fields (including the one induced by the ferromagnetic Stoner instability) as small perturbations, which do not affect the mass-shell definition. There is a price to pay for this approach, which is a presence of a vector component $\tilde{\mathbf{F}}(\mathbf{k})$ in equilibrium. Notice that the FDT, $F_{\sigma\sigma'}(\epsilon) = \delta_{\sigma\sigma'} \tanh \epsilon / (2T)$, is still intact and it is only the substitution $\epsilon \rightarrow \epsilon_{\mathbf{k}\sigma}$ that is the reason why the equilibrium $\hat{F}(\mathbf{k})$ deviates from the unit matrix.

We now project the matrix kinetic equation (11.33) onto the spin directions by taking traces with $\hat{s}^\mu$. The resulting kinetic equation for the vector spin distribution function, $\tilde{\mathbf{F}}(\mathbf{r}, t, \mathbf{k})$, takes the form

$$\hat{Z}^{-1} \partial_t \tilde{\mathbf{F}} + \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \nabla_{\mathbf{r}} \tilde{\mathbf{F}} - (\nabla_{\mathbf{r}} V) \nabla_{\mathbf{k}} \tilde{\mathbf{F}} - 2 [\mathbf{H}_Z \times \tilde{\mathbf{F}}] = \mathbf{I}^{\text{coll}}[\tilde{\mathbf{F}}, \tilde{\mathbf{F}}], \quad (11.34)$$

where we used that $\hat{\tilde{F}} = (\tilde{F} + \tilde{\mathbf{F}} \cdot \vec{s})/2$ and $\text{Tr}\{[\hat{s}^\mu, \hat{s}^\nu] \hat{s}^\lambda\} = 4i\epsilon^{\mu\nu\lambda}$ as well as $[\mathbf{H}_Z \times \tilde{\mathbf{F}}]^\mu = \epsilon^{\mu\nu\lambda} \mathbf{H}_Z^\nu \tilde{\mathbf{F}}^\lambda$. The quasiparticle tensor weight is defined (cf. Eq. (6.51)) as $[\hat{Z}^{-1}]^{\mu\nu} = \delta^{\mu\nu} - \partial_\epsilon \text{Tr}\{(\hat{\Sigma}^{\text{R}} \hat{S}^\mu + \hat{S}^\mu \hat{\Sigma}^{\text{A}}) \hat{S}^\nu\} / 4$. In what follows we will approximate it as $\hat{Z} = 1$. The vector collision integral is found as $\mathbf{I}^{\text{coll}} = \text{Tr}\{\hat{I}^{\text{coll}} \hat{S}^\mu\}$. The factor of two in front of the Zeeman field is an electron g-factor.

Since the interaction Hamiltonian (10.58) does not flip spins of two interacting particles, the corresponding collisions are spin conserving. This leads to (cf. Eq. (11.13))

$$\sum_{\mathbf{k}} \text{Tr} \left\{ \hat{s}^\mu \hat{F}^{\text{coll}} \right\} = \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{I}^{\text{coll}} = 0 \quad (11.35)$$

Therefore the local magnetization density, defined as

$$\mathbf{S}(\mathbf{r}, t) = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \tilde{\mathbf{F}}(\mathbf{r}, t, \mathbf{k}), \quad (11.36)$$

is an extra conserved charge, in addition to the particle number, momentum, and energy considered in Section 11.2. Taking the sum over all states $\mathbf{k}$ in Eq. (11.34), one finds the corresponding continuity relation

$$\partial_t S^\mu + \partial_\nu J_S^{\mu\nu} = 2 [\mathbf{H}_Z \times \mathbf{S}]^\mu \quad (11.37)$$

where we put $\hat{Z} = 1$ for brevity. The magnetization flux tensor is given by $J_S^{\mu\nu}(\mathbf{r}, t) = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^\nu \tilde{F}^\mu(\mathbf{r}, t, \mathbf{k})$.

Here we apply this equation to discuss magnetization dynamics in an isotropic itinerant ferromagnet. Neglecting for a moment the magnetization flux tensor part, we focus on the dissipationless part, $\partial_t \mathbf{S} = 2 [\mathbf{H}_Z \times \mathbf{S}]$, known as the LandauLifshitz equation. The effective magnetic field, $\mathbf{H}_Z$, should be considered as a way to incorporate collisionless interactions between spins. It is given $\mathbf{H}_Z = -\delta \mathcal{F}[\mathbf{S}] / \delta \mathbf{S}$, where $\mathcal{F}[\mathbf{S}]$ is the Landau free energy functional of the magnetization $\mathbf{S}(\mathbf{r}, t)$. In a vicinity of the second-order Stoner transition in the isotropic ferromagnet it may be approximated as

$$\mathcal{F}[\mathbf{S}] \propto \int d\mathbf{r} \left[-S^2 + \frac{1}{2S_0^2} S^4 + \frac{\xi_0^2}{2} (\nabla_{\mathbf{r}} \mathbf{S})^2 \right] \quad (11.38)$$

where S_0 is a saturation magnetization and ξ_0 a correlation length. The LandauLifshitz equation forces magnetization to a state with $S^2 = S_0^2$, which we can assign to be in the z -direction, $S_z = S_0$. The remaining dynamics of small deviations from this state takes the form

$$\partial_t S_x = 2S_0 \xi_0^2 \nabla_{\mathbf{r}}^2 S_y; \quad \partial_t S_y = -2S_0 \xi_0^2 \nabla_{\mathbf{r}}^2 S_x \quad (11.39)$$

Eliminating one of the polarizations, one finds the harmonic motion for the Fourier components: $\partial_t^2 S_{x,y}(\mathbf{q}, t) = -(2S_0 \xi_0^2)^2 q^4 S_{x,y}(\mathbf{q}, t)$. This leads to the hydrodynamic ferromagnetic spin waves with the dispersion relation $\omega_{\mathbf{q}} \propto q^2$. There are two orthogonal polarizations of them.

The flux tensor part, $\partial_\nu J_S^{\mu\nu}$, leads to the dumping of the magnetization precession. In the context of the Landau-Lifshitz equation it is known as the Gilbert damping. In a far-from-equilibrium case it may also lead to an opposite effect of transferring the angular momentum from a spin-polarized electron flow to a local magnetization. This effect is known as the Slonczewski-Berger [220,221] spintorque phenomenon. We will derive both Gilbert damping and spin-torque terms of the magnetization equation in Section 13.6 for a specific model of a metallic ferromagnetic grain in a weak contact with ferromagnetic leads. The grain magnetization can rotate relative to the leads, governed by Landau-Lifshitz-Gilberti-Slonczewskii-Berger equation (13.68).

12.6.5 11.5 Problems

11.5.1 H-Theorem

The entropy of the Fermi gas is given by ³

$$S = - \sum_{\mathbf{k}} [n_{\mathbf{k}} \log n_{\mathbf{k}} + (1 - n_{\mathbf{k}}) \log (1 - n_{\mathbf{k}})] \quad (11.40)$$

Its time derivative is thus (cf. Eq. (11.14))

$$\frac{dS}{dt} = - \sum_{\mathbf{k}} (\partial_t n_{\mathbf{k}}) [\log n_{\mathbf{k}} - \log (1 - n_{\mathbf{k}})] = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} I^{\text{coll}} [n_{\mathbf{k}}] \log \frac{n_{\mathbf{k}}}{1 - n_{\mathbf{k}}}$$

where we have omitted the spatial and momentum drift terms of the kinetic equation for brevity. Using the explicit form of the collision integral (11.18), prove that $dS/dt \geq 0$. Moreover, the equality is only reached when $I^{\text{coll}} [n_{\mathbf{k}}] = 0$, that is, in the equilibrium state. This shows that the entropy monotonically increases due to collisions and reaches its maximum value when the system equilibrates.

3 Indeed, consider $N \gg 1$ states, which may be either empty or occupied with the average occupation $n \leq 1$. The total number of accessible many-body states is

$$e^{NS} = \prod_{i=1}^N \sum_{s_i=0,1} \delta \left(\sum_{i=1}^N s_i - nN \right) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\lambda}{2\pi} \prod_{i=1}^N \sum_{s_i=0,1} e^{\lambda(\sum_{i=1}^N s_i - nN)} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\lambda}{2\pi} e^{N[\log(1+e^\lambda) - \lambda n]}.$$

In the large N limit the integral over λ may be calculated in the saddle-point approximation. The latter is determined from $e^\lambda / (1 + e^\lambda) = n$. This leads to $e^\lambda = n/(1 - n)$. Substituting it back into the exponent, one finds expression (11.40) for the entropy per degree of freedom.

Hint: Consider first single-particle elastic collisions with the collision integral $I^{\text{coll}} [n_{\mathbf{k}}] = \sum_{\mathbf{k}'} \mathcal{M}_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} [n_{\mathbf{k}} (1 - n_{\mathbf{k}'} - (1 - n_{\mathbf{k}}) n_{\mathbf{k}'})]$, Section 14.1, where the scattering rate $\mathcal{M}_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \propto \delta(\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}'})$ is positive and symmetric with respect to interchange of the "in and out" states $\mathbf{k}$ and $\mathbf{k}'$. Substituting this into the expression for dS/dt and symmetrizing with respect to $\mathbf{k}$ and $\mathbf{k}'$, one finds

$$\frac{dS}{dt} = \frac{1}{4} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \mathcal{M}_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} [n_{\mathbf{k}} (1 - n_{\mathbf{k}'} - (1 - n_{\mathbf{k}}) n_{\mathbf{k}'})] \log \frac{n_{\mathbf{k}} (1 - n_{\mathbf{k}'})}{(1 - n_{\mathbf{k}}) n_{\mathbf{k}'}}$$

Nonnegativity of dS/dt follows from that of $(A - B)(\log A - \log B) \geq 0$, for any positive A and B . This quantity is zero if and only if $A = B$. Extend this reasoning to electron-electron collisions, employing the corresponding collision integral given by (11.18).

11.5.2 Hydrodynamics of Electron Flow

In modern ultraclean 2d materials there may be a window of temperatures, where electron-electron collision rate greatly exceeds both electron-impurity and electron-phonon relaxation rates. Under these conditions electron flow in an external electric field is governed by the Fermi liquid hydrodynamics. Consider a quasi-1d strip of width $2w$ of a 2d material with an electric field E_x applied along it. The electron velocity, $u_x(y)$, is determined by Eq. (11.29), where $E_0 = \text{const}$ and $\text{div } \mathbf{u} = 0$ due to the incompressible nature of the electronic liquid (dictated by the strong Coulomb repulsion). It reads as

$$\eta \partial_y^2 u_x = -e\rho E_x \quad (11.41)$$

where η is viscosity. Adopt no-slip boundary conditions $u_x(-w) = u_x(w) = 0$ to solve the equation and find the total current $I_x = e\rho \int_{-w}^w dy u_x(y)$. Notice that $I_x \propto w^3 E_x$, in contrast to the Ohm's law expectation $I_x \propto w E_x$. This is the electronic analog of the Poiseuille law. One can formally compare it with the Drude formula $I_x = e^2 \rho \tau_w 2w E_x / m$, where τ_w is an effective scattering time. Estimate τ_w using (11.28) (with 2d density of states) for the viscosity. Compare it with the ballistic result for a characteristic time due to the boundary scattering $\tau \approx 2w/v_F$. Show that for $wk_F \gg 1$ and $T \approx E_F$ the former may greatly exceed the latter. This remarkable observation was first made by Gurzhi [222]. See reference [223] for a discussion of nonlocal effects in electronic hydrodynamic flow.

12.7 Aspects of Kinetic Theory

In this chapter we discuss some (disconnected) aspects of the kinetic theory. We start from kinetics in presence of a band structure-induced Berry curvature, followed by kinetics of periodically driven systems in Floquet basis. We then show how the kinetic equation may be viewed as the saddle-point condition for some effective nonlocal field theory. We use this representation to derive semiclassical corrections to the kinetic description, which are known as Boltzmann-Langevin theory. Finally, we delve into the butterfly effect and chaos propagation, as described by out-of-time-order correlation (OTOC) functions.

12.7.1 12.1 Kinetic Equation in Presence of the Berry Curvature

Band structure effects not only modify electron dispersion relation, but also result in additional modifications of the equations of motion due to induced Berry curvature. The latter takes its origin in the Abelian Berry connection $\mathcal{A}_n(\mathbf{k}) = -i \langle u_{n\mathbf{k}} | \nabla_{\mathbf{k}} | u_{n\mathbf{k}} \rangle$, where $|u_{n\mathbf{k}}\rangle = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ is a spinor in the space of orbits and $\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ is a Bloch wave function of a band n with the quasi-momentum $\mathbf{k}$ in the Brillouin zone. The Berry curvature is given by $\Omega(\mathbf{k}) = \nabla_{\mathbf{k}} \times \mathcal{A}(\mathbf{k})$ (hereafter we focus on a single band and thus suppress the band index n) and it enters semiclassical equations of motions as [224]

$$\dot{\mathbf{r}} = \nabla_{\mathbf{k}} h - \dot{\mathbf{k}} \times \Omega; \quad (12.1a)$$

$$\dot{\mathbf{k}} = -\nabla_{\mathbf{r}} h + \dot{\mathbf{r}} \times \mathbf{H}, \quad (12.1b)$$

where $h(\mathbf{r}, \mathbf{k}) = \epsilon_{\mathbf{k}} + V(\mathbf{r})$ is a Hamiltonian and we also allowed for an orbital magnetic field $\mathbf{H} = \nabla_{\mathbf{r}} \times \mathbf{A}(\mathbf{r})$. The origin of the Berry curvature is in a projection of an initial multiband system onto an effective carrier's dynamics in a single (e.g. conductance) band.¹ If there is more than one conductance band (in addition to some number of projected-out valence bands), the Berry curvature is non-Abelian. The corresponding non-Abelian kinetic theory is developed in Ref. [225]. Here we focus on the case of the single conduction band and therefore the Abelian Berry curvature.

Equations (12.1) are still Hamiltonian, though written in the noncanonical phase-space coordinates $\xi = (\mathbf{r}, \mathbf{k})$. To show this we need a brief reminder of the analytical mechanics [226,227]. A generic first-order Lagrangian may be written as $L = a_{\alpha}(\xi) \dot{\xi}^{\alpha} - h(\xi)$, where $\alpha = 1, \dots, 2d$ labels phase-space coordinates. Its extrema conditions are

$$\frac{\delta L}{\delta \xi^{\beta}} = \frac{\partial L}{\partial \xi^{\beta}} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{\xi}^{\beta}} = \dot{\xi}^{\alpha} \omega_{\alpha\beta} - \partial_{\beta} h = 0 \quad (12.2)$$

where $\omega_{\alpha\beta}(\xi) = \partial_{\beta} a_{\alpha} - \partial_{\alpha} a_{\beta}$ is the antisymmetric matrix, called the symplectic form. In canonical coordinates $(\mathbf{q}, \mathbf{p})$, $a_{\mathbf{q}} = \mathbf{p}$ and $a_{\mathbf{p}} = 0$ with the Lagrangian $L = \mathbf{p}\dot{\mathbf{q}} - h(\mathbf{q}, \mathbf{p})$ and

$\hat{\omega} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} = \hat{J}$, which leads to the familiar Hamilton pair $\dot{\mathbf{q}} = \partial_{\mathbf{p}}h$ and $\dot{\mathbf{p}} = -\partial_{\mathbf{q}}h$. In generic noncanonical coordinates the Hamilton equations acquire the form

$$\dot{\xi}^\alpha \omega_{\alpha\beta} = \partial_\beta h \quad (12.3)$$

They may be formulated in the Poisson brackets notations $\dot{\xi}^\alpha = \{h, \xi^\alpha\}$, if the Poisson brackets are defined as

$$\{f, g\} = \partial_\beta f \omega^{\beta\alpha} \partial_\alpha g \quad (12.4)$$

and $\omega^{\beta\alpha} \omega_{\alpha\gamma} = \delta_\gamma^\beta$, that is, $\omega^{\beta\alpha}$ is the inverse of the symplectic form $\omega_{\alpha\beta}$. Comparing (12.3) with (12.1), where all time derivatives are moved to the lefthand side, one finds that the corresponding symplectic form is

$$\omega_{\alpha\beta} = \begin{pmatrix} -\varepsilon_{\mu\nu\sigma} H^\sigma & \delta_{\mu\nu} \\ -\delta_{\mu\nu} & -\varepsilon_{\mu\nu\sigma} \Omega_\sigma \end{pmatrix}, \quad (12.5)$$

where $\mu, \nu, \sigma = 1, 2, 3$ and $\varepsilon_{\mu\nu\sigma}$ is the Levi-Civita symbol. Its determinant is found to be $\det(\omega_{\beta\alpha}) = (1 - \mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{H})^2$. And the inverse matrix is

$$\omega^{\alpha\beta} = \frac{1}{1 - \mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{H}} \begin{pmatrix} -\varepsilon^{\mu\nu\sigma} \Omega_\sigma & -\delta^{\mu\nu} + H^\mu \Omega^\nu \\ \delta^{\mu\nu} - \Omega^\mu H^\nu & -\varepsilon^{\mu\nu\sigma} H^\sigma \end{pmatrix}. \quad (12.6)$$

Consider now a probability distribution function over the phase space volume ²

$$n(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) dV = n(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) \sqrt{\det \omega_{\alpha\beta}} d^d \mathbf{r} d^d \mathbf{k} \quad (12.7)$$

expressed through the noncanonical coordinates $\xi = (\mathbf{r}, \mathbf{k})$. Upon a Hamiltonian flow (no collisions) it evolves according to

$$\frac{dn}{dt} = \frac{\partial n}{\partial t} + \{h, n\} = 0 \quad (12.8)$$

where

$$\{h, n\} = \partial_\beta h \omega^{\beta\alpha} \partial_\alpha n = \partial_\alpha (\partial_\beta h \omega^{\beta\alpha} n) - \partial_\alpha (\partial_\beta h \omega^{\beta\alpha}) n = \partial_\alpha (\dot{\xi}^\alpha n) - n \partial_\alpha \dot{\xi}^\alpha$$

The last term $\partial_\alpha \dot{\xi}^\alpha = \partial_\alpha (\partial_\beta h \omega^{\beta\alpha}) = \partial_\beta h \partial_\alpha \omega^{\beta\alpha}$, where we used the antisymmetry of $\omega^{\beta\alpha}$. Using (12.6) along with the fact that $\nabla_{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{H} = \nabla_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{\Omega} = 0$, one notices that only derivatives of the $(1 - \mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{H})^{-1} = 1/\sqrt{\det \omega_{\alpha\beta}}$ contribute to $\partial_\alpha \omega^{\beta\alpha}$, while derivatives of all other factors vanish. As a result,

$$\partial_\alpha \dot{\xi}^\alpha = \partial_\beta h \partial_\alpha \left(\frac{1}{\sqrt{\det \omega_{\alpha\beta}}} \right) \sqrt{\det \omega_{\alpha\beta}} \omega^{\beta\alpha} = -\dot{\xi}^\alpha \partial_\alpha \log(\sqrt{\det \omega_{\alpha\beta}}), \quad (12.9)$$

and therefore

⁰¹ I do not attempt a rigorous derivation of this fact, but rather provide some motivation. Consider the coordinate operator $\hat{\mathbf{r}} = -i\nabla_{\mathbf{k}}$; its projection on the conductance band is $\mathbf{R} = \langle \psi_{n\mathbf{k}} | \hat{\mathbf{r}} | \psi_{n\mathbf{k}} \rangle = \mathbf{r} + A_n(\mathbf{k})$, where $\mathbf{r}$ comes from the differentiation of $e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$. If $\mathbf{r}$ and $\mathbf{k}$ obey the usual commutation relations $[r^\mu, r^\nu] = [k_\mu, k_\nu] = 0$ and $[k_\mu, r^\nu] = i\delta_\mu^\nu$, then components of $\mathbf{R}$ do not commute with each other: $[R^\mu, R^\nu] = -i(\partial_{k_\mu} \mathcal{A}^\nu - \partial_{k_\nu} \mathcal{A}^\mu) = -i\mathcal{F}^{\mu\nu}$. This should be compared with the momentum operator in the presence of the usual vector potential $\mathbf{K} = i\nabla_{\mathbf{r}} + \mathbf{A}(\mathbf{r})$, with the commutation relations $[K_\mu, K_\nu] = i(\partial_{r^\mu} A_\nu - \partial_{r^\nu} A_\mu) = iF_{\mu\nu}$. While the latter results in the extra component of the force (Lorentz), $\dot{\mathbf{r}} \times \mathbf{H}$, the former leads to the extra component of velocity, $-\dot{\mathbf{k}} \times \mathbf{\Omega}$, where $H^\sigma = \varepsilon^{\sigma\mu\nu} F_{\mu\nu}$ and $\Omega_\sigma = \varepsilon_{\sigma\mu\nu} \mathcal{F}^{\mu\nu}$.

$$\partial_\alpha \dot{\xi}^\alpha = \frac{d_t(\mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{H})}{1 - \mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{H}} \quad (12.10)$$

where $d_t(\mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{H}) = \nabla_{\mathbf{r}}(\mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{H}) \cdot \dot{\mathbf{r}} + \nabla_{\mathbf{k}}(\mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{H}) \cdot \dot{\mathbf{k}}$. Putting everything together, one finds

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{r}}(n\dot{\mathbf{r}}) + \nabla_{\mathbf{k}}(n\dot{\mathbf{k}}) = n \frac{d_t(\mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{H})}{1 - \mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{H}} \quad (12.11)$$

This equation does not have a form of the continuity relation, due to the presence of the right-hand side. This reflects the fact that $\iint d^d\mathbf{r} d^d\mathbf{k} n(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)$ is not conserved. However, $\iint d^d\mathbf{r} d^d\mathbf{k} \rho(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)$, where $\rho(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) = n(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) \sqrt{\det \omega_{\alpha\beta}}$, is conserved.

Repeating similar calculations, one finds that ρ indeed satisfies the continuity equation $\partial_t \rho + \nabla_{\mathbf{r}}(\rho\dot{\mathbf{r}}) + \nabla_{\mathbf{k}}(\rho\dot{\mathbf{k}}) = 0$. On the other hand, $\partial_t \rho + \{h, \rho\} \neq 0$.

One may work with either of these two functions. It is important to remember, however, that observables $\frac{\mathcal{O}(t)}{\int \int d^d\mathbf{r} d^d\mathbf{k} \sqrt{\det \omega_{\alpha\beta}} n(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) \mathcal{O}(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)}$ are expressed either as $\mathcal{O} = \iint d^d\mathbf{r} d^d\mathbf{k} \sqrt{\det \omega_{\alpha\beta}} n(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) \mathcal{O}(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)$ or $\mathcal{O} = \iint d^d\mathbf{r} d^d\mathbf{k} \rho(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) \mathcal{O}(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)$. In my opinion, $n(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)$ is preferred, since in equilibrium $n = n_F(\epsilon_{\mathbf{k}}/T)$, while ρ still includes the factor $\sqrt{\det \omega_{\alpha\beta}}$. Since any collision integral is nullified in equilibrium, it takes the familiar "in minus out" form in terms of the n -function, but not the ρ -function.

An equivalent alternative way to write the kinetic term (12.11) is to substitute $\rho = n \sqrt{\det \omega_{\alpha\beta}}$ in the continuity equation for ρ . This leads to the n -equation in the form of the divergence in the curved phase space

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{1}{\sqrt{\det \omega_{\alpha\beta}}} \nabla_{\mathbf{r}} (n \sqrt{\det \omega_{\alpha\beta}} \dot{\mathbf{r}}) + \frac{1}{\sqrt{\det \omega_{\alpha\beta}}} \nabla_{\mathbf{k}} (n \sqrt{\det \omega_{\alpha\beta}} \dot{\mathbf{k}}) = 0 \quad (12.12)$$

Notice that velocity $\dot{\mathbf{r}} \neq \nabla_{\mathbf{k}} h$ and the force $\dot{\mathbf{k}} \neq -\nabla_{\mathbf{r}} h$, because both of them include anomalous terms. To account for them explicitly we use $\dot{\xi}^\alpha = \{h, \xi^\alpha\}$, or in components: $\dot{\mathbf{r}} = -\mathbf{E} \omega^{\mathbf{r}, \mathbf{r}} + \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \omega^{\mathbf{k}, \mathbf{r}}$ and $\dot{\mathbf{k}} = -\mathbf{E} \omega^{\mathbf{r}, \mathbf{k}} + \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \omega^{\mathbf{k}, \mathbf{k}}$, where $\mathbf{v}_{\mathbf{k}} = \nabla_{\mathbf{k}} h = \nabla_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}}$ is the normal velocity and $\mathbf{E}(\mathbf{r}) = -\nabla_{\mathbf{r}} h = -\nabla_{\mathbf{r}} V(\mathbf{r})$ is the electric field. Employing (12.6), one finds

$$\begin{aligned} \sqrt{\det \omega_{\alpha\beta}} \dot{\mathbf{r}} &= \mathbf{v}_{\mathbf{k}} - \mathbf{E} \times \mathbf{\Omega} - (\mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{\Omega}) \mathbf{H}; \\ \sqrt{\det \omega_{\alpha\beta}} \dot{\mathbf{k}} &= \mathbf{E} + \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \times \mathbf{H} - (\mathbf{E} \cdot \mathbf{H}) \mathbf{\Omega}. \end{aligned}$$

With this Eq. (12.12) takes the form:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\nabla_{\mathbf{r}} [(\mathbf{v}_{\mathbf{k}} - \mathbf{E} \times \mathbf{\Omega} - (\mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{\Omega}) \mathbf{H}) n] + \nabla_{\mathbf{k}} [(\mathbf{E} + \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \times \mathbf{H} - (\mathbf{E} \cdot \mathbf{H}) \mathbf{\Omega}) n]}{1 - \mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{H}} = 0 \quad (12.13)$$

In the absence of the magnetic field, $\mathbf{H} = 0$, the equation simplifies considerably,

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{r}} [(\mathbf{v}_{\mathbf{k}} - \mathbf{E} \times \mathbf{\Omega}) n] + \mathbf{E} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} n = 0 \quad (12.14)$$

and it boils down to adding the anomalous Berry contribution to the velocity: $\mathbf{v}_{\mathbf{k}} \rightarrow \mathbf{v}_{\mathbf{k}} + \mathbf{v}_{\mathbf{k}}^a$, where $\mathbf{v}_{\mathbf{k}}^a(\mathbf{r}) = -\mathbf{E}(\mathbf{r}) \times \mathbf{\Omega}(\mathbf{k})$. Notice that the anomalous velocity may depend on location

⁰² To see this, consider the canonical coordinates $x = (\mathbf{q}, \mathbf{p})$, where the phase-space volume element is $dV = d^d\mathbf{q} d^d\mathbf{p}$. Changing variables to noncanonical $x^\alpha \rightarrow \xi^\alpha$, the symplectic form changes as

$$J_{\alpha\beta} \rightarrow \omega_{\alpha\beta} = \frac{\partial x^\gamma}{\partial \xi^\alpha} \frac{\partial x^\delta}{\partial \xi^\beta} J_{\gamma\delta}$$

The volume element transforms as $dV = \prod_\alpha dx^\alpha = \det \left(\frac{\partial x}{\partial \xi} \right) \prod_\alpha d\xi^\alpha = \sqrt{\det \omega_{\alpha\beta}} \prod_\alpha d\xi^\alpha$. I am grateful to Zach Raines for clarifying these issues.

through an inhomogeneous electric field. In this case it needs to be kept under the spatial gradient, as in Eq. (12.14). Also notice that, since $\det \omega_{\alpha\beta} = 1$, in this case $n(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)$ is conserved and the kinetic term acquires the form of the continuity relation.

In presence of collisions the right-hand side of the previous equations contains a collision integral, $-I^{\text{coll}}[n]/2$, cf. Eq. (11.14). In zeroth approximation, the latter may be taken from the theory with no Berry curvature and magnetic field. However, a more careful consideration shows that the collisions are also affected by the geometric effects. In the context of elastic scattering, they lead to the two distinct effects known as the skew-scattering and the side-jump scattering mechanisms. The skew-scattering is a result of the asymmetry of the scattering rates $\mathcal{M}_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \neq \mathcal{M}_{\mathbf{k}', \mathbf{k}}$, where $\mathbf{k}$ and $\mathbf{k}'$ are initial and final scattering states. It follows from the solution of the Lipman-Schwinger equation for the scattering amplitude, where the Green function, describing free propagation between the scattering events, includes Berry curvature through its spinor structure (in the orbits space) [228]. The side-jump mechanism originates from the spatial nonlocality of the distribution function and the peculiarity of the spatial Wigner transform in the Bloch wave basis [229]. Finally, the anomalous component of the velocity, $\mathbf{v}_{\mathbf{k}}^{\text{a}}$, may show up in observables. For example, the current, $\mathbf{j} = \sum_{\mathbf{k}} (\mathbf{v}_{\mathbf{k}} + \mathbf{v}_{\mathbf{k}}^{\text{a}}) n(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)$, acquires the anomalous velocity contribution. Notice that, since the anomalous velocity is proportional to the electric field, one may use here the equilibrium distribution to calculate the current in the linear response. By this reason the corresponding contribution is known as intrinsic.

12.7.2 12.2 Floquet Kinetic Theory

Here we address a non-perturbative treatment of periodic time-dependent Hamiltonians. Consider first a single-particle quantum mechanics with a matrix time-dependent Hermitian Hamiltonian $H_{ij}(t)$, where $i, j = 1, 2, \dots, N$, and $H_{ij}(t) = H_{ij}(t + t_0)$ for all i, j . Here t_0 is the period of a drive and $\Omega = 2\pi/t_0$ is the corresponding fundamental frequency. The indexes i, j may represent, for example, space of orbitals and/or lattice sites. Alternatively, one may imagine diagonalizing such a matrix in momentum space and treating i, j as orbitals and quasi-momenta (H_{ij} is often assumed to be diagonal in the latter subspace).

According to the Floquet theorem, one may find N solutions of the timedependent Schrödinger equation $i\partial_t \Psi_i(t) = \sum_j^N H_{ij}(t) \Psi_j(t)$ of the form

$$\Psi_j^\alpha(t) = e^{-i\epsilon_\alpha t} \phi_j^\alpha(t); \quad \phi_j^\alpha(t + t_0) = \phi_j^\alpha(t), \quad \alpha = 1, \dots, N \quad (12.15)$$

Since multiplication $\phi_j^\alpha(t) \rightarrow e^{-in\Omega t} \phi_j^\alpha(t)$, with an integer n , does not affect the periodicity of $\phi_j^\alpha(t)$, one needs to limit all the energies to the Floquet zone $0 \leq \epsilon_\alpha < \Omega$, for Eq. (12.15) to be well defined. The periodic functions $\phi_j^\alpha(t)$ obey $i\partial_t \phi_i^\alpha(t) = \sum_j^N (H_{ij}(t) - \epsilon_\alpha \delta_{ij}) \phi_j^\alpha(t)$ and constitute an instantaneous full orthonormal basis

$$\sum_{j=1}^N \bar{\phi}_j^\alpha(t) \phi_j^\beta(t) = \delta^{\alpha\beta}; \quad \sum_{\alpha=1}^N \phi_i^\alpha(t) \bar{\phi}_j^\alpha(t) = \delta_{ij}. \quad (12.16)$$

One may expand the periodic functions $\phi_j^\alpha(t)$ into Fourier series as

$$\phi_j^\alpha(t) = \sum_m e^{-im\Omega t} \phi_{j,m}^\alpha \quad (12.17)$$

where the $2MN$ component vectors $\phi_{j,m}^\alpha$ (here M is a reasonably chosen cutoff in the frequency space) may be found from the matrix eigenvalue equation

$$\sum_{m=-M}^{M-1} \sum_{j=1}^N H_{ij}^{n-m} \phi_{j,m}^\alpha = (\epsilon_\alpha + n\Omega) \phi_{i,n}^\alpha \quad (12.18)$$

where $H_{ij}^{n-m} = \int_0^{t_0} (dt/t_0) e^{in\Omega t} H_{ij}(t) e^{-im\Omega t}$, and $2MN$ corresponding eigenvalues are $\lambda_{\alpha,n} = \epsilon_\alpha + n\Omega$, with $\alpha = 1, \dots, N$ and $n = -M, \dots, M-1$.

We turn now to many-body problems. First consider a noninteracting fermion system with the Hamiltonian

$$\hat{H}_0(t) = \sum_{ij} \hat{c}_i^\dagger H_{ij}(t) \hat{c}_j$$

The corresponding Keldysh action is

$$S = \int dt \sum_{ij} [\bar{\psi}_{1,i} (i\partial_t^R \delta_{ij} - H_{ij}(t)) \psi_{1,j} + \bar{\psi}_{2,i} (i\partial_t^A \delta_{ij} - H_{ij}(t)) \psi_{2,j}] \quad (12.19)$$

where $\psi_{a,j}(t)$ are Grassmann fields and superscripts R(A) specify retarded (advanced) regularizations of the corresponding discrete time derivatives, $a = 1, 2$. The retarded/advanced Green functions are found as solutions of the following equations: $\sum_j^N [i\partial_t^{R,A} \delta_{ij} - H_{ij}(t)] G_{jk}^{R,A}(t, t') = \delta_{ik} \delta(t - t')$ and are given by

$$G_{jk}^{R,A}(t, t') = \mp i\theta(\pm(t - t')) \sum_{\alpha=1}^N \phi_j^\alpha(t) \bar{\phi}_k^\alpha(t') e^{-i\epsilon_\alpha(t-t')} \quad (12.20)$$

This may be directly checked using (12.15), (12.16). The Keldysh component is less obvious. To understand it, notice that the action (12.19) may be identically written in the Floquet-diagonal form

$$S = \int dt \sum_{\alpha=1}^N [\bar{\chi}_1^\alpha (i\partial_t^R - \epsilon_\alpha) \chi_1^\alpha + \bar{\chi}_2^\alpha (i\partial_t^A - \epsilon_\alpha) \chi_2^\alpha] \quad (12.21)$$

where the new Grassmann fields are $\chi_a^\alpha(t) = \sum_j \bar{\phi}_j^\alpha(t) \psi_{a,j}(t)$, or conversely $\psi_{a,j}(t) = \sum_\alpha \phi_j^\alpha(t) \chi_a^\alpha(t)$; correspondingly $\bar{\chi}_a^\alpha(t) = \sum_j \bar{\psi}_{a,j}(t) \bar{\phi}_j^\alpha(t)$ and also $\bar{\psi}_{a,j}(t) = \sum_\alpha \bar{\chi}_a^\alpha(t) \bar{\phi}_j^\alpha(t)$. This action dictates, for example,

$$G_{\alpha\beta}^R(t, t') = -i \langle \chi_1^\alpha(t) \bar{\chi}_1^\beta(t') \rangle = -i\theta(t - t') e^{-i\epsilon_\alpha(t-t')} \delta_{\alpha\beta} = G_\alpha^R(t - t'), \quad (12.22)$$

and similarly for the advanced function. Transforming to the original basis, this leads back to (12.20), as it should be, of course. It is convenient to define the Keldysh component of the Green function directly in the Floquet diagonal basis as $G_{\alpha\beta}^K(t, t') = -i \langle \chi_1^\alpha(t) \bar{\chi}_2^\beta(t') \rangle$. Its form is not determined by the continuum action (12.21), but rather by the implicit regularization. (Notice that the latter does not need to be Floquet-diagonal and thus the Keldysh component is, in general, a matrix in Floquet indexes α, β , despite the diagonal form of the continuum action (12.21).) The strategy is to use the implicit Keldysh component to define the distribution function $F_{\alpha\beta}(t, t')$ as (cf. Eq. (10.38))

$$G_{\alpha\beta}^K(t, t') = \int dt'' [G_\alpha^R(t - t'') F_{\alpha\beta}(t'', t') - F_{\alpha\beta}(t, t'') G_\beta^A(t'' - t')] \quad (12.23)$$

and to derive a kinetic equation governing the evolution of $F_{\alpha\beta}(t, t')$. Assuming one can find a proper solution of such a kinetic equation, $G_{\alpha\beta}^K(t, t')$ is determined by Eqs. (12.22) and (12.23).

The left-hand side of the kinetic equation is given by the commutator, Eq. (11.3), $-[(i\partial_t - \epsilon_\alpha), F]$. One thus arrives at the Floquet kinetic equation of the form

$$[\partial_t + \partial_{t'} - i(\epsilon_\alpha - \epsilon_\beta)] F_{\alpha\beta}(t, t') = i\Sigma^K - i(\Sigma^R \circ F - F \circ \Sigma^A) = I^{\text{coll}}[F] \quad (12.24)$$

In the absence of collisions, $I^{\text{coll}}[F] = 0$, the time dependence of the distribution function is

$$F_{\alpha\beta}(t, t') = F_{\alpha\beta}(t - t') e^{i(\epsilon_\alpha - \epsilon_\beta)(t+t')/2} \quad (12.25)$$

This shows that the diagonal elements, $F_{\alpha\alpha} = F_\alpha(t - t')$, are independent of the central time $(t + t')/2$, while the off-diagonal elements, $F_{\alpha\beta}$, oscillate with the frequency $\epsilon_\alpha - \epsilon_\beta$ as functions of the central time. Consequently, one may argue that upon a coarse-grained time-averaging procedure the latter disappear. We thus focus primarily on the diagonal elements F_α . Passing to the Wigner transform variables $t - t' \rightarrow \epsilon$ and $(t + t')/2 \rightarrow t$, one expects that $F_\alpha = F_\alpha(t, \epsilon)$ are slow functions of the central time t . Their slow (on the scale of t_0) dependence on the central time is induced by collisions, represented by the right-hand side of (12.24).

To proceed we need to introduce specific collision mechanisms, which determine components of the self-energy matrix $\hat{\Sigma}_{\alpha\beta}(t, t')$. Let's consider tunneling of fermions to reservoir states, labelled as k , described by a quadratic Hamiltonian $\hat{H} = \hat{H}_0(t) + \hat{H}_1$, where the tunneling and the reservoir part, $\hat{H}_1$, is time-independent and given by

$$\hat{H}_1 = \sum_{jk} [\hat{c}_j^\dagger W_{jk} \hat{d}_k + \hat{d}_k^\dagger W_{jk}^* \hat{c}_j] + \sum_k \varepsilon_k \hat{d}_k^\dagger \hat{d}_k, \quad (12.26)$$

where W_{jk} are time-independent tunneling amplitudes in the original basis. The tunneling part of the Keldysh action is

$$\begin{aligned} S_W &= - \int dt \sum_{jk;ab} [W_{jk} \bar{\psi}_{a,j} \hat{\gamma}_{ab}^{\text{cl}} d_{b,k} + W_{jk}^* \bar{d}_{a,k} \hat{\gamma}_{ab}^{\text{cl}} \psi_{b,j}] \\ &= - \int dt \sum_{\alpha\beta;ab} [W_{\alpha,k}(t) \bar{\chi}_a^\alpha \hat{\gamma}_{ab}^{\text{cl}} d_{b,k} + W_{\alpha,k}^*(t) \bar{d}_{a,k} \hat{\gamma}_{ab}^{\text{cl}} \chi_b^\alpha] \end{aligned} \quad (12.27)$$

where $d_{a,k}(t)$ (without hat) are Grassmann fields, $\hat{\gamma}_{ab}^{\text{cl}} = \delta_{ab}$, and

$$W_{\alpha,k}(t) = \sum_{j=1}^N \bar{\phi}_j^\alpha(t) W_{jk} = \sum_m W_{\alpha,k}^m e^{im\Omega t}; \quad W_{\alpha,k}^m = \sum_{j=1}^N \bar{\phi}_{j,m}^\alpha W_{jk}. \quad (12.28)$$

Notice that, while the bare Floquet action (12.21) is time independent, the tunneling action acquires a periodic time dependence, $W_{\alpha,k}(t + t_0) = W_{\alpha,k}(t)$, through the Floquet functions, $\phi^\alpha(t)$.

Expanding e^{iS_W} to the second order and performing Gaussian Grassmann integration over $d_{a,k}$ fields, with the action $S_d = \int dt \sum_{a,k} \bar{d}_{a,k} (i\partial_t - \varepsilon_k) d_{a,k}$, one finds for the self-energy

$$\hat{\Sigma}_{\alpha\beta}(t, t') = \sum_k W_{\alpha,k}(t) \hat{G}_k(t - t') W_{\beta,k}^*(t'), \quad (12.29)$$

where $\hat{G}_k(t - t')$ is the matrix Keldysh Green function of the reservoir. In the diagonal approximation, where $F_{\alpha\beta} \propto \delta_{\alpha\beta}$ and $\hat{\Sigma}_{\alpha\beta} \propto \delta_{\alpha\beta}$, the self-energy contains

$$W_{\alpha,k}(t) W_{\alpha,k}^*(t') = \sum_{n,m} W_{\alpha,k}^n W_{\alpha,k}^{*m} e^{i\Omega(nt - mt')} \approx \sum_n |W_{\alpha,k}^n|^2 e^{in\Omega(t - t')},$$

where we have omitted all terms $\propto e^{i(n-m)\Omega(t+t')/2 + \frac{i}{2}(n+m)\Omega(t-t')}$, with $n \neq m$, since they are eliminated upon time-averaging over the central time $(t + t')/2$. Therefore in the diagonal approximation the self-energy is

$$\hat{\Sigma}_{\alpha\alpha}(\epsilon) \approx \sum_{k,n} |W_{\alpha,k}^n|^2 \hat{G}_k(\epsilon + n\Omega), \quad (12.30)$$

and

$$\hat{G}_k(\epsilon) = \begin{pmatrix} (\epsilon - \varepsilon_k + i0)^{-1} & -2\pi i F_d(\varepsilon_k) \delta(\epsilon - \varepsilon_k) \\ 0 & (\epsilon - \varepsilon_k - i0)^{-1} \end{pmatrix}, \quad (12.31)$$

where $F_d(\varepsilon_k)$ is fermion distribution function of the reservoir. Substituting this into (12.24), one finds for the Wigner function $F_\alpha(t, \epsilon_\alpha) = F_\alpha(t)$:

$$\partial_t F_\alpha(t) = 2\pi \sum_{k,n} |W_{\alpha,k}^n|^2 [F_d(\varepsilon_k) - F_\alpha(t)] \delta(\epsilon_\alpha + n\Omega - \varepsilon_k). \quad (12.32)$$

This equation governs the evolution of $F_\alpha = 1 - 2n_\alpha$, where n_α are Floquet occupation numbers. It may be dubbed the Floquet golden rule. Its main difference from the conventional one is that, despite tunneling being time-independent, the energy conservation holds up to an integer of the driving frequency Ω . This is a consequence of the dynamic nature of the Floquet states. The corresponding matrix elements are proportional to Fourier harmonics of the Floquet functions, Eq. (12.28). Equation (12.32) signals the absence of the detailed balance, since a stationary state can't be achieved with $F_\alpha = F_d(\varepsilon_k)$. Indeed, there may be multiple reservoir states with energies $\varepsilon_k = \epsilon_\alpha + n\Omega$, which satisfy the energy conservation for a fixed α .

One may consider other collision mechanisms, such as electron-phonon, or electron-electron interactions [230]. The corresponding kinetic equations resemble the conventional ones with the energy conservation delta-functions allowing for $n\Omega$ mismatch. The corresponding matrix elements are decorated with the Fourier components of the Floquet functions $\phi_{j,n}^\alpha$. Various aspects of Floquet kinetics are reflected in [230, 232, 233, 234].

One may wonder about the validity of the diagonal approximation and the role of the off-diagonal elements $F_{\alpha\beta}(t, \epsilon)$. This is especially relevant in the presence of degeneracies in the Floquet spectrum, that is, states with $\epsilon_\alpha = \epsilon_\beta$. In this case the argument to neglect the off-diagonal elements due to their oscillatory central time, t , dependence $\propto e^{i(\epsilon_\alpha - \epsilon_\beta)t}$ is not applicable. In my opinion, the role and consequences of the off-diagonal coherences $F_{\alpha\beta}$ in Floquet kinetics deserve further investigation. ³

12.7.3 12.3 Kinetic Equation as a Stationary Point of the $\hat{G} - \hat{\Sigma}$ Action

Here we provide an alternative view on the kinetic equation. The latter may be thought of as a stationary point condition for an effective action formulated in terms of bilocal matrix fields $\hat{G}(x, x')$ and $\hat{\Sigma}(x, x')$. This perspective will allow us to discuss fluctuations phenomena in the framework of the so-called BoltzmannLangevin equation, Section 12.4, and will prove to be useful for derivation of kinetic equations in disordered systems.

To illustrate the approach we consider spinless fermions interacting with a scalar Gaussian degree of freedom, $\varphi(x)$. The latter may represent, for example, phonons, or electron-electron interactions treated within the RPA framework. The corresponding action is given by

$$S = \int dx \left[\bar{\psi}_a(x) \left(\hat{G}_0^{-1} \right)^{ab} \psi_b(x) - \bar{\psi}_a(x) \hat{\gamma}_{ab}^\alpha \psi_b(x) \varphi^\alpha(x) \right] \quad (12.33)$$

where $a, b = 1, 2$ and $\alpha = \text{cl}, \text{q}$. The Gaussian correlator of the scalar field is $\langle \varphi^\alpha(x) \varphi^\beta(x') \rangle = \frac{1}{2} U^{\alpha\beta}(x, x')$. Performing Gaussian integration over $\varphi(x)$, one finds the effective nonlocal interaction action

$$S_{\text{int}} = -\frac{1}{4} \iint dx dx' \bar{\psi}_a(x) \hat{\gamma}_{ab}^\alpha \psi_b(x) U^{\alpha\beta}(x, x') \bar{\psi}_c(x') \hat{\gamma}_{cd}^\beta \psi_d(x') \quad (12.34)$$

Our goal now is to rewrite this action in terms of the bilocal fluctuating field $\hat{G}_{bc}(x, x') = -i\psi_b(x)\bar{\psi}_c(x')$ (notice the absence of the expectation value symbol, $\langle \dots \rangle$). To this end we introduce an identity using functional delta-function

$$\begin{aligned} 1 &= \int \mathbf{D}[\hat{G}] \delta(\hat{G}_{bc}(x, x') + i\psi_b(x)\bar{\psi}_c(x')) \\ &= \int \mathbf{D}[\hat{G}, \hat{\Sigma}] e^{\iint dx dx' \hat{\Sigma}_{cb}(x', x)(\hat{G}_{bc}(x, x') + i\psi_b(x)\bar{\psi}_c(x'))} \end{aligned} \quad (12.35)$$

where another independent fluctuating field $\hat{\Sigma}_{cb}(x', x)$ is introduced as a Lagrange multiplier to enforce the delta-function. The action then takes the form (here we employ short-hand matrix notations)

$$S = \bar{\psi} (\hat{G}_0^{-1} - \hat{\Sigma}) \psi - i\hat{\Sigma} \circ \hat{G} - \frac{1}{4} \{ \hat{\gamma}^\alpha \hat{G} \hat{\gamma}^\beta \hat{G} \} U^{\alpha\beta} \quad (12.36)$$

where the last term is the interaction action (12.34), written in terms of the bilocal field $\hat{G}$. Finally, one can perform the Gaussian integration over the Grassmann fields, ψ and $\bar{\psi}$, to arrive at the so-called $\hat{G} - \hat{\Sigma}$ action:

$$iS[\hat{G}, \hat{\Sigma}] = \text{Tr} \ln (\hat{G}_0^{-1} - \hat{\Sigma}) + \hat{\Sigma} \circ \hat{G} - \frac{i}{4} \{ \hat{G} \hat{\gamma}^\beta \hat{G} \hat{\gamma}^\alpha \} U^{\alpha\beta}. \quad (12.37)$$

So far we have not done any approximations. Thus, in principle, this action contains the full exact information about all correlation functions of the interacting model.

We now look for $\hat{G}$ and $\hat{\Sigma}$ field configurations, which stabilize the $\hat{G} - \hat{\Sigma}$ action. The corresponding variational derivatives yield

$$\frac{\delta iS}{\delta \hat{\Sigma}} = -(\hat{G}_0^{-1} - \hat{\Sigma})^{-1} + \hat{G}; \quad \frac{\delta iS}{\delta \hat{G}} = \hat{\Sigma} - \frac{i}{2} \hat{\gamma}^\beta \hat{G} \hat{\gamma}^\alpha U^{\alpha\beta}. \quad (12.38)$$

Requiring them to be zero and formally multiplying the first by $(\hat{G}_0^{-1} - \hat{\Sigma})$, one obtains two stationary point equations for the bilocal matrix fields:

$$(\hat{G}_0^{-1} - \hat{\Sigma}) \circ \hat{G} = \hat{1}; \quad \hat{\Sigma} = \frac{i}{2} \hat{\gamma}^\beta \hat{G} \hat{\gamma}^\alpha U^{\alpha\beta} \quad (12.39)$$

One immediately recognizes the Dyson equation (11.1) along with the expression (11.4) for the fermionic self-energy; see also Fig. 11.1(a). Therefore, at the stationary point the fluctuating bilocal fields $\hat{\Sigma}$ and $\hat{G}$ are given by the (one loop) self-energy and the corresponding dressed Green function. As a result, both the kinetic equation (11.7) and the collision integral (11.8) are contained in the stationarity condition for the $\hat{G} - \hat{\Sigma}$ action.

To make this connection even more apparent we notice that the solutions of the stationary point equations, satisfying the causality structure, may be written as (cf. Eq. (10.34))

⁰³ I am grateful to Mark Rudner for useful discussions of this issue.

$$\hat{G} = \begin{pmatrix} G^R & G^K \\ 0 & G^A \end{pmatrix} = \hat{\mathcal{U}}^{-1} \circ \begin{pmatrix} G^R & 0 \\ 0 & G^A \end{pmatrix} \circ \hat{\mathcal{U}}, \quad \hat{\mathcal{U}} = \begin{pmatrix} 1 & F \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (12.40)$$

where F , defined through $G^K = G^R \circ F - F \circ G^A$, is a solution of the stationary point kinetic equation. Similarly

$$\hat{\Sigma} = \begin{pmatrix} \Sigma^R & \Sigma^K \\ 0 & \Sigma^A \end{pmatrix} = \hat{\mathcal{U}}^{-1} \circ \begin{pmatrix} \Sigma^R & \Sigma^K - \Sigma^R \circ F + F \circ \Sigma^A \\ 0 & \Sigma^A \end{pmatrix} \circ \hat{\mathcal{U}}. \quad (12.41)$$

The off-diagonal (1, 2) element constitutes the collision integral (cf. Eq. (11.3)). It vanishes in equilibrium.

Motivated by this form of the saddle-point solutions, one may introduce rotated fluctuating fields as

$$\hat{\tilde{G}} = \hat{\mathcal{U}} \circ \hat{G} \circ \hat{\mathcal{U}}^{-1}; \quad \hat{\tilde{\Sigma}} = \hat{\mathcal{U}} \circ \hat{\Sigma} \circ \hat{\mathcal{U}}^{-1}, \quad (12.42)$$

so the new fields $\hat{\tilde{G}}$ and $\hat{\tilde{\Sigma}}$ are diagonal at the equilibrium stationary solution. In terms of these new rotated fields the $\hat{G} - \hat{\Sigma}$ action acquires the form

$$iS[\hat{\tilde{G}}, \hat{\tilde{\Sigma}}] = \text{Tr} \ln \left(\hat{\tilde{G}}_0^{-1} + \hat{\mathcal{U}} \left[\hat{G}_0^{-1}, \hat{\mathcal{U}}^{-1} \right] - \hat{\tilde{\Sigma}} \right) + \hat{\tilde{\Sigma}} \circ \hat{\tilde{G}} - \frac{i}{4} \left\{ \hat{\tilde{G}} \hat{\Gamma}_{12}^{\beta} \hat{\tilde{G}} \hat{\Gamma}_{21}^{\alpha} \right\} U^{\alpha\beta} \quad (12.43)$$

where

$$\hat{\Gamma}_{12}^{\beta} = \hat{\mathcal{U}}_1 \circ \hat{\gamma}^{\beta} \circ \hat{\mathcal{U}}_2^{-1}; \quad \hat{\Gamma}_{12}^{\text{cl}} = \begin{pmatrix} 1 & F_1 - F_2 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}; \quad \hat{\Gamma}_{12}^{\text{q}} = \begin{pmatrix} F_1 & 1 - F_2 F_1 \\ -1 & -F_2 \end{pmatrix}.$$

Here $F_1 = \tilde{F}(\mathbf{k}_1)$ and $F_2 = \tilde{F}(\mathbf{k}_2)$ and in the collision integral (11.8) $\mathbf{k}_1 = \mathbf{k}$, $\mathbf{k}_2 = \mathbf{k} + \mathbf{q}$. Notice that matrix $\hat{\mathcal{U}} \left[\hat{G}_0^{-1}, \hat{\mathcal{U}}^{-1} \right]$ has only the (1,2) nonzero matrix element given by $[G_0^{-1}, F]$.

Thus the (1, 2) matrix element of $\hat{\mathcal{U}} \left[\hat{G}_0^{-1}, \hat{\mathcal{U}}^{-1} \right] - \hat{\tilde{\Sigma}}$ is given by the kinetic equation (11.3). This observation will be utilized in the next section.

12.7.4 12.4 Boltzmann-Langevin Kinetic Equation

As explained in the previous section, the Boltzmann equation may be viewed as a part of the stationary point conditions for the formally exact $\hat{G} - \hat{\Sigma}$ action. These conditions, (12.39), include Dyson equation and the expression for the fermionic self-energy. While the former may be considered as exact, the latter is certainly an approximation that treats the self-energy as the simplest self-consistent diagram, Fig. 11.1(a). Other diagrams are missed in the saddle-point treatment. Our goal thus is to go beyond the saddle-point approximation and to include fluctuations of $\hat{G}$ and $\hat{\Sigma}$ fields around their stationary values. We will restrict ourselves to Gaussian fluctuations only. This results in the so-called Boltzmann-Langevin kinetic equation [235, 236, 237].

To proceed it is convenient to employ the rotated form (12.43) of the $\hat{G} - \hat{\Sigma}$ action. The reason is that in the rotated form the kinetic equation appears solely as the (1, 2) element of the matrix saddle-point equations (12.39). The corresponding equation originates from the variation over the conjugated degree of freedom, which is the (2, 1) element of the fluctuating $\hat{\tilde{G}}$ and $\hat{\tilde{\Sigma}}$ matrices. We thus adopt the following parametrization (cf. Eqs. (12.40), (12.41)):

$$\hat{\tilde{G}} = \begin{pmatrix} G^R & 0 \\ \delta_{\tilde{G}} & G^A \end{pmatrix}; \quad \hat{\tilde{\Sigma}} = \begin{pmatrix} \Sigma^R & \Sigma^K - \Sigma^R \circ F + F \circ \Sigma^A \\ \delta_{\tilde{\Sigma}} & \Sigma^A \end{pmatrix}. \quad (12.45)$$

Here $\delta_{\tilde{G}}$ and $\delta_{\tilde{\Sigma}}$ are quantum fluctuating components of the bilocal fields. We now substitute this parametrization into the action (12.43) and expand it to the second order in $\delta_{\tilde{G}}, \delta_{\tilde{\Sigma}}$ quantum fluctuations (and also in the kinetic term $[\hat{G}_0^{-1}, F] + \Sigma^K - (\Sigma^R \circ F - F \circ \Sigma^A)$). This leads to

$$\begin{aligned} iS[\delta_{\tilde{G}}, \delta_{\tilde{\Sigma}}] = & \delta_{\tilde{\Sigma}} \circ G^R \circ \left\{ [\hat{G}_0^{-1}, F] + \Sigma^K - (\Sigma^R \circ F - F \circ \Sigma^A) \right\} \circ G^A \\ & + \delta_{\tilde{G}} \circ \left\{ \Sigma^K - (\Sigma^R \circ F - F \circ \Sigma^A) + \frac{i}{2} \left(\hat{\Gamma}^\beta \hat{\tilde{G}} \hat{\Gamma}^\alpha \right) U^{\alpha\beta} \right\} \\ & - \frac{i}{4} \delta_{\tilde{G}}(1) [F_1 - F_2] \left\{ [F_2 - F_1] U_{2-1}^K + [F_2 F_1 - 1] [U_{2-1}^R - U_{2-1}^A] \right\} \delta_{\tilde{G}}(2), \end{aligned} \quad (12.46)$$

where $G^{R,A} = (G_0^{-1} - \Sigma^{R,A})^{-1}$ and $\hat{\tilde{G}} = \text{diag} \{G^R, G^A\}$. Notations here are somewhat inconsistent: while the first two lines are written in the bilocal matrix form, the last line assumes the Wigner transform with $\delta_{\tilde{G}}(l) = \delta_{\tilde{G}}(\mathbf{r}, t, \mathbf{k}_l, \epsilon_l)$, where $l = 1, 2$ and implicit integrations over $\mathbf{r}, t, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \epsilon_1, \epsilon_2$.

The first two lines in Eq. (12.46) are already familiar linear variations. Demanding that the expressions in the curly brackets vanish, one recovers the kinetic equation (11.3) along with the specific form of the collision integral, Eq. (11.8). We now focus on the last line, quadratic in $\delta_{\tilde{G}}$ fluctuations. The way to handle it is to split it with the Hubbard-Stratonovich auxiliary field $\xi_F(\mathbf{r}, t, \mathbf{k}, \epsilon)$ as $e^{i\delta_{\tilde{G}}(1)\{\dots\}\delta_{\tilde{G}}(2)} = \int \mathbf{D}[\xi_F] \mathcal{P}(\xi_F) e^{-\delta_{\tilde{G}}(1)\xi_F(1)}$, where $\mathcal{P}(\xi_F)$ is a Gaussian stochastic measure such that $\langle \xi_F(1) \rangle = 0$ and $\langle \xi_F(1)\xi_F(2) \rangle \propto \{\dots\}$. The term $\delta_{\tilde{G}}(1)\xi_F(1)$ in the exponent may now be incorporated into the second line in Eq. (12.46). This leads to a stochastic contribution to the self-energy. Notice that there is no stochastic correction to the Dyson equation, since terms like $\delta_{\tilde{G}}\delta_{\tilde{\Sigma}}$ and $\delta_{\tilde{\Sigma}}^2$ are absent in Eq. (12.46). This reflects the formal exactness of the Dyson equation, as opposed to an approximate nature of the specific form (11.4) of the self-energy.

The previous considerations lead to a stochastic contribution to the collision integral, $\xi_F(\mathbf{r}, t, \mathbf{k}, \epsilon)$. One should be mindful, however, that this object, originating from the bilocal field $\delta_{\tilde{G}}$, depends on four arguments. On the other hand, the distribution function is the on-shell object, which depends only on the three variables, $\tilde{F}(\mathbf{r}, t, \mathbf{k})$. Following the procedure of Section 6.7, we thus introduce $\xi_F(\mathbf{r}, t, \mathbf{k}) = \int d\epsilon \xi_F(\mathbf{r}, t, \mathbf{k}, \epsilon) \delta(\epsilon - \epsilon_{\mathbf{k}})$ - the on-shell part of the stochastic source. Then the kinetic equation acquires the Boltzmann-Langevin form:

$$[\partial_t + \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \nabla_{\mathbf{r}} - (\nabla_{\mathbf{r}} V^{\text{cl}}) \nabla_{\mathbf{k}}] \tilde{F}(\mathbf{r}, t, \mathbf{k}) = I^{\text{coll}}[\tilde{F}] + \tilde{\xi}_F(\mathbf{r}, t, \mathbf{k}) \quad (12.47)$$

The Gaussian correlator of the stochastic source may be read out of the last line in Eq. (12.46) and is given by

$$\langle \tilde{\xi}_F(\mathbf{r}_1, t_1, \mathbf{k}_1) \tilde{\xi}_F(\mathbf{r}_2, t_2, \mathbf{k}_2) \rangle = \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \delta(t_1 - t_2) [\tilde{F}(\mathbf{k}_2) - \tilde{F}(\mathbf{k}_1)] I(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2), \quad (12.48)$$

where

$$\begin{aligned} I(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = & \frac{i}{2} \left\{ [\tilde{F}(\mathbf{k}_2) - \tilde{F}(\mathbf{k}_1)] U_{2-1}^K + [\tilde{F}(\mathbf{k}_2) \tilde{F}(\mathbf{k}_1) - 1] [U_{2-1}^R - U_{2-1}^A] \right\} \\ = & \frac{i}{2} \left\{ [\tilde{F}(\mathbf{k}_2) - \tilde{F}(\mathbf{k}_1)] \tilde{B}(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1) + [\tilde{F}(\mathbf{k}_2) \tilde{F}(\mathbf{k}_1) - 1] \right\} [U_{2-1}^R - U_{2-1}^A] \end{aligned} \quad (12.49)$$

and $\hat{U}_{2-1} = \hat{U}(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1, \epsilon_{\mathbf{k}_2} - \epsilon_{\mathbf{k}_1})$ is the bosonic propagator restricted to be on shell. Here $U^K = U^R \circ B - B \circ U^A$ and $\tilde{B}(\mathbf{q})$ is the on-shell bosonic distribution. The factor $U_{2-1}^R - U_{2-1}^A$ enforces the energy conservation: $\omega_{\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1} = \epsilon_{\mathbf{k}_2} - \epsilon_{\mathbf{k}_1}$ and thus in equilibrium $I(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = 0$. Also notice that $I(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2)$ is odd upon interchange of the arguments, $I(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = -I(\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_1)$. This makes $\langle \xi_F(\mathbf{k}_1) \xi_F(\mathbf{k}_2) \rangle$ even, as it should be. The expression (12.49) should be compared with the collision integral (11.8), which in this notation acquires the form

$$I^{\text{coll}}[\tilde{F}] = \sum_{\mathbf{k}_2} I(\mathbf{k}, \mathbf{k}_2) \quad (12.50)$$

Notice that in equilibrium both the collision integral and the noise correlator vanish. Therefore the equilibrium distribution, $\tilde{F}(\mathbf{k}) = \tanh \epsilon_{\mathbf{k}}/2T$, is not affected by the Langevin stochasticity.

The physics behind the Langevin term is traced back to the random nature of the inelastic collisions. Since the noise correlator (12.48), (12.49) itself depends on the instantaneous distribution function, $\tilde{F}(\mathbf{r}, t, \mathbf{k})$, the Boltzmann-Langevin equation (12.47) constitutes an example of a multiplicative stochastic process. It therefore must be associated with a certain regularization procedure. Being derived from the Keldysh-type action with the causality structure, it inherits the retarded Ito regularization, see Sections 4.3 and 4.6.

To illustrate how the stochastic part of the distribution function manifests itself, one needs to take a closer look at the source fields, which have to be added to the $\hat{G} - \hat{\Sigma}$ action in order to generate observables. As an example we consider the quantum component of the vector potential, $\hat{\mathbf{A}}^q(x) = \hat{\gamma}^q \mathbf{A}^q(x)$. It enters the bare inverse Green function as $\hat{G}_0^{-1} \rightarrow \hat{G}_0^{-1} - \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \hat{\mathbf{A}}^q(x)$, where $\mathbf{v}_{\mathbf{k}} = \partial_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}}$ is velocity. The trace logarithm part of the action acquires the form $\text{Tr} \ln (\hat{G}^{-1} - \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \hat{\mathbf{A}}^q) = \text{Tr} \ln (1 - \hat{G} \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \hat{\mathbf{A}}^q)$, where $\hat{G}$ is the dressed Green function. One can now expand this expression to the second order in the source field $\mathbf{A}^q(x)$ to find

$$iS[\hat{G}, \hat{\Sigma}, \mathbf{A}^q] = iS[\hat{G}, \hat{\Sigma}] - 2i\mathbf{A}^q(x)\mathbf{J}(x) - 2\mathbf{A}^q(x)\mathcal{K}(x, x')\mathbf{A}^q(x') \quad (12.51)$$

where $\mathbf{J}(x) = -\frac{i}{2} \text{Tr} \left\{ \hat{G}_{x,x'} \hat{\gamma}^q \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \right\}_{x'=x}$ and $\mathcal{K}(x, x') = \frac{1}{4} \text{Tr} \left\{ \hat{G}_{x,x'} \hat{\gamma}^q \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \hat{G}_{x',x} \hat{\gamma}^q \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \right\}$ is the rank-two tensor. At the stationary point, they acquire the form

$$\mathbf{J}(x) = -\frac{i}{2} G_{x,x}^K \mathbf{v}_{\mathbf{k}} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \tilde{F}(x, \mathbf{k}) \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \quad (12.52)$$

$$\mathcal{K}(x, x') \approx \delta(x - x') \sum_{\mathbf{k}} \left(1 - \tilde{F}^2(x, \mathbf{k}) \right) \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \tau_{\text{sc}} \quad (12.53)$$

where $\tau_{\text{sc}}(\mathbf{k}) = (2 \text{Im} \Sigma_{\mathbf{k}}^R)^{-1} = -\frac{1}{4} \int \frac{d\epsilon}{2\pi} (G_{\epsilon\mathbf{k}}^R - G_{\epsilon\mathbf{k}}^A)^2$ is the mean free scattering time. The approximate locality of the tensor $\mathcal{K}(x, x')$ is based on the assumption that $\mathbf{A}^q(x)$ changes slowly in time on the scale of τ_{sc} and in space on the scale of the mean free path $v_F \tau_{\text{sc}}$.

One can evaluate the average current $\langle \mathbf{J} \rangle = \frac{i}{2} \delta Z[\mathbf{A}] / \delta \mathbf{A}^q(x) |_{\mathbf{A}^q=0} = \mathbf{J}(x)$, Eq. (12.52), where the distribution function is found as a solution of the kinetic equation. To have a nonzero average current, the latter must include an external electric field. The stochastic part of the kinetic equation plays no role here, since it averages out to zero. Let's now look at the current noise, defined as the second cumulant,

$$\langle \mathcal{S} \rangle = - \frac{1}{4} \frac{\delta^2 Z[\mathbf{A}]}{\delta \mathbf{A}^q(x) \delta \mathbf{A}^q(x')} \Big|_{\mathbf{A}^q=0} - \langle \mathbf{J} \rangle^2 = \langle \mathcal{K}(x, x') \rangle + \langle \mathbf{J}(x) \mathbf{J}(x') \rangle - \langle \mathbf{J} \rangle^2. \quad (12.54)$$

The angular brackets here are understood as averaging over the Langevin noise with the correlator (12.48). Since both $\mathcal{K}(x, x')$ and $\mathbf{J}(x)\mathbf{J}(x')$ are quadratic in the distribution function, $\tilde{F}$, their averages are affected by the Langevin part of the Boltzmann equation (12.47).

In equilibrium the stochasticity is absent and the current noise is given by the Johnson-Nyquist expression, $\langle \mathcal{S} \rangle = \mathcal{K} = 4Tg$, where $g = v \int d\Omega_{\mathbf{k}} \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \tau_{\text{sc}}$ is the conductivity tensor and ν is the density of states (we have also used that $\int d\epsilon_{\mathbf{k}} (1 - \tanh^2 \epsilon_{\mathbf{k}}/2T) = 4T$). This is, of course, a manifestation of the FDT, which

guarantees a relation between $\mathcal{K}(x, x')$ and $\delta \mathbf{J}(x)/\delta \mathbf{A}^{\text{cl}}(x)$. The non-equilibrium part of the current noise is affected by the Langevin stochasticity. The latter leads to, for example, $\langle \mathbf{J}(x) \mathbf{J}(x') \rangle - \langle \mathbf{J} \rangle^2 \neq 0$ and also affects $\langle \mathcal{K}(x, x') \rangle$.

The field-theoretical treatment of the Langevin noise is somewhat different from the phenomenological one presented in the literature [235,236,237]. The latter treats the noise as $\langle \mathcal{S} \rangle = \langle \mathbf{J}(x) \mathbf{J}(x') \rangle - \langle \mathbf{J} \rangle^2$ (without the first term on the righthand side of Eq. (12.54)). In this case, even the equilibrium Johnson-Nyquist noise comes as a result of the stochastic fluctuations of the distribution function. Thus, the corresponding noise correlator does not vanish in equilibrium (nevertheless, there is still a close relation between the collision integral and the noise correlator [237]).

12.7.5 12.5 The Butterfly Effect and OTOC

The butterfly effect refers to spreading of perturbations in chaotic many-body systems. In a classical context it is typically associated with the divergence of trajectories, characterized by a positive Lyapunov exponent. Quantum mechanics lacks the notion of infinitesimally closed trajectories and thus calls for another measure of chaoticity. The convenient characteristic is provided by the out-of-timeorder correlator (OTOC). It was first introduced by Larkin and Ovchinnikov [238] and later revived by Kitaev [239] and Maldacena, Shenker, and Stanford [240]. For Heisenberg picture observables $\hat{\mathcal{O}}$ and $\hat{\hat{\mathcal{O}}}$ the OTOC is defined as

$$\mathcal{C}(t) = \text{Tr}\{\hat{\mathcal{O}}(t)\hat{\hat{\mathcal{O}}}(0)\hat{\mathcal{O}}(t)\hat{\hat{\mathcal{O}}}(0)\hat{\rho}(-\infty)\}. \quad (12.55)$$

For, for example, a zero-temperature ground state it is given by the overlap of the state $\hat{\mathcal{O}}(t)\hat{\hat{\mathcal{O}}}(0)|0\rangle$ with the state $\langle 0|\hat{\mathcal{O}}(t)\hat{\hat{\mathcal{O}}}(0)$. The former is obtained by first perturbing the ground state with $\hat{\hat{\mathcal{O}}}$ at time $t = 0$, then propagating the system forward in time until $t > 0$. The latter one requires a time machine, since first the ground state is hit by $\hat{\mathcal{O}}(t)$ and then the resulting state propagates back in time to $t = 0$ when $\hat{\hat{\mathcal{O}}}$ acts on it. Thus, OTOC measures how much the state is scrambled by the perturbation and the subsequent evolution. One expects that in a chaotic system the overlap and thus $\mathcal{C}(t)$ decays rapidly with time. Moreover, if $\hat{\mathcal{O}}$ and $\hat{\hat{\mathcal{O}}}$ are local operators at two spatially separated locations, $\mathcal{C}(t)$ is peaked at a specific time when the perturbation propagates between the two points.

To calculate OTOC we follow the approach of Aleiner, Faoro, and Ioffe [241]. They introduced two copies of the Keldysh contour, Fig. 12.1, which allow one to evaluate OTOC by introducing proper sources. Colloquially the contour represents

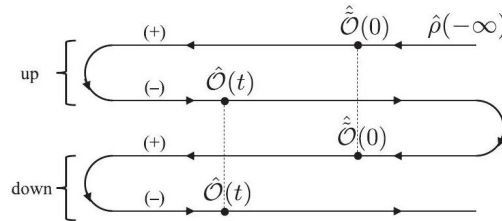


Figure 12.1 Extended time contour for calculation of OTOC. It includes two copies of Keldysh contour dubbed "up" and "down" worlds.

the two "worlds" called "up" and "down" with time opposite "butterflies." Development of the chaos and vanishing of the overlap between the two worlds leads to an effective decoupling of the up and down contours. On the other hand, in non-chaotic systems the two contours remain coupled.

To proceed we discretize time along the contour of Fig. 12.1 and introduce fermionic coherent states, which form a $4N$ -component vector $(\psi_u^+, \psi_u^-, \psi_d^+, \psi_d^-)^T$, where "u" and "d" stand

for up and down correspondingly and we suppressed the discrete time index, $j = 1, \dots, N$, for brevity. Inverting the $4N \times 4N$ matrix, which straightforwardly generalizes the one in Eq. (10.15), one finds 4×4 bare Green function

$$\check{G}(t, t') = \begin{pmatrix} \hat{G}_{uu}(t, t') & \hat{G}_{ud}(t, t') \\ \hat{G}_{du}(t, t') & \hat{G}_{dd}(t, t') \end{pmatrix} \quad (12.56)$$

where

$$\hat{G}_{uu} = \hat{G}_{dd} = \begin{pmatrix} G^{\parallel} & G^{<} \\ G^{>} & G^{\bar{u}} \end{pmatrix}; \quad \hat{G}_{ud} = \begin{pmatrix} G^{<} & G^{<} \\ G^{<} & G^{<} \end{pmatrix}; \quad \hat{G}_{du} = \begin{pmatrix} G^{>} & G^{>} \\ G^{>} & G^{>} \end{pmatrix}, \quad (12.57)$$

and $G^{\parallel}, G^{<}, G^{>}, G^{\bar{u}}$ are already familiar Green functions, defined in Eq. (10.21). We now perform Keldysh-Larkin-Ovchinnikov rotation separately in the up and down worlds, exactly as in Eqs. (10.23), (10.24). This brings the 4×4 Green function, $\check{G}$ into the retarded-advanced-Keldysh triangular form, Eq. (10.25), where the three nontrivial components are now 2×2 matrices in the up-down subspace:

$$\check{G}^R = \begin{pmatrix} G^R & 0 \\ 0 & G^R \end{pmatrix}; \quad \check{G}^A = \begin{pmatrix} G^A & 0 \\ 0 & G^A \end{pmatrix}; \quad \check{G}^K = \begin{pmatrix} G_{uu}^K & G_{ud}^K \\ G_{du}^K & G_{dd}^K \end{pmatrix}, \quad (12.58)$$

where the check symbol stands for matrices in the up-down two-world space. Here $G_{uu}^K = G_{dd}^K = G^K = G^{>} + G^{<}$ and $G_{ud}^K = 2G^{<}, G_{du}^K = 2G^{>}$.

The distribution matrix, $\check{F}$, is defined in the usual way (cf. Eq. (10.33)), through $\check{G}^K = \check{G}^R \circ \check{F} - \check{F} \circ \check{G}^A$. In an equilibrium noninteracting system its components are given by $F_{uu} = F_{dd} = \tanh \frac{\epsilon - \mu}{2T}$; $F_{ud} = \tanh \frac{\epsilon - \mu}{2T} - 1$; $F_{du} = \tanh \frac{\epsilon - \mu}{2T} + 1$.

We will next examine stability of these values against collisions by considering corresponding components of the matrix kinetic equation. We'll find that while the diagonal components are stable (in accordance with the FDT), the off-diagonals are not. Instead, they decay toward the stable fixed point, where $F_{ud} = F_{du} = 0$. At this chaotic fixed point the up and down worlds are disconnected, leading to the decay of OTOC, $\mathcal{C}(t)$.

We'll take electron-electron collisions as a mechanism of chaotization (other interactions, such as electron-phonon interaction, were considered in Ref. [241] and shown to lead to the same conclusions). To derive the collision integral, one needs components of the self-energy. Specifically we'll be interested in the offdiagonal up-down and down-up components (since the diagonal components of the kinetic equation turn out to be unaffected by the presence of the other world). We first notice that, since $\check{G}^R$ and $\check{G}^A$ are diagonal, the non-diagonal components of the polarization operator $\check{\Pi}(x, x')$ contains only the Keldysh components $\Pi_{ud}^K = \Pi_{du}^K = (i/2)G_{ud}^K G_{du}^K$ (cf. Eq. (10.52)) while $\Pi_{ud}^R = \Pi_{du}^R = 0$ and the same for the advanced components. This implies that the retarded and advanced components of the RPA screened interaction $\check{U}_{\text{RPA}}^R$ and $\check{U}_{\text{RPA}}^A$ are also diagonal in the up-down subspace, while its Keldysh component has off-diagonal components $\check{U}_{\text{RPA}}^K = -\check{U}_{\text{RPA}}^R \check{\Pi}^K \check{U}_{\text{RPA}}^A$ (cf. Eq. (11.9)). According to Eq. (11.5) this leads to (recall that $\hat{\gamma}^{\text{cl}} = 1$)

$$\hat{\Sigma}_{ud} = \frac{i}{2} \hat{G}_{ud} U_{ud}^K = -\frac{i}{2} \hat{G}_{ud} U_{\text{RPA}}^R \Pi_{ud}^K U_{\text{RPA}}^A \quad (12.60)$$

and similarly for the down-up matrix self-energy. Notice that, since $\hat{G}_{ud}$ contains only a Keldysh component, but no retarded and advanced one, the only nonzero component of the off-diagonal self-energy is $\Sigma_{ud}^K = G_{ud}^K |U_{\text{RPA}}^R|^2 G_{ud}^K G_{du}^K / 4$, while $\Sigma_{ud}^R = \Sigma_{ud}^A = 0$. Notice that $\Sigma_{ud}^K \propto F_{ud} F_{ud} F_{du}$ but is independent of the diagonal component, F , of the distribution.

Neglecting for a moment spatial derivatives, one can write the off-diagonal components of the kinetic equation as

$$\partial_t \tilde{F}_{\text{ud}}(t, \mathbf{k}) = I_{\text{ud}}^{\text{coll}}[\tilde{F}] = i \left[\Sigma_{\text{ud}}^{\text{K}} - (\Sigma_{\text{uu}}^{\text{R}} \circ F_{\text{ud}} - F_{\text{ud}} \circ \Sigma_{\text{dd}}^{\text{A}}) \right], \quad (12.61)$$

and similarly for the down-up component. Assuming $F_{\text{uu}} = F_{\text{dd}} = F$ for simplicity, and following the steps leading to the collision integral (11.11), one finds

$$\begin{aligned} I_{\text{ud}}^{\text{coll}}[\tilde{F}] = & -\frac{\pi}{2} \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{k}'} \left| U_{\text{RPA}}^{\text{R}}(\mathbf{q}, \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}}) \right|^2 \delta(\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}} + \epsilon_{\mathbf{k}'}) \\ & \times \left\{ \tilde{F}_{\text{ud}}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \tilde{F}_{\text{ud}}(\mathbf{k}') \tilde{F}_{\text{du}}(\mathbf{k}' + \mathbf{q}) - \tilde{F}_{\text{ud}}(\mathbf{k}) \mathcal{L}[\tilde{F}] \right\} \end{aligned} \quad (12.62)$$

where the "out" part of the collision integral contains $\mathcal{L}[\tilde{F}] \sim \Sigma_{\text{uu}}^{\text{R}} - \Sigma_{\text{dd}}^{\text{A}}$, given by

$$\mathcal{L}[\tilde{F}] = \tilde{F}(\mathbf{k}' + \mathbf{q}) \tilde{F}(\mathbf{k}') - 1 + \tilde{F}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) (\tilde{F}(\mathbf{k}' + \mathbf{q}) - \tilde{F}(\mathbf{k}')).$$

The "in" part, coming from $\Sigma_{\text{ud}}^{\text{K}}$, depends only on $\tilde{F}_{\text{ud}}$ and $\tilde{F}_{\text{du}}$, but not on the diagonal component $\tilde{F}$, as explained earlier. This makes the structure of the offdiagonal collision integral qualitatively different from the diagonal one. The latter may be shown to be unaffected by the presence of another world and is given by Eq. (11.11).

The off-diagonal collision integral (12.62) is exactly nullified by the equilibrium noninteracting distributions (12.59). To investigate stability of this solution one may assume that the diagonal distributions are quickly equilibrated to $\tilde{F}(\mathbf{k}) = \tanh(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)/2T$. Then the off-diagonal ones may be looked for in the following form ⁴

$$\tilde{F}_{\text{ud}}(t, \mathbf{k}) = \phi(t) \left(\tanh \frac{\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu}{2T} - 1 \right); \quad \tilde{F}_{\text{du}}(t, \mathbf{k}) = \phi(t) \left(\tanh \frac{\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu}{2T} + 1 \right) \quad (12.63)$$

Substituting this into Eqs. (12.61), (12.62), one finds [241]

$$\frac{d\phi}{dt} = \frac{1}{\tau_{\text{sc}}} (\phi^3 - \phi) \quad (12.64)$$

where τ_{sc} is the "out" Fermi liquid electron-electron scattering time, given by Eq. (11.12). Equation (12.64) describes a viscous dynamics in $V(\phi) = \frac{1}{2}\phi^2 - \frac{1}{4}\phi^4$ potential. It shows that $\phi = 1$ noninteracting fixed point, represented by Eq. (12.59), is unstable against collisions. The stable fixed point, $\phi = 0$, corresponds to $\tilde{F}_{\text{ud}} = \tilde{F}_{\text{du}} = 0$, that is, completely decoupled up and down worlds, where $\mathcal{C} = 0$. Equation (12.64) implies that OTOC $\mathcal{C}(t) - \mathcal{C}(0) \propto -e^{+2t/\tau_{\text{sc}}}$, where the butterfly instability rate $2/\tau_{\text{sc}} \propto T^2/\epsilon_F \ll T$. This finding is in agreement with Ref. [240], which states that the maximum instability rate can't exceed $2\pi T$.

In spatially extended systems the left-hand side of the kinetic equation is often diffusive (examples are provided in Chapter 14 and subsequent chapters). In case of OTOC it is translated into a diffusion equation for $\phi(\mathbf{r}, t)$ of the form

$$\partial_t \phi - D \nabla_{\mathbf{r}}^2 \phi = \frac{1}{\tau_{\text{sc}}} (\phi^3 - \phi) + \xi_{\phi}(\mathbf{r}, t) \quad (12.65)$$

where D is a diffusion coefficient. The scattering time here may not be the same as the Fermi liquid one, Eq. (11.12), due to its renormalization by a mechanism responsible for diffusion. An example of this phenomenon is discussed in Section 16.5. The last term on the right-hand side

of Eq. (12.65) is the Boltzmann-Langevin noise. To derive the corresponding noise correlation function, one should

generalize the approach of Sections 12.3 and 12.4 to the 4×4 matrix formalism. Somewhat lengthy but straightforward calculation yields

$$\langle \xi_\phi(\mathbf{r}_1, t_1) \xi_\phi(\mathbf{r}_2, t_2) \rangle \propto v^{-1} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \delta(t_1 - t_2) (\phi^2 - \phi^4) \quad (12.66)$$

where $v \approx U_{\text{RPA}}^{-1}$ is the density of states at the Fermi energy.

Equation (12.65) is (a variant of) the Fisher-Kolmogoroff-Petrovsky-Piscounoff (F-KPP) equation [242, 243], which first appeared in population dynamics as well as a description of combustion fronts. This equation supports ballistically propagating 1D fronts of the form $\phi(x, t) = \phi(x - v_b t)$. Such fronts describe an "invasion" of the stable state, $\phi = 0$, into a territory, previously occupied by the unstable state, $\phi = 1$. The front (aka butterfly) velocity, v_b , is not fixed by the F-KPP equation, which only provides its lower bound, $v_b \geq v_b^* = \sqrt{8D/\tau_{\text{sc}}}$. A linear stability analysis against noise, ξ_ϕ , suggests [244] that fronts with the smallest velocity, v_b^* , are the stable ones.

We thus arrived at a spectacular conclusion [241]: in systems with diffusive propagation of conserved quantities (such as heat, charge, spin, etc.), the chaotization, as described by OTOC, propagates ballistically. The chaos "invades" the ordered region in a form of the Fisher front, which propagates with a finite speed, v_b^* , dubbed the butterfly velocity. The latter depends on the conserved quantities diffusion constant, D , and the chaotic instability rate, $1/\tau_{\text{sc}} \leq 2\pi T/\hbar$ [240], as $v_b^* \propto \sqrt{D/\tau_{\text{sc}}}$. The Boltzmann-Langevin-Ito stochastic force on the right-hand side of Eq. (12.65) generates fluctuations of the front speed and its broadening [244]. It is important to notice that the noise amplitude (12.66) vanishes at both stable, $\phi = 0$, and unstable, $\phi = 1$, equilibria. The latter fact ensures that the unstable equilibrium does not develop a spontaneous instability before the front (initiated by the perturbation $\hat{\mathcal{O}}(0)$) arrives to the observation point (where the observable $\hat{\mathcal{O}}(t)$ is measured).

12.7.6 12.6 Problems

12.6.1 Linearized Kinetic Equation

Consider a spatially uniform and isotropic in momentum space situation, where the occupation numbers are functions of energy and time only. This allows us to introduce $n_\xi(t) = \sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}}(t) \delta(\xi - \xi_{\mathbf{k}}) = v \int d\xi n_{\xi\mathbf{k}}(t) \delta(\xi - \xi_{\mathbf{k}})$. The kinetic equation acquires the form (cf. Eq. (11.18))

$$\begin{aligned} \partial_t n_\xi = & \iiint d\xi_1 d\xi' d\xi'_1 \mathcal{M}(\xi, \xi_1; \xi', \xi'_1) \delta(\xi + \xi_1 - \xi' - \xi'_1) \\ & \times [-n_\xi n_{\xi_1} (1 - n_{\xi'}) (1 - n_{\xi'_1}) + n_{\xi'} n_{\xi'_1} (1 - n_\xi) (1 - n_{\xi_1})] \end{aligned} \quad (12.67)$$

where $\mathcal{M} = \frac{4\pi}{v} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}, \mathbf{k}'} |U_{\text{RPA}}^{\text{R}}(\mathbf{q}, \xi'_1 - \xi)|^2 \delta(\xi - \xi_{\mathbf{k}}) \delta(\xi_1 - \xi_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}) \delta(\xi' - \xi_{\mathbf{k}'}) \delta(\xi'_1 - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})$ is the scattering rate, which we will approximate with a positive constant, having in mind short-range screened interactions. Let us assume furthermore that deviations from equilibrium are small and therefore the occupation numbers may be written as

⁰⁴ One can, in principle, consider distinct time-dependent functions $\phi_{\text{ud}}(t)$ and $\phi_{\text{du}}(t)$. It is easy to show, though, that $\phi_{\text{ud}} - \phi_{\text{du}}$ decays to zero fast.

⁰⁵ This is easy to see by substituting $\phi(z)$, where $z = x - v_b t$, into Eq. (12.65). It acquires the form $D\ddot{\phi} = -\partial_\phi(-V(\phi)) - v_b \dot{\phi}$, where the dots denote derivatives with respect to z . This is a Newtonian equation for a particle with mass D in the inverted potential $-V(\phi) = \phi^4/4 - \phi^2/2$ with the friction coefficient v_b . Propagating front solutions correspond to overdamped non-oscillatory sliding from $\phi = 0$ to $\phi = 1$. This dictates the lower bound for the friction coefficient v_b .

$$n_\xi(t) = n_F(\xi) + \chi(\xi, t) \quad (12.68)$$

where the equilibrium distribution is $n_F(\xi) = (e^\xi + 1)^{-1}$ and from now on we have passed to dimensionless energy $\xi/T \rightarrow \xi$.

Substitute Eq. (12.68) in (12.67) and keep only the terms linear in $\chi(\xi, t)$. Assuming $\mathcal{M}(\xi, \xi_1; \xi', \xi'_1) = \mathcal{M} = \text{const}$, perform ⁶ explicitly the energy integrals and show that $\chi(\xi, t)$ satisfy the following homogeneous linear equation [245, 246]:

$$\begin{aligned} \tau_{\text{sc}} \partial_t \chi(\xi) = & -\frac{\xi^2 + \pi^2}{\pi^2} \chi(\xi) \\ & + \int \frac{d\xi'}{\pi^2} \left[\frac{2(\xi - \xi')}{\sinh\left(\frac{\xi - \xi'}{2}\right)} - \frac{\xi + \xi'}{\sinh\left(\frac{\xi + \xi'}{2}\right)} \right] \frac{\cosh(\xi'/2)}{\cosh(\xi/2)} \chi(\xi') \end{aligned}$$

where $\tau_{\text{sc}}^{-1} = \mathcal{M}(\pi T)^2/2$. To proceed one should distinguish between perturbations with different symmetries: odd (or temperature) $\chi(\xi, t) = -\chi(-\xi, t)$, which preserve the electron-hole symmetry, versus even (or chemical potential) $\chi(\xi, t) = \chi(-\xi, t)$, which change the total number of particles. For such functions the preceding equation acquires the form

$$\tau_{\text{sc}} \partial_t \chi(\xi) = -\frac{\xi^2 + \pi^2}{\pi^2} \chi(\xi) + \frac{\lambda(\lambda + 1)}{2} \int \frac{d\xi'}{\pi^2} \frac{\xi - \xi'}{\sinh\left(\frac{\xi - \xi'}{2}\right)} \frac{\cosh(\xi'/2)}{\cosh(\xi/2)} \chi(\xi') \quad (12.69)$$

where for the even perturbations $\lambda = 1$ and for the odd ones $\lambda = 2$. Define

$$\psi(x, t) = \int d\xi e^{ix\xi/\pi} \cosh(\xi/2) \chi(\xi, t) \quad (12.70)$$

and show that the integral equation (12.69) acquires a form of the imaginary-time Schrödinger equation with the Pöschl-Teller potential

$$\tau_{\text{sc}} \partial_t \psi = -\hat{H} \psi; \quad \hat{H} = -\partial_x^2 + 1 - \frac{\lambda(\lambda + 1)}{\cosh^2 x} \quad (12.71)$$

Any initial perturbation $\chi(\xi, 0)$ should be first decomposed into the even and odd components as $(\chi(\xi, 0) \pm \chi(-\xi, 0))/2$, which are then Fourier transformed according to (12.70) and then expanded into the basis of even eigenfunctions of $\lambda = 1$ Pöschl-Teller potential, $\psi_k^{(\lambda=1)}(x)$, and odd eigenfunctions of $\lambda = 2$ potential $\psi_k^{(\lambda=2)}(x)$, correspondingly. The Fourier image of the perturbation evolves then according to $\psi(x, t) = \sum_{k, \lambda} c_k^{(\lambda)} \psi_k^{(\lambda)}(x) e^{-E_k^{(\lambda)} t/\tau_{\text{sc}}}$, where $E_k^{(\lambda)}$ are eigenenergies of the Hamiltonian (12.71). Therefore, the spectrum of (12.71) determines the relaxation rates.

Clearly there is a continuous spectrum with $E_k^{(\lambda)} \geq 1$, leading to the relaxation rate $1/\tau_{\text{sc}}$. There is, however, also a discrete spectrum, which for integer λ is given by $E_{\lambda-m}^{(\lambda)} = 1 - m^2$, where $m = \lambda, \lambda - 1, \dots, 1$. For the even case, $\lambda = 1$, this leads to a single (even) zero mode $E_0^{(1)} = 0$. For the odd case, $\lambda = 2$, this leads to $E_0^{(2)} = -3$ with an even eigenfunction (which is therefore irrelevant) and $E_1^{(2)} = 0$ with an odd eigenfunction. Find ⁷ two zero-mode eigenfunctions: even $\chi_0^{(\lambda=1)}(\xi)$ and odd $\chi_1^{(\lambda=2)}(\xi)$, which correspond to $E_0^{(1)} = E_1^{(2)} = 0$. The corresponding perturbations do not decay. Explain the physics behind these two non-decaying perturbations. Hint: think about the conservation laws (11.13).

⁶ Do not entrust the integrations to Mathematica, which may not simplify the result sufficiently. Employ $\int_0^\infty da \log a / ((a-1)(ab+1)) = (\pi^2 + \log^2 b) / (2+2b)$.

12.6.2 Near-Field Heat Transfer

A standard mechanism of the heat transfer involves radiation of (on mass-shell, i.e. real) photons. It leads to the celebrated Stefan-Boltzmann law, stating that the heat flux (per unit area) is $J_h^{SB} \propto c^{-2} T^4$. It was realized some time ago [247, 248, 249, 250] that, if two bodies are in a close proximity, there is the heat transfer mediated by virtual evanescent modes of the electromagnetic field. This mechanism is particularly clear in case of electrons in metals interacting via Coulomb interactions (longitudinal component of the electromagnetic field). In this case electron-hole pairs in the hotter metal can induce pairs in the colder one via the Coulomb-mediated scattering. These processes result in the net energy transfer.

Consider two parallel metallic layers kept at a distance d and having different temperatures $T_1 > T_2$. Show that to the second order in the screened interlayer interaction ${}^8U_{12}(\mathbf{q}, \omega)$, the heat flux between them is given by [251, 252]

$$J_h = \iint \frac{d\omega d^2\mathbf{q}}{(2\pi)^3} |U_{12}^R(\mathbf{q}, \omega)|^2 \text{Im} \Pi_1^R(\mathbf{q}, \omega) \text{Im} \Pi_2^R(\mathbf{q}, \omega) \omega [n_B(\omega/T_1) - n_B(\omega/T_2)], \quad (12.72)$$

where $\mathbf{q}$ is the 2 d in-plane momentum, $\Pi_j(\mathbf{q}, \omega)$ is the intralayer polarization operator, $j = 1, 2$, and $n_B(\omega/T_j) = (e^{\omega/T_j} - 1)^{-1}$ are boson occupation numbers.

To this end define the heat flux as $J_h = \frac{d}{dt} \sum_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}}(t) = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}} I^{\text{coll}}[n_{\mathbf{k}}]$, where the occupation numbers refer to, for example, the first layer. The collision integral is convenient to take in the form (11.10), where the $\tilde{F}$ functions refer to $j = 1$, while polarization operators to $j = 2$ and $U_{\text{RPA}}^R = U_{12}^R$. Indeed, this reflects collisions mediated by interlayer interactions, which lead to heat exchange. The interlayer interactions lead to the internal equilibration, which is assumed to be much faster. As a result, the interlayer collision integrals are null and also, $\Pi_2^K = 2 \coth(\omega/T_2) \text{Im} \Pi_2^R$ and $\tilde{F}_1(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \tilde{F}_1(\mathbf{k}) - 1 = \coth(\omega/T_1) [\tilde{F}_1(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \tilde{F}_1(\mathbf{k})]$. Also notice that $\sum_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}} [\tilde{F}_1(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \tilde{F}_1(\mathbf{k})] \delta(\omega - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \xi_{\mathbf{k}}) = (\omega/\pi) \text{Im} \Pi_1^R$ (upon anti-symmetrization with respect to $\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}$ and $\xi_{\mathbf{k}}$); compare Eq. (10.54).

The integrals in (12.72) are effectively limited by $|\omega| \lesssim T_j$ and $q \lesssim d^{-1}$. Therefore, for sufficiently small temperatures and $k_F d > 1$ one may use small frequency and wave number approximation for $\Pi_j(\mathbf{q}, \omega)$; compare Eq. (10.55). Put $\text{Re} \Pi_j^R(\mathbf{q}, \omega) \approx \nu$, while $\text{Im} \Pi_j^R(\mathbf{q}, \omega) \approx \pi \nu \omega / (2v_F q) \theta(v_F q - |\omega|)$ and show that $J_h = J_h^{\text{NF}}(T_1) - J_h^{\text{NF}}(T_2)$, where the near-field heat flux $J_h \propto v_F^{-2} T^4 \log T$. Compare this result with the radiative Stefan-Boltzmann prediction.

⁸ In the case of the two layers the RPA screening (10.68) acquires the matrix structure in the $j = 1, 2$ space

$$[\tilde{U}^R(\mathbf{q}, \omega)]^{-1} = [\tilde{U}_0(\mathbf{q})]^{-1} + \tilde{\Pi}_0^R(\mathbf{q}, \omega),$$

where the polarization matrix is diagonal $\tilde{\Pi}_{0;ij}^R = \delta_{ij} \Pi_j^R$, and the bare 2d Coulomb interactions are $\tilde{U}_{0;11} = \tilde{U}_{0;22} = \int \frac{dq_z}{2\pi} \frac{4\pi}{q^2 + q_z^2} = \frac{2\pi}{q}$, while $\tilde{U}_{0;12} = \tilde{U}_{0;21} = \int \frac{dq_z}{2\pi} \frac{4\pi}{q^2 + q_z^2} e^{iq_z d} = \frac{2\pi}{q} e^{-qd}$.

⁰⁷ Notice that the Pöschl-Teller Hamiltonian $\hat{H} = -\partial_x^2 + \lambda^2 - \frac{\lambda(\lambda+1)}{\cosh^2 x} = \hat{B}^\dagger \hat{B}$ is supersymmetric (cf. footnote 2 in chapter 4) with $\hat{B} = i\partial_x + i\lambda \tanh x$. It therefore admits a zero-energy ground state, which is found as $\hat{B}\psi_0 = 0$.

13 Special Non-Equilibrium Systems in Condensed Mater by Kamenev

13.1 Quantum Transport

This chapter is devoted to electron transport through quantum coherent circuits. We start from the multichannel Landauer formula for the conductance. We then discuss noise power, as well as higher-order current cumulants. The latter provide the knowledge of the so-called full counting statistics of the transmitted charge, given by the Levitov formula. We also discuss adiabatic pumping: the Brouwer formula for the mean pumped charge and its full counting statistics. Finally we address the spin-torque effect and spin-torque shot noise in nano-magnetic structures.

13.1.1 13.1 Landauer Formula

Consider a quasi-one-dimensional adiabatic constriction connected to two reservoirs, which we refer to as left (L) and right (R), Fig. 13.1. Such a constriction is called a quantum point contact (QPC). The electron motion within QPC is separable into transverse and longitudinal components. Owing to the confinement, the transverse motion is quantized and we assign a quantum number n to label transverse conduction channels, with $\phi_n(\mathbf{r}_\perp)$ being the corresponding transversal wave functions. The longitudinal motion is described in terms of the extended scattering states, that is, normalized electron plane waves incident from the left,

$$u_n^L(k, \mathbf{r}) = \phi_n(\mathbf{r}_\perp) \begin{cases} e^{ikx} + \mathbf{r}_n(k)e^{-ikx}, & x \rightarrow -\infty \\ \mathbf{t}_n(k)e^{ikx}, & x \rightarrow +\infty \end{cases}, \quad (13.1a)$$

and the right,

$$u_n^R(k, \mathbf{r}) = \phi_n(\mathbf{r}_\perp) \begin{cases} \mathbf{t}_n(k)e^{-ikx}, & x \rightarrow -\infty \\ e^{-ikx} + \mathbf{r}_n(k)e^{ikx}, & x \rightarrow +\infty \end{cases}, \quad (13.1b)$$

onto the scattering region, Fig. 13.1. Here k is the wave vector in the longitudinal directions and $\mathbf{t}_n(k)$ and $\mathbf{r}_n(k)$ are channel-specific transmission and reflection amplitudes. We have disregarded a possible phase difference between left and right

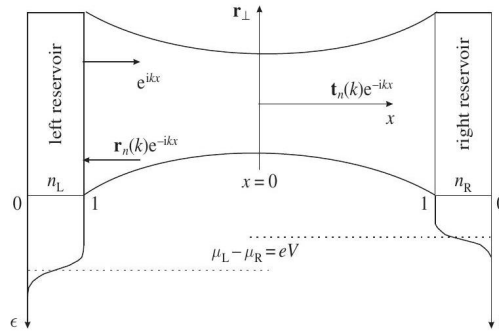


Figure 13.1 Two-terminal scattering problem for the quantum point contact.

reflection coefficients for brevity. The occupation numbers of the L(R) states in the L(R) reservoir are assumed to be the equilibrium Fermi-Dirac distributions $n_{L(R)}(\epsilon_k) = [\exp[(\epsilon_k - \mu_{L(R)})/T] + 1]^{-1}$, with electrochemical potentials shifted by an external voltage $\mu_L - \mu_R = eV$.

It is convenient to choose scattering states (Eq. (13.1)) as a basis and write the secondary quantized electron field operator in the coordinate space as

$$\hat{\Psi}(\mathbf{r}) = \sum_{nk} [\hat{c}_{nk}^L u_n^L(k, \mathbf{r}) + \hat{c}_{nk}^R u_n^R(k, \mathbf{r})] \quad (13.2)$$

where $\hat{c}_{nk}^{L(R)}$ are fermion annihilation operators in the corresponding states. For future use we also define the current operator in the longitudinal direction as $\hat{J} = (e/m) \text{Im} \int d\mathbf{r}_\perp \hat{\Psi}^\dagger \partial_x \hat{\Psi}$, leading to

$$\hat{J}(x) = \sum_{nk, n'k'} \hat{c}_{nk}^{\dagger a} M_{nn'}^{ab}(x; k, k') \hat{c}_{n'k'}^b \quad (13.3)$$

with the matrix elements

$$M_{nn'}^{ab}(x; k, k') = \frac{e}{2im} \int d\mathbf{r}_\perp [u_n^{*a}(k, \mathbf{r}) \partial_x u_{n'}^b(k', \mathbf{r}) - [\partial_x u_n^{*a}(k, \mathbf{r})] u_{n'}^b(k', \mathbf{r})] \quad (13.4)$$

where $a, b = L, R$. Employing the orthogonality condition in the transverse direction, $\int d\mathbf{r}_\perp \phi_n(\mathbf{r}_\perp) \phi_{n'}^*(\mathbf{r}_\perp) = \delta_{nn'}$, direct calculation of $\hat{M}_{nn'}(x; k, k')$ for, for example, $x > 0$ gives ¹

$$\hat{M}_{nn'}(k, k') = ev_{Fn} \delta_{nn'} \begin{pmatrix} \mathbf{t}_n^*(k) \mathbf{t}_n(k') & \mathbf{t}_n^*(k) \mathbf{r}_n(k') \\ \mathbf{r}_n^*(k) \mathbf{t}_n(k') & \mathbf{r}_n^*(k) \mathbf{r}_n(k') - 1 \end{pmatrix}, \quad (13.5)$$

where $v_{Fn} = k_{Fn}/m$ is the Fermi velocity in the n th channel. There is a similar expression for $\hat{M}$ for $x < 0$.

One can define now the current-generating function for this transport problem as

$$Z[A] = \int \mathbf{D}[\bar{\psi}\psi] \exp \left\{ i \vec{\bar{\Psi}} \left[\check{\mathbf{G}}^{-1} - \hat{A} \hat{M} \right] \vec{\Psi} \right\} \quad (13.6)$$

here $\vec{\bar{\Psi}} = (\bar{\psi}^L, \bar{\psi}^R)$, $\check{\mathbf{G}} = \text{diag} \{ \hat{G}_L, \hat{G}_R \}$ is 4×4 matrix Green function, whereas $\hat{G}_{L/R}$ are 2×2 matrices in the Keldysh space, and $\hat{A} = A^q \hat{\gamma}^q$ is a purely quantum vector potential (cf. Eq. (10.43)), used to generate the observable (i.e current). Since the functional integral over fermionic fields in Eq. (13.6) is quadratic, while the generating function is normalized as $Z[0] = 1$, one finds upon Gaussian integration

$$\ln Z[A] = \text{Tr} \ln [\hat{1} - \check{\mathbf{G}} \hat{A} \hat{M}] \quad (13.7)$$

By analogy with Eq. (10.46) the average current is generated from $Z[A]$ via functional differentiation with respect to the quantum component of the vector potential, $\langle J \rangle = (i/2) \delta \ln Z[A] / \delta A^q(t)|_{A^q=0}$. Expanding the trace of the logarithm to linear order in $\hat{A}$, as $\text{Tr} \ln [\hat{1} - \check{\mathbf{G}} \hat{A} \hat{M}] \approx -\text{Tr} [\check{\mathbf{G}} \hat{A}^q \hat{\gamma}^q \hat{M}]$, one finds for the average current

$$\begin{aligned} \langle J \rangle &= -\frac{ie}{2} \text{Tr} \left\{ v_{Fn} \begin{pmatrix} \hat{G}_L \hat{\gamma}^q & 0 \\ 0 & \hat{G}_R \hat{\gamma}^q \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{t}_n^*(k) \mathbf{t}_n(k) & \mathbf{t}_n^*(k) \mathbf{r}_n(k) \\ \mathbf{r}_n^*(k) \mathbf{t}_n(k) & \mathbf{r}_n^*(k) \mathbf{r}_n(k) - 1 \end{pmatrix} \right\} \\ &= -\frac{ie}{2} \sum_{nk} v_{Fn} |\mathbf{t}_n(k)|^2 \int \frac{d\epsilon}{2\pi} [G_L^K(\epsilon; n, k) - G_R^K(\epsilon; n, k)] \end{aligned} \quad (13.8)$$

⁰¹ Equation (13.5) is obtained as a result of certain approximations. The exact expression for the current matrix explicitly depends on the coordinate x . There are two types of term. The first depends on x as $\exp(\pm i(k + k')x) \approx \exp(\pm 2ik_F x)$, where k_F is the Fermi momentum; it represents Friedel oscillations. Their contribution to the current is small as $(k - k')/k_F \ll 1$, and thus neglected. The second type of term contains $\exp(\pm i(k - k')x) \approx 1$, since $|k - k'| \sim L_T^{-1} \ll x^{-1}$, where $L_T = v_F/T$ is ballistic thermal length, and the coordinate x is confined by the sample size $L \ll L_T$. See the corresponding discussions in [253].

where we used $|\mathbf{t}_n|^2 = 1 - |\mathbf{r}_n|^2$ and the Keldysh trace

$$\text{Tr} \{ \hat{G}_a \hat{\gamma}^q \} = G_a^K(t, t; n, k) = \int \frac{d\epsilon}{2\pi} G_a^K(\epsilon; n, k)$$

The Green functions are $G_{L(R)}^K(\epsilon; n, k) = -2\pi i \delta(\epsilon - \epsilon_{nk}) [1 - 2n_{L(R)}(\epsilon)]$, with $\epsilon_{nk} = v_{Fn}k$ (see Eq. (10.31)). Performing momentum k summation with the help of the delta-function, one finds

$$\langle J \rangle = \frac{e}{2\pi} \sum_n \int d\epsilon |\mathbf{t}_n(\epsilon)|^2 [n_L(\epsilon) - n_R(\epsilon)] \quad (13.9)$$

If the energy dependence of the transmission probability may be disregarded, one obtains the linear dependence between the average current and the applied voltage $\langle J \rangle = gV$, where the linear conductance per one spin direction is given by

$$g = \frac{e^2}{2\pi\hbar} \sum_n |\mathbf{t}_n|^2 \quad (13.10)$$

and all transmissions are taken at the Fermi energy $|\mathbf{t}_n|^2 = |\mathbf{t}_n(\epsilon_F)|^2$. (Notice that we restored the Planck constant $\hbar$ in the final expression for the conductance.) Equation (13.10) is known as the multichannel Landauer formula [254, 256] (see [257, 259] for detailed reviews on this subject).

13.1.2 13.2 Shot Noise

Based on the previous example we can make a step forward and calculate the second cumulant of the current fluctuations, the so-called noise power, defined as a symmetrized current-current correlation function:

$$\mathcal{S}(\omega, V) = \int dt e^{i\omega t} \langle \delta \hat{J}(t) \delta \hat{J}(0) + \delta \hat{J}(0) \delta \hat{J}(t) \rangle, \quad \delta \hat{J}(t) = \hat{J}(t) - \langle J \rangle \quad (13.11)$$

Within Keldysh technique this correlator may be deduced from $Z[A]$, Eq. (13.7). Indeed, one needs to expand the trace of the logarithm in Eq. (13.7) to second order in the auxiliary vector potential $\ln Z[A] \propto -\frac{1}{2} \text{Tr}[\tilde{\mathbf{G}} \hat{A} \tilde{\mathbf{M}} \hat{\mathbf{G}} \hat{A} \tilde{\mathbf{M}}]$ and differentiate twice over the quantum component A^q (cf. Eq. (10.49)),

$$\mathcal{S}(\omega, V) = - \frac{i}{2} \frac{\delta^2 \ln Z[A]}{\delta A^q(\omega) \delta A^q(-\omega)} \Big|_{A^q=0} \quad (13.12)$$

This expression automatically gives the properly symmetrized noise power (13.11). As a result of the differentiation one finds

$$\begin{aligned} \mathcal{S}(\omega, V) &= \frac{i}{2} \text{Tr} \{ \tilde{\mathbf{G}}(\epsilon_+) \hat{\gamma}^q \tilde{\mathbf{M}} \tilde{\mathbf{G}}(\epsilon_-) \hat{\gamma}^q \tilde{\mathbf{M}} \} \\ &= \frac{ie^2}{2} \sum_{nkk'} v_{Fn}^2 \int \frac{d\epsilon}{2\pi} [|\mathbf{t}_n|^4 \text{Tr} \{ \hat{G}_L(\epsilon_+) \hat{\gamma}^q \hat{G}_L(\epsilon_-) \hat{\gamma}^q \} \\ &\quad + |\mathbf{t}_n|^2 |\mathbf{r}_n|^2 \text{Tr} \{ \hat{G}_L(\epsilon_+) \hat{\gamma}^q \hat{G}_R(\epsilon_-) \hat{\gamma}^q \} + |\mathbf{t}_n|^2 |\mathbf{r}_n|^2 \text{Tr} \{ \hat{G}_R(\epsilon_+) \hat{\gamma}^q \hat{G}_L(\epsilon_-) \hat{\gamma}^q \} \\ &\quad + |\mathbf{t}_n|^4 \text{Tr} \{ \hat{G}_R(\epsilon_+) \hat{\gamma}^q \hat{G}_R(\epsilon_-) \hat{\gamma}^q \}], \end{aligned} \quad (13.13)$$

where we already calculated the partial trace over the left/right subspace, assuming that transmissions are energy independent, and introduced the notation $\epsilon_{\pm} = \epsilon \pm \omega/2$. Traces over the Keldysh space give

$$\text{Tr} \left\{ \hat{G}_a \hat{\gamma}^q \hat{G}_b \hat{\gamma}^q \right\} = G_a^K G_b^K + G_a^R G_b^A + G_a^A G_b^R = G_a^K G_b^K - (G_a^R - G_a^A) (G_b^R - G_b^A) \quad (13.14)$$

due to causality constraints. To perform the momentum k and k' summations one employs the fact that $G_a^K(\epsilon; n, k) = -2\pi i \delta(\epsilon - \mu_a - v_{Fn} k) F_a(\epsilon)$, as well as that $G_a^R - G_a^A = -2\pi i \delta(\epsilon - \mu_a - v_{Fn} k)$. Performing the summations with the help of delta-functions, one finds $\sum_{kk'} \text{Tr} \left\{ \hat{G}_a \hat{\gamma}^q \hat{G}_b \hat{\gamma}^q \right\} = v_{Fn}^{-2} (1 - F_a F_b)$. Finally, the expression for the noise power $\mathcal{S}(\omega, V)$ reads as [260]

$$\mathcal{S} = \frac{e^2}{2\pi\hbar} \sum_n \int d\epsilon \left[|\mathbf{t}_n|^4 (B_{LL}(\epsilon) + B_{RR}(\epsilon)) + |\mathbf{t}_n|^2 |\mathbf{r}_n|^2 (B_{LR}(\epsilon) + B_{RL}(\epsilon)) \right] \quad (13.15)$$

where the statistical factors are $B_{ab}(\epsilon) = [1 - F_a(\epsilon_+) F_b(\epsilon_-)]/2$ and we again restored $\hbar$ at the end. Despite the complicated appearance, the energy integration in Eq. (13.15) can be performed in the closed form ²

$$\begin{aligned} \mathcal{S}(\omega, V) = \frac{e^2}{2\pi\hbar} \sum_n \left[2|\mathbf{t}_n|^4 \omega \coth\left(\frac{\omega}{2T}\right) + |\mathbf{t}_n|^2 |\mathbf{r}_n|^2 (eV + \omega) \coth\left(\frac{eV + \omega}{2T}\right) \right. \\ \left. + |\mathbf{t}_n|^2 |\mathbf{r}_n|^2 (eV - \omega) \coth\left(\frac{eV - \omega}{2T}\right) \right] \end{aligned} \quad (13.16)$$

There are two limiting cases, which can be deduced from Eq. (13.16). The first one corresponds to equilibrium current fluctuations, $V \rightarrow 0$. In this case

$$\mathcal{S}(\omega, 0) = \frac{e^2}{2\pi\hbar} \sum_n \left[2|\mathbf{t}_n|^4 + 2|\mathbf{t}_n|^2 |\mathbf{r}_n|^2 \right] \omega \coth\left(\frac{\omega}{2T}\right) = 2g\omega \coth\left(\frac{\omega}{2T}\right), \quad (13.17)$$

where we used Eq. (13.10) for the linear conductance g and $|\mathbf{t}_n|^2 + |\mathbf{r}_n|^2 = 1$. This result is nothing but the familiar Johnson-Nyquist fluctuation-dissipation relation for the current fluctuations. Note that, despite the complicated dependence on the transmission probabilities in Eq. (13.15), the equilibrium noise power (13.17) is written only in terms of the linear conductance (13.10).

The other limiting case is fully non-equilibrium noise at zero temperature $T \rightarrow 0$ and a finite bias V . For such a case one finds from Eq. (13.16) the Lesovik [260] formula for the excess part of the noise:

$$\mathcal{S}(\omega, V) - \mathcal{S}(\omega, 0) = \frac{e^2}{2\pi\hbar} (|eV + \omega| + |eV - \omega| - 2|\omega|) \sum_n |\mathbf{t}_n|^2 |\mathbf{r}_n|^2 \quad (13.18)$$

which is called the shot noise. In particular, the low-frequency (compared to the applied voltage) part of the shot noise acquires the form

$$\mathcal{S}(0, V) - \mathcal{S}(0, 0) = \frac{e^2}{2\pi\hbar} |2eV| \sum_n |\mathbf{t}_n|^2 (1 - |\mathbf{t}_n|^2) \quad (13.19)$$

An important observation is that, in contrast to the equilibrium noise (13.17), the shot noise cannot be written solely in terms of the conductance g . It can, only for the case of a tunnel junction, where all transmissions are small, $|\mathbf{t}_n|^2 \ll 1$. Equation (13.19) reduces to $\mathcal{S}(0, V) - \mathcal{S}(0, 0) = 2eVg = 2e\langle I \rangle$, which is known as the Schottky formula (for reviews of shot noise in various systems see [261, 262, 263]).

13.1.3 13.3 Counting Statistics

We now develop an alternative treatment of quantum transport, which will allow us to access not only the first and second moments of the current, but the full statistics of its fluctuations. Most of the results discussed here were first derived by Levitov and colleagues [264, 267], while the method we adopt was pioneered by Nazarov and colleagues [268]; see also [269]. We restrict ourselves to the single channel, since generalization to the (two-lead) multichannel case is rather straightforward (the multi-lead setup requires somewhat more work [268]).

Instead of using the wavefunctions (13.1), we shall model a quantum scatterer setup with two incoming and two outgoing fermionic modes. The corresponding annihilation operators are denoted by $\hat{\psi}_L(x)$ and $\hat{\psi}_R(x)$ for incoming modes and $\hat{\chi}_L(x)$ and $\hat{\chi}_R(x)$ for outgoing ones (there are also four corresponding creation operators $\hat{\psi}_{L(R)}^\dagger(x)$ and $\hat{\chi}_{L(R)}^\dagger(x)$). The left (right) modes $\hat{\psi}_{L(R)}(x)$ and $\hat{\chi}_{L(R)}(x)$ occupy the left (right) lead, that is, $-\infty < x < 0$ ($0 < x < \infty$). The quantum scatterer is represented by its δ -scattering matrix, which serves as the boundary condition at $x = 0$, connecting the incoming and outgoing modes (Fig. 13.2),

$$\hat{\chi}(0) = \mathcal{S}\hat{\psi}(0); \quad \hat{\chi}^\dagger(0) = \hat{\psi}^\dagger(0)\delta^\dagger; \quad \mathcal{S} = \begin{pmatrix} \mathbf{r} & \mathbf{t} \\ \mathbf{t} & \mathbf{r} \end{pmatrix}, \quad (13.20)$$

where we introduced two-component vectors of incoming $\hat{\psi}$ and outgoing $\hat{\chi}$ modes. The corresponding Keldysh action acquires the form

$$S = i \int_c dt \left\{ \int_{-\infty}^0 dx [\bar{\psi}_L (\partial_t - v_F \partial_x) \psi_L + \bar{\chi}_L (\partial_t + v_F \partial_x) \chi_L] + \int_0^\infty dx [\bar{\psi}_R (\partial_t + v_F \partial_x) \psi_R + \bar{\chi}_R (\partial_t - v_F \partial_x) \chi_R] \right\} \quad (13.21)$$

where we have linearized the fermionic dispersion relation near the Fermi energy as $\xi_k = \epsilon_k - \epsilon_F \approx \pm v_F k \rightarrow \mp i v_F \partial_x$. The boundary conditions (13.20) are imposed by introducing the delta-function $\delta(\chi(0, t) - \delta\psi(0, t))$ and another one for the bar fields into the functional integral over the $\psi(x, t)$ and $\chi(x, t)$ Grassmann fields.

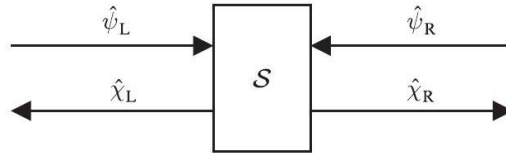


Figure 13.2 Scattering setup: two incoming modes $\hat{\psi}_{L(R)}(x)$ and two outgoing modes $\hat{\chi}_{L(R)}(x)$ are coupled through the scattering matrix $\hat{\chi}(0) = \mathcal{S}\hat{\psi}(0)$.

The quantity of interest is the transmitted charge, which is defined as the time integral of the current. The latter is convenient to represent as the half sum of the currents immediately to the left and right of the scatterer:

⁰² One employs that the two leads are in equilibrium, i.e. $F_a(\epsilon) = \tanh[(\epsilon - \mu_a)/2T]$ and uses the integral $\int_{-\infty}^{+\infty} dx [1 - \tanh(x+y)\tanh(x-y)] = 4y \coth(2y)$.

$$J(t) = \frac{1}{2} [\bar{\psi}_L v_F \psi_L - \bar{\chi}_L v_F \chi_L - \bar{\psi}_R v_F \psi_R + \bar{\chi}_R v_F \chi_R] \quad (13.22)$$

where all the fields are taken at $x = 0$. To generate the statistics of the current, one couples it to the auxiliary vector potential $\eta(t)/2$, defined along the contour, and evaluates the generating function

$$Z[\eta] = \left\langle e^{\frac{i}{2} \int_C \eta(t) J(t)} \right\rangle, \quad (13.23)$$

where the angular brackets denote averaging with the weight e^{iS} , Eq. (13.21), and imposed boundary conditions (13.20). To generate the observable, the auxiliary field should be chosen purely quantum, that is, changing sign between forward and backward branches (cf. Eq. (10.43)). Moreover, since we are interested in the statistics of charge transmitted during a long time interval $0 < t < t_0$, one may put it to be a constant $\eta(t) = \pm \eta \theta(t) \theta(t_0 - t)$, where the plus (minus) sign refers to the forward (backward) branch. One then notices that the exponent in Eq. (13.23) contains $iS \pm (i\eta/2) \int_0^{t_0} dt J(t)$ and therefore η may be eliminated from the exponent by the following gauge transformation of the Grassmann fields:

$$e^{\mp i \frac{\eta}{4} \theta(-x)} \psi_L^\pm \rightarrow \psi_L^\pm; \quad e^{\pm i \frac{\eta}{4} \theta(x)} \psi_R^\pm \rightarrow \psi_R^\pm$$

and the same for χ , where plus/minus signs, as always, refer to the two branches of the time contour. Then the source (counting) field η modifies the boundary conditions (13.20) as

$$\chi^\pm(0, t) = \mathcal{S}_{\pm\eta} \psi^\pm(0, t); \quad \mathcal{S}_{\pm\eta} = e^{\mp i \frac{\eta}{4} \hat{S}_3} \mathcal{S} e^{\pm i \frac{\eta}{4} \hat{S}_3} = \begin{pmatrix} \mathbf{r} & \mathbf{t} e^{\mp i \frac{\eta}{2}} \\ \mathbf{t} e^{\pm i \frac{\eta}{2}} & \mathbf{r} \end{pmatrix} \quad (13.24)$$

and similarly for the bar fields. Here $\hat{S}_3$ is the third Pauli matrix in L, R -space. As a result the transmission coefficients $\mathbf{t}$ acquire a counting phase η (see Section 2.9), which depends on the direction of the charge transfer.

We are now in the position to integrate out all the fields $\psi(x, t)$ except those residing next to the scatterer, namely $\psi_0(t) = \psi(0, t)$. This is achieved with the help of the following identity:
3

$$\int \mathbf{D}[\bar{\psi}, \psi] e^{i \int dt dx \bar{\psi} \check{G}^{-1} \psi} = e^{-\frac{1}{\pi v} \int dt dt' \bar{\psi}_0(t) \check{\Lambda}_\psi^{-1}(t-t') \psi_0(t')} \quad (13.25)$$

where $\check{G}^{-1} = \text{diag} \{ \hat{G}_L^{-1}, \hat{G}_R^{-1} \}$ is a 4×4 matrix with left (right) inverse Green functions $\hat{G}_{L(R)}^{-1} = \text{diag} \left\{ \left[G_{L(R)}^R \right]^{-1}, \left[G_{L(R)}^A \right]^{-1} \right\} = i\partial_t \mp iv_F \partial_x$ being 2×2 matrices in Keldysh space, Eq. (10.36). The Gaussian correlator of the local fields $\psi_0(t)$ is given by ⁴

$$\pi v \check{\Lambda}_\psi(t-t') = i \check{G}(0, t-t') = i \sum_k \check{G}(k, t-t') = \pi v \begin{pmatrix} \hat{\delta}(t-t') & 2\hat{F}_\psi(t-t') \\ 0 & -\hat{\delta}(t-t') \end{pmatrix}, \quad (13.26)$$

where $v = (2\pi v_F)^{-1}$ is the density of states of incoming fermions and the Fourier transform of the distribution matrix is $\hat{F}_\psi(\epsilon) = \text{diag} \{ F_L(\epsilon), F_R(\epsilon) \}$ and $F_{L(R)} = 1 - 2n_{L(R)}$. Here $n_{L(R)}(\epsilon)$ is the occupation number in the left (right) lead, sending the electrons toward the scatterer. Notice that $\check{\Lambda}^2 = 1$, that is,

$$\check{\Lambda} \circ \check{\Lambda} = \int dt'' \check{\Lambda}(t-t'') \check{\Lambda}(t''-t') = \check{\delta}(t-t')$$

for an arbitrary distribution matrix $\hat{F}_\psi$, and therefore $\check{\Lambda}^{-1} = \check{\Lambda}$. The integration over the outgoing fields, except for the local ones $\chi_0(t) = \chi(0, t)$, is performed in a way completely

analogous to Eq. (13.25) with the only difference that $\hat{F}_\psi \rightarrow \hat{F}_\chi$. The outgoing modes are assumed to be perfectly coupled to massive leads, which ideally absorb all particles transmitted or reflected by the scatterer. To model this situation, one assumes that the outgoing modes are empty of the particles (i.e. do not Pauli block any of the scattered particles) and thus $\hat{F}_\chi(\epsilon) = \hat{1} - 2\hat{n}_\chi(\epsilon) = \hat{1}$.

³ An "operational" way to derive this relation is to introduce resolution of unity in the form

$$1 = \int \mathbf{D}[\psi_0] \delta(\psi_0(t) - \psi(0, t)) = \int \mathbf{D}[\bar{\xi}, \psi_0] e^{-\int dt \bar{\xi}(t)(\psi_0(t) - \psi(0, t))}$$

and similarly for $\bar{\psi}_0$. The last term in the exponent may be written as $\int dt dx \bar{\xi}(t) \delta(x) \psi(x, t)$. Integration over the fields $\psi(x, t)$ may then be carried out according to Eq. (10.11). This leads to $i \int dt dt' \bar{\xi}(t) \check{G}(0, t - t') \xi(t')$, which serves as the Gaussian weight for the ξ -integral. Taking into account $\int dt \bar{\xi} \psi_0$ along with its conjugate and performing Gaussian integration, Eq. (10.11), over $\bar{\xi}$ and ξ , one obtains Eq. (13.25).

⁴ We have used the standard definition of the $\hat{F}$ -function as $\hat{G}^K = \hat{G}^R \circ \hat{F}_\psi - \hat{F}_\psi \circ \hat{G}^A$ and

$$\sum_k G^{R(A)}(k, \epsilon) = \int \frac{dk}{2\pi} \frac{1}{\epsilon - v_F k \pm i0} = \mp \frac{i\pi}{2\pi v_F} \xrightarrow{\text{FT}} \mp i\pi \nu \delta(t - t')$$

As a result one finds for the generating function (13.23)

$$Z[\eta] = \int \mathbf{D}[\bar{\psi}_0, \psi_0, \bar{\chi}_0, \chi_0] e^{\frac{-1}{\pi\nu} \int dt dt' [\bar{\psi}_0 \check{\Lambda}_\psi^{-1} \psi_0 + \bar{\chi}_0 \check{\Lambda}_\chi^{-1} \chi_0]} \delta(\chi_0 - \check{\mathcal{S}} \psi_0) \delta(\bar{\chi}_0 - \bar{\psi}_0 \check{\mathcal{S}}^\dagger) \quad (13.27)$$

where the integration measure is normalized in a way to keep $Z[0] = 1$. Here $\psi_0(t)$ and $\chi_0(t)$ are four-component vectors on the left (right) along with the Keldysh spaces. The corresponding 4×4 scattering matrix $\mathcal{S}$ is built from 2×2 blocks (13.24), and after Keldysh rotation (10.23), (10.24) it acquires the following structure in Keldysh space (K):

$$\check{\mathcal{S}}(\eta) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \mathcal{S}_\eta + \mathcal{S}_{-\eta} & \mathcal{S}_\eta - \mathcal{S}_{-\eta} \\ \mathcal{S}_\eta - \mathcal{S}_{-\eta} & \mathcal{S}_\eta + \mathcal{S}_{-\eta} \end{pmatrix}_K. \quad (13.28)$$

One performs now the integration over $\bar{\chi}_0, \chi_0$ in Eq. (13.27) with the help of deltafunctions and remaining Grassmann Gaussian integration over $\bar{\psi}_0, \psi_0$ with the help of Eq. (10.11) and finds

$$Z[\eta] = \det[\check{\Lambda}_\psi + \check{\delta}^\dagger(\eta) \check{\Lambda}_\chi \check{\delta}(\eta)] / \det[\check{\Lambda}_\psi + \check{\delta}^\dagger(0) \check{\Lambda}_\chi \check{\delta}(0)], \quad (13.29)$$

where we used $\check{\Lambda}^{-1} = \check{\Lambda}$ and the explicitly enforced normalization identity $Z[0] = 1$. The determinants here are to be understood over the 4×4 (Keldysh $\times$ left-right) space along with the energy (or time) spaces. Employing $\check{\Lambda}_\psi = \begin{pmatrix} 1 & 2\hat{F}_\psi \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ and $\check{\Lambda}_\chi = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$, unitarity of the scattering matrices $\mathcal{S}_\eta^\dagger \mathcal{S}_\eta = 1$ along with Eq. (13.28), one obtains ⁵ the Levitov [264] formula for the full counting statistics:

$$Z[\eta] = \det \left[1 + \begin{pmatrix} \hat{F}_\psi & \hat{F}_\psi \\ -1 & -1 \end{pmatrix} \frac{1}{2} (1 - \mathcal{S}_{-\eta}^\dagger \mathcal{S}_\eta) \right] = \det [1 - \hat{n}_F (1 - \mathcal{S}_{-\eta}^\dagger \mathcal{S}_\eta)] \quad (13.30)$$

where $\hat{n}_F = (1 - \hat{F}_\psi)/2 = \text{diag}\{n_L, n_R\}$ and the last determinant is done over 2×2 left-right $\times$ energy spaces. We employ now the explicit form of the scattering matrix (13.24) along with the unitarity condition $\mathbf{r}^\dagger \mathbf{t} + \mathbf{t}^\dagger \mathbf{r} = 0$ to evaluate the 2×2 determinant. The remaining

expression is diagonal in energy space and therefore its determinant is given by the product over all energies:

$$Z[\eta] = \prod_{\epsilon} [1 + n_L (1 - n_R) (e^{i\eta} - 1) |\mathbf{t}|^2 + n_R (1 - n_L) (e^{-i\eta} - 1) |\mathbf{t}|^2]. \quad (13.31)$$

The charge $q = \int_0^{t_0} dt J(t)$ is accumulated over the long time t_0 , which dictates the extent of the time contour $\mathcal{C}$. As a result, the energy is quantized in units of $2\pi/t_0$, making the preceding product well-defined.

Consider the case of zero temperature, where the expression in the square brackets on the right-hand side of Eq. (13.31) is different from unity only for $\mu_R < \epsilon < \mu_L$, where $\mu_L - \mu_R = eV$ is the voltage applied between the left and right leads. There are thus $N_0 = eVt_0/(2\pi\hbar)$ discrete energy values, which bring nontrivial factors to the generating function. The generating function is thus (cf. Eq. (2.71)),

$$Z[\eta] = [1 + (e^{i\eta} - 1) |\mathbf{t}|^2]^{N_0} = [|\mathbf{r}|^2 + e^{i\eta} |\mathbf{t}|^2]^{N_0} = \sum_{k=0}^{N_0} \binom{N_0}{k} |\mathbf{r}|^{2(N_0-k)} |\mathbf{t}|^{2k} e^{ik\eta}. \quad (13.32)$$

According to the definition (13.23), $\partial_k Z[\eta] / \partial \eta^k|_{\eta=0} = (i/e)^k \langle q^k \rangle$ provides cumulants of the charge, transmitted during the time interval t_0 . Therefore

$$Z[\eta] = \int dq e^{iq\eta/e} \mathcal{P}(q) \quad (13.33)$$

where $\mathcal{P}(q)$ is the transmitted charge probability distribution function. Performing the inverse Fourier transform of Eq. (13.32), one finds for the probability of transmitting charge q during the time interval t_0 , upon an applied voltage V [264, 267],

$$\mathcal{P}(q) = \sum_{k=0}^{N_0} \delta(q - ek) \binom{N_0}{k} |\mathbf{r}|^{2(N_0-k)} |\mathbf{t}|^{2k} \quad (13.34)$$

The charge is integer valued, and its distribution is binomial. The latter describes $N_0 = eVt_0/(2\pi\hbar)$ attempts, each one "succeeds" with the probability $|\mathbf{t}|^2$ and "fails" with the probability $1 - |\mathbf{t}|^2 = |\mathbf{r}|^2$. The average transmitted charge is given by the success rate times the number of attempts:

$$\langle q \rangle = e |\mathbf{t}|^2 N_0 = \frac{e^2}{2\pi\hbar} |\mathbf{t}|^2 V t_0 = (gV) t_0$$

where the linear conductance g is given by the Landauer formula (13.10). As expected, the average charge is given by the average current $\langle J \rangle = gV$ times the observation time t_0 . The second cumulant of the binomial distribution is given by the product of the success and failure rates times the number of attempts:

$$\langle \langle q^2 \rangle \rangle = e^2 |\mathbf{t}|^2 |\mathbf{r}|^2 N_0 = \frac{e^2}{2\pi\hbar} |\mathbf{t}|^2 (1 - |\mathbf{t}|^2) eV t_0,$$

⁰⁵ Denoting $\hat{C} = (1 - \mathcal{S}_{-\eta}^\dagger \mathcal{S}_\eta) / 2$, one finds by first subtracting columns and then adding lines

$$\det \begin{pmatrix} 1 + \hat{F}_\psi \hat{C} & \hat{F}_\psi \hat{C} \\ -\hat{C} & 1 - \hat{C} \end{pmatrix} = \det \begin{pmatrix} 1 + \hat{F}_\psi \hat{C} & 1 \\ -\hat{C} & -1 \end{pmatrix} = \det \begin{pmatrix} 1 + \hat{F}_\psi \hat{C} - \hat{C} & 0 \\ -\hat{C} & -1 \end{pmatrix} = \det (1 - (1 - \hat{F}_\psi) \hat{C}).$$

in agreement with the Lesovik formula (13.19).⁶ The higher cumulants of the transmitted charge at $T = 0$ are given by the coefficients of the Taylor expansion of the logarithm of the generating function:

$$\ln Z[\eta, |\mathbf{t}|^2] = \frac{eVt_0}{2\pi} \ln [1 + (e^{i\eta} - 1) |\mathbf{t}|^2] \quad (13.35)$$

in powers of η . An alternative derivation of these results, valid for a multichannel system with disordered metallic leads, is given in Section 15.5.

13.1.4 13.4 Fluctuation Relation

If both leads are in thermal equilibrium at the same temperature T , one may notice a simple algebraic relation between their occupation numbers:

$$n_L(\epsilon) (1 - n_R(\epsilon)) = e^{eV/T} n_R(\epsilon) (1 - n_L(\epsilon)), \quad (13.36)$$

valid for each energy ϵ . With its help one observes that Eq. (13.31) admits the following symmetry:

$$Z\left[-\eta + \frac{ieV}{T}, V\right] = Z[\eta, V]. \quad (13.37)$$

Tobiska and Nazarov [270] argued that this relation is not restricted to the simple model, but holds as long as the underlying Hamiltonian possesses time-reversal symmetry. In particular they checked that it remains valid in the presence of interactions. (In the latter case the relation holds only after the product of all energies is taken, not for each energy separately, as is the case in the noninteracting case considered here.)

Putting $\eta = 0$ and employing the normalization identity $Z[0, V] = 1$, one obtains $Z[ieV/T, V] = 1$. Employing Eq. (13.33), one finds

$$\int dq e^{-qV/T} \mathcal{P}(q) = \langle e^{-W/T} \rangle = 1 \quad (13.38)$$

where $W = qV = \int dt IV$ is the work done by a battery to transfer a charge q across the scatterer. This relation is the quantum transport analog of the Jarzynski relation (4.72). The only way it may be compatible with the normalization $\int dq \mathcal{P}(q) = 1$ is if negative charges (i.e. transferred against the applied voltage) contribute to the integral. This may seem to be in contradiction to Levitov's binomial distribution (13.34), where only positive (and zero) charges have nonzero probability. The latter statement is strictly valid, though, only at $T = 0$, while at $T > 0$ there is a finite,

but exponentially small, probability of transferring the opposite charge. Indeed, combining Eqs. (13.37) and (13.33), one finds

$$\mathcal{P}(-q) = \mathcal{P}(q) e^{-Vq/T} \quad (13.39)$$

One notices thus that the dominant contribution to the integral in Eq. (13.38) comes from $q \approx -\langle q \rangle$, that is, rare events with the relative probability $\propto e^{-\langle q \rangle V/T}$. This indicates that the fluctuation relation (13.37) is most useful in the limit $V \rightarrow 0$, where it deals with the typical, rather than the exponentially rare events.

To take advantage of it [270], we take the full derivative with respect to voltage of the logarithm of Eq. (13.37) and put $V = 0$. This way, one finds

⁶ The factor of two differences is due to the fact that the noise power (13.11) is defined as the symmetric combination of the current variances and therefore $\langle \langle q^2 \rangle \rangle = \frac{1}{2} \mathcal{S}(0, V) t_0$.

$$\left. \frac{\partial}{\partial V} (\ln Z[\eta] - \ln Z[-\eta]) \right|_{V=0} = -\frac{ie}{T} \frac{\partial}{\partial \eta} \ln Z[\eta] \quad (13.40)$$

where we took into account that $Z[-\eta, 0] = Z[\eta, 0]$. By expanding the left- and right-hand sides of this relation in power series in η and employing the fact that $\ln Z[\eta] = \sum_l \langle \langle q^l \rangle \rangle (i\eta/e)^l / l!$ is the generating function of the charge cumulants, one finds

$$\langle \langle q^{2l} \rangle \rangle = 2T \frac{\partial}{\partial V} \langle \langle q^{2l-1} \rangle \rangle \Big|_{V=0}, \quad (13.41)$$

$l = 1, 2, \dots$. The $l = 1$ relation of this series, $\langle \langle q^2 \rangle \rangle = 2T \partial \langle q \rangle / \partial V$, is nothing but the FDT Johnson-Nyquist noise (i.e. $\omega \ll T$ limit of Eq. (13.17)). Taking the second derivative of the logarithm of Eq. (13.37) with respect to voltage, putting $V = 0$, and employing Eq. (13.40), one finds

$$\left. \frac{\partial^2}{\partial V^2} (\ln Z[\eta] - \ln Z[-\eta]) \right|_{V=0} = \frac{ie}{T} \frac{\partial^2}{\partial \eta \partial V} (\ln Z[\eta] + \ln Z[-\eta]) \Big|_{V=0}. \quad (13.42)$$

Expanding over η brings another series of exact relations:

$$\left. \frac{\partial}{\partial V} \langle \langle q^{2l} \rangle \rangle \right|_{V=0} = -T \frac{\partial^2}{\partial V^2} \langle \langle q^{2l-1} \rangle \rangle \Big|_{V=0}. \quad (13.43)$$

The $l = 1$ member of this family, $-T^{-1} \partial \langle \langle q^2 \rangle \rangle / \partial V = \partial^2 \langle q \rangle / \partial V^2$, describes the photo-voltaic, that is, rectification, effect. Its right-hand side is the second-order dc current response to a low-frequency, $\omega \ll T$, ac voltage. The left-hand side relates it to the linear sensitivity of the low-frequency noise to the small dc voltage, $eV \ll T$. In terms of the rectified dc current and the noise power, it takes the form

$$J_{\text{dc}} = -\frac{1}{2T} \frac{\partial \mathcal{S}(\omega, V)}{\partial V} \Big|_{V=0} |\delta V_\omega|^2 \quad (13.44)$$

where δV_ω is a small ac voltage applied across the quantum scatterer.

13.1.5 13.5 Adiabatic Pumping

We turn now to the situation where the current is generated by a periodic modulation of the quantum scatterer, rather than by the applied bias voltage. In particular we focus on a slow adiabatic modulation, when the rate of change is smaller than any other relevant energy scale. Such a process is called adiabatic pumping. To proceed we need to acknowledge that the scattering matrix $\mathcal{S}(\epsilon)$, used earlier, may actually be a function of the energy ϵ of the incoming particles. In the time representation it translates into $\mathcal{S}(t - t')$, allowing for a certain time delay between incoming and outgoing modes, $\chi(t) = \int^t dt' \mathcal{S}(t - t') \psi(t')$. If the quantum scatterer is externally modulated, its scattering matrix loses time translational invariance and acquires the form $\mathcal{S}(t, t')$. Its Wigner transform $\mathcal{S}(t, \epsilon)$ is referred to as the time- and energy-dependent δ -matrix. The unitarity condition holds, but takes the form of the convolution $1 = \mathcal{S}^\dagger \circ \mathcal{S} = \int dt'' \mathcal{S}^\dagger(t, t'') \mathcal{S}(t'', t') = \delta(t - t')$.

Multiplying the matrix under the determinant in Eq. (13.30) by δ_η from the left and by $\mathcal{S}_\eta^\dagger$ from the right, one finds for the generating function

$$\ln Z[\eta] = \text{Tr} \ln \left[1 - \mathcal{S}_\eta \hat{n}_F \mathcal{S}_\eta^\dagger + \mathcal{S}_\eta \hat{n}_F \mathcal{S}_{-\eta}^\dagger \right] \quad (13.45)$$

where $\hat{n}_F = \hat{n}_F(t - t')$ is the Fourier transform of $\hat{n}_F(\epsilon) = \text{diag} \{n_L(\epsilon), n_R(\epsilon)\}$. The trace is to be understood in the 2×2 left/right space as well as in the time-space. The average pumped

charge is $\langle q \rangle = -ie \partial \ln Z[\eta] / \partial \eta|_{\eta=0}$. We thus expand the expression on the right-hand side of Eq. (13.45) to linear order in η . To this end we notice that $\mathcal{S}_\eta \approx \mathcal{S} + i\eta [\mathcal{S}, \hat{\zeta}_3] / 4$ and thus

$$\langle q \rangle = -\frac{e}{2} \text{Tr} \left\{ \delta \hat{n}_F [\mathcal{S}^\dagger, \hat{\zeta}_3] \right\}. \quad (13.46)$$

If $\mathcal{S}(t, \epsilon) = \mathcal{S}(\epsilon)$ is static, but $n_L(\epsilon) \neq n_R(\epsilon)$, we return to the Landauer formula (13.9): $\langle q \rangle = e \int (dt d\epsilon) / (2\pi) |\mathbf{t}(\epsilon)|^2 [n_L(\epsilon) - n_R(\epsilon)]$. We now examine the opposite case of the time-dependent scattering matrix $\mathcal{S}(t, \epsilon)$ with no external bias, that is, $n_L(\epsilon) = n_R(\epsilon) = n_F(\epsilon)$. To evaluate the trace in Eq. (13.46) we employ the Wigner transform, which is justified because of the adiabatic nature of the time dependence. This way we find for the Wigner transform of the product (cf. Eq. (6.42))

$$\delta \hat{n}_F \mathcal{S}^\dagger \xrightarrow{\text{WT}} \delta \hat{n}_F \mathcal{S}^\dagger + \frac{i}{2} (\delta \partial_\epsilon \hat{n}_F \partial_t \mathcal{S}^\dagger - \partial_t \delta \partial_\epsilon \hat{n}_F \mathcal{S}^\dagger)$$

where we took into account that $\partial_\epsilon \delta \hat{n}_F \partial_t \mathcal{S}^\dagger - \partial_t \delta \hat{n}_F \partial_\epsilon \mathcal{S}^\dagger = 0$, due to the unitarity of the $\mathcal{S}$ -matrix and $\hat{n}_F = \hat{1} n_F$. If the ϵ -dependence of the $\mathcal{S}(t, \epsilon)$ -matrix is weak at the scale of temperature, one may use $\partial_\epsilon n_F \approx -\delta(\epsilon - \epsilon_F)$ and evaluate the energy integral in the trace using the delta-function. As a result one finds for the average pumped charge

$$\langle q \rangle = \frac{e}{4\pi i} \int dt \text{Tr} \left\{ \frac{\partial \mathcal{S}}{\partial t} [\mathcal{S}^\dagger, \hat{\zeta}_3] \right\}, \quad (13.47)$$

where $\mathcal{S} = \mathcal{S}(t, \epsilon_F)$. This is the Brouwer formula [271] for the average adiabatically pumped charge.

In principle Eq. (13.45) provides access not only to the average charge pumped per period, but also to its full counting statistics. In practice, however, calculations of the corresponding determinant require some care associated with the presence of the chiral anomaly [264, 269]. We restrict ourselves to the model case, where these subtleties do not play a role. In this example the tunneling barrier harmonically oscillates between the full and zero transparency. Its unitary time-dependent scattering matrix is specified by

$$\mathbf{t}(t) = \cos(\Omega t); \quad \mathbf{r}(t) = i \sin(\Omega t)$$

One can easily check with the help of the Brouwer formula that the average pumped charge is zero (which is obvious, given the presence of reflection symmetry at all times). Our aim, though, is to discuss fluctuations around the zero pumped charge. To this end it is convenient to evaluate

$$\begin{aligned} |Z[\eta]|^2 &= \det \left[(1 - \hat{n}_F + \hat{n}_F \mathcal{S}_{-\eta}^\dagger \mathcal{S}_\eta) (1 - \hat{n}_F + \mathcal{S}_\eta^\dagger \mathcal{S}_{-\eta} \hat{n}_F) \right] \\ &= \det \left[1 + \hat{n}_F \mathcal{S}_{-\eta}^\dagger \mathcal{S}_\eta (1 - \hat{n}_F) + (1 - \hat{n}_F) \mathcal{S}_\eta^\dagger \mathcal{S}_{-\eta} \hat{n}_F \right] \end{aligned} \quad (13.48)$$

where we took into account that in the energy representation at zero temperature $n_F^2(\epsilon) = n_F(\epsilon) = \theta(-\epsilon + \mu)$. The product of the gauged transformed $\mathcal{S}$ -matrices (13.24) is given by

$$\mathcal{S}_\eta^\dagger \mathcal{S}_{-\eta} = \begin{pmatrix} \frac{e^{-i\eta} + 1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{e^{i\eta} + 1}{2} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \frac{e^{-i\eta} - 1}{4} & \frac{\sin \eta / 2}{2i} \\ \frac{i \sin \eta / 2}{2} & \frac{e^{i\eta} - 1}{4} \end{pmatrix} e^{2i\Omega t} + \begin{pmatrix} \frac{e^{-i\eta} - 1}{4} & \frac{i \sin \eta / 2}{2} \\ \frac{\sin \eta / 2}{2i} & \frac{e^{i\eta} - 1}{4} \end{pmatrix} e^{-2i\Omega t}.$$

To go to the energy representation we choose the duration of the time contour to be exactly one period of the quantum scatterer oscillation, that is, $2\pi/\Omega$, and therefore the fermionic energy is quantized as $\epsilon_m - \mu = \Omega(m + 1/2)$, where m is an integer. As a result, we

find a matrix in the energy representation $(\mathcal{S}_\eta^\dagger \mathcal{S}_{-\eta})_{m,l} = \hat{A}(\eta)\delta_{m,l} + \hat{B}(\eta)\delta_{m,l+2} + \hat{C}(\eta)\delta_{m,l-2}$, where the 2×2 matrices $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}$ are given by the previous equation. One thus finds for, for example, the last term on the right-hand side of Eq. (13.48), $\theta(\epsilon_m)(\mathcal{S}_\eta^\dagger \mathcal{S}_{-\eta})_{m,l}\theta(-\epsilon_l) = \hat{B}(\eta)(\delta_{m,1}\delta_{l,-1} + \delta_{m,0}\delta_{l,-2})$. Similarly, the middle term in Eq. (13.48) is given by $\theta(-\epsilon_m)(\mathcal{S}_{-\eta}^\dagger \mathcal{S}_\eta)_{m,l}\theta(\epsilon_l) = \hat{C}(-\eta)(\delta_{m,-2}\delta_{l,0} + \delta_{m,-1}\delta_{l,1})$. Therefore, the energy matrix under the determinant in Eq. (13.48) has only four nontrivial components in the energy space $m, l = -2, 1, 0, 1$. Evaluation of the determinant of such a 4×4 matrix is straightforward, leading to

$$|Z[\eta]|^2 = \det[1 - \hat{B}(\eta)\hat{C}(-\eta)]^2$$

where the remaining determinant is over the 2×2 left-right space. One thus finds for the single period pumped charge generating function

$$Z[\eta] = \det[1 - \hat{B}(\eta)\hat{C}(-\eta)] = \frac{1}{2}(1 + \cos \eta) = \frac{1}{2} + \frac{e^{i\eta}}{4} + \frac{e^{-i\eta}}{4} \quad (13.49)$$

Its Fourier transform (13.33) is the probability distribution function of the charge, which is thus $\mathcal{P}(q) = \frac{1}{2}\delta(q) + \frac{1}{4}[\delta(q-e) + \delta(q+e)]$. We found that with a probability of one-half no charge is transferred during one period of oscillation, and with an equal probability of one-quarter a single electron is moved to the right or to the left. Such an adiabatic pump is thus a "half ideal" coin tosser. Choosing the duration of the time contour to be $2\pi N_0/\Omega$, where N_0 is an integer, changes the quantization condition for the energy. Repeating the calculations, one finds that the generating function for N_0 pumping periods is $Z_{N_0}[\eta] = (Z[\eta])^{N_0}$. This means that each period is an independent try of the "coin toss" with the three possible outcomes. One finds thus for the mean square pumped charge after N_0 cycles: $\langle q_{N_0}^2 \rangle = eN_0/2$.

13.1.6 13.6 Spin Torque

Consider a small mono-domain metallic ferromagnet with total spin $\mathbf{S}(t)$, which may precess in an external magnetic field $\mathbf{H}$, Eq. (11.37). We'll refer to it as a "free" layer. The free layer is assumed to be coupled through a tunnel junction to a big ferromagnet with a fixed magnetization; see Fig. 13.3. Furthermore, we assume that a voltage V is applied across the tunnel junction. It drives the current of electrons preferentially polarized in the direction of the fixed layer polarization into the free layer. Upon entering the free layer the polarized electrons find themselves under the influence of the exchange field $J\mathbf{S}$, where J is a ferromagnetic exchange constant in the free layer. It leads to spin-flip processes, which tend to equilibrate the incoming electrons' spin with the magnetization direction of the free layer. This process has

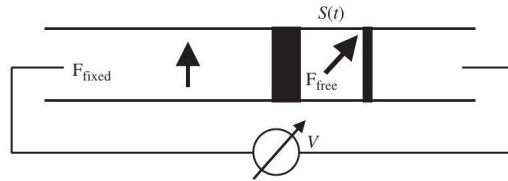


Figure 13.3 A free ferromagnet with spin $\mathbf{S}(t)$ is coupled to a fixed ferromagnet with spin along the z -direction through a tunneling barrier (shaded region).

a back-reaction: the angular momentum of the tunneled electrons is transferred to the free layer and rotates its spin $\mathbf{S}$. Therefore, the spin-polarized current exerts torque on the magnetic moment (which is opposite to the spin) of the free layer. The effect was discussed first by Slonczewski and Berger [220, 221] and is known as the spin torque.

Our goal is to modify the Landau-Lifshitz equation (11.37) to account for this effect. To this end we describe the electrons in the fixed and free layers by the creation and annihilation

operators $\hat{c}_{k\sigma}^\dagger, \hat{c}_{k\sigma}$ and $\hat{d}_{l\sigma'}^\dagger, \hat{d}_{l\sigma'}$, respectively. It is convenient to choose different spin quantization axes in the fixed and free layers, taking them along the fixed magnetization and the instantaneous vector $\mathbf{S}(t)$, respectively. The Hamiltonian of the electronic subsystem takes the form

$$\hat{H} = \sum_{k,\sigma} \epsilon_{k\sigma} \hat{c}_{k\sigma}^\dagger \hat{c}_{k\sigma} + \sum_{l,\sigma'} \epsilon_{l\sigma'} \hat{d}_{l\sigma'}^\dagger \hat{d}_{l\sigma'} + \sum_{kl,\sigma\sigma'} \left[W_{kl}^{\sigma\sigma'} \hat{c}_{k\sigma}^\dagger \hat{d}_{l\sigma'} + \text{h.c.} \right] - 2J\hat{\mathbf{s}} \cdot \hat{\mathbf{S}}, \quad (13.50)$$

where h.c. stands for Hermitian conjugate and $\hat{\mathbf{s}} = \frac{1}{2} \sum_{ll',\sigma,\sigma'} \hat{d}_{l\sigma}^\dagger \vec{\mathbf{s}}_{\sigma\sigma'} \hat{d}_{l'\sigma'}$ is the spin of itinerant electrons in the free layer. The tunneling matrix elements are denoted by $W_{kl}^{\sigma\sigma'}$. We assume spin-conserved tunneling and thus the spin-dependence of the matrix elements originate solely from the different quantization conventions in the two layers. Indeed, an "up" electron from the fixed layer, after tunneling into the free layer, has a certain amplitude to be counted as "up" or "down." The latter depends on the mutual orientation of the two quantization axes. As a result,

$$W_{kl}^{\sigma\sigma'} = e^{-i\frac{\theta}{2}\hat{s}_y} e^{-i\frac{\phi}{2}\hat{s}_z} W_{kl} = \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\phi}{2}} \cos(\theta/2) & -e^{i\frac{\phi}{2}} \sin(\theta/2) \\ e^{-i\frac{\phi}{2}} \sin(\theta/2) & e^{i\frac{\phi}{2}} \cos(\theta/2) \end{pmatrix} W_{kl} \quad (13.51)$$

where (θ, ϕ) are polar angles of the free layer quantization axis $\mathbf{S}$ in the "laboratory" frame, where the fixed layer is polarized along the z -direction. The operator $e^{-i\theta\hat{s}_y/2} e^{-i\phi\hat{s}_z/2}$ rotates the d -spinor to the instantaneous reference frame of the free layer.

We also need a way to describe the dynamics of the large spin $\mathbf{S}$. A convenient way of doing it is to use Holstein-Primakoff parametrization [272] for the three components $\hat{S}_z; \hat{S}_\pm = \hat{S}_x \pm i\hat{S}_y$ of the spin S operator

$$\hat{S}_z = S - \hat{b}^\dagger \hat{b}; \quad \hat{S}_- = \hat{b}^\dagger \sqrt{2S - \hat{b}^\dagger \hat{b}}; \quad \hat{S}_+ = \sqrt{2S - \hat{b}^\dagger \hat{b}} \hat{b} \quad (13.52)$$

where $\hat{b}^\dagger, \hat{b}$ are the usual bosonic creation and annihilation operators. One can check that, given bosonic commutation relation $[\hat{b}, \hat{b}^\dagger] = 1$, the three components of $\hat{\mathbf{S}}$ satisfy the angular momentum algebra $[\hat{S}_\mu, \hat{S}_\nu] = i\epsilon_{\mu\nu\lambda} \hat{S}_\lambda$. Since we are interested in the semiclassical dynamics of the vector $\mathbf{S}(t)$, we only need to

follow small deviations of the large spin from its instantaneous direction. The latter is then adiabatically adjusted to accommodate such a deviation. This strategy allows us to restrict to second order in the Holstein-Primakoff bosonic operators, that is, $\hat{S}_- \approx \sqrt{2S} \hat{b}^\dagger$ and $\hat{S}_+ \approx \sqrt{2S} \hat{b}$. Employing further for the scalar product $\hat{\mathbf{s}} \cdot \hat{\mathbf{S}} = (\hat{s}_- \hat{S}_+ + \hat{s}_+ \hat{S}_-) / 2 + \hat{s}_z \hat{S}_z$, one writes the Hamiltonian (13.50) in the following form:

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \sum_{k,\sigma} \epsilon_{k\sigma} \hat{c}_{k\sigma}^\dagger \hat{c}_{k\sigma} + \sum_{l,\sigma'} (\epsilon_l - \sigma' JS) \hat{d}_{l\sigma'}^\dagger \hat{d}_{l\sigma'} + \sum_{kl,\sigma\sigma'} \left[W_{kl}^{\sigma\sigma'} \hat{c}_{k\sigma}^\dagger \hat{d}_{l\sigma'} + \text{h.c.} \right] \\ & - \left[\sqrt{2S} \hat{b} \left(J \sum_{l,\sigma} \hat{d}_{l\downarrow}^\dagger \hat{d}_{l\uparrow} - H_- \right) + \text{h.c.} \right] + \hat{b}^\dagger \hat{b} \left(J \sum_{l,\sigma} \sigma \hat{d}_{l\sigma}^\dagger \hat{d}_{l\sigma} - 2H_z \right), \end{aligned} \quad (13.53)$$

where H_z and $H_\pm = H_x \pm iH_y$ are components of an external Zeeman magnetic field.

We now write the action along the closed time contour in terms of the complex bosonic field $b(t)$ (along with the fermionic fields for $\hat{c}$ and $\hat{d}$ operators), go to their classical and quantum components, and perform the Gaussian integration over the fermionic fields. This way we obtain an effective action for the bosonic fields

$$S = \int dt \left\{ \left[\bar{b}^q (i\partial_t + 2H_z) b^{cl} - 2H_+ \sqrt{S} \bar{b}^q + \text{c.c.} \right] - i \text{Tr} \ln \left(\begin{array}{cc} \hat{G}_{(d)}^{-1} [b^{cl}, b^q] & \hat{W}^\dagger \\ \hat{W} & \hat{G}_{(c)}^{-1} \end{array} \right) \right\}, \quad (13.54)$$

where all elements of the matrix in the last term are matrices in the Keldysh and spin spaces, with $\hat{W}^{\sigma\sigma'}$ diagonal in the Keldysh space. The inverse Green function of the free layer is given by

$$\begin{aligned} \hat{G}_{(d)}^{-1} &= \hat{G}_{ll'}^{-1} + J\sqrt{S} [\hat{s}_- b^\alpha + \hat{s}_+ \bar{b}^\alpha] \hat{\gamma}^\alpha \\ &\quad - \frac{J\hat{s}_3}{2} [(\bar{b}^{cl} b^{cl} + \bar{b}^q b^q) \hat{\gamma}^{cl} + (\bar{b}^{cl} b^q + \bar{b}^q b^{cl}) \hat{\gamma}^q] \end{aligned} \quad (13.55)$$

where $\hat{G}_{l\sigma'}^{-1} = \hat{\gamma}^q (i\partial_t - \epsilon_l + \sigma' JS)$. As mentioned, we restrict ourselves to first and second orders in the bosonic operators. For simplicity we shall assume that the tunneling is weak and keep only second order in the tunneling matrix elements. We thus expand $\text{Tr} \ln [1 + \check{G} (\check{W} + \check{G}_{(d)}^{-1} - \check{G}_{l\sigma'}^{-1})]$ in Eq. (13.54) to first and second order in b^{cl} and b^q , keeping only terms of second order in $\hat{W}$. According to the fundamental normalization $S[b^{cl}, 0] = 0$, there can be no terms linear in b^{cl} . Terms linear in b^q are given by the diagram of Fig. 13.4(a), which leads to

$$\begin{aligned} S_1 &= \frac{J\sqrt{S}}{i} \text{Tr} \left\{ b^q \sum_{kl,\sigma} \bar{W}_{kl}^{\sigma\downarrow} \hat{G}_{k\sigma}^{(c)} W_{kl}^{\sigma\uparrow} \hat{G}_{l\uparrow} \hat{\gamma}^q \hat{G}_{l\downarrow} + \bar{b}^q \sum_{kl,\sigma} \bar{W}_{kl}^{\sigma\uparrow} \hat{G}_{k\sigma}^{(c)} W_{kl}^{\sigma\downarrow} \hat{G}_{l\downarrow} \hat{\gamma}^q \hat{G}_{l\uparrow} \right\} \\ &= \frac{J\sqrt{S}}{2i} \int dt \left[b^q \sin \theta e^{-i\phi} \sum_{kl} |W_{kl}|^2 \text{Tr} \left\{ \hat{G}_{k\downarrow}^{(c)} \hat{G}_{l\uparrow} \hat{\gamma}^q \hat{G}_{l\downarrow} - \hat{G}_{k\uparrow}^{(c)} \hat{G}_{l\downarrow} \hat{\gamma}^q \hat{G}_{l\uparrow} \right\} + \text{c.c.} \right] \end{aligned}$$

where we employed Eq. (13.51) for the tunneling matrix elements $W_{kl}^{\sigma\sigma'}$. The corresponding traces are given by

$$\begin{aligned} \text{Tr} \left\{ \hat{G}_{k\sigma}^{(c)} \hat{G}_{l\uparrow} \hat{\gamma}^q \hat{G}_{l\downarrow} \right\} &= \int \frac{d\epsilon}{2\pi} \left[G_{k\sigma}^{(c)R} G_{l\uparrow}^K G_{l\downarrow}^R + G_{k\sigma}^{(c)A} G_{l\uparrow}^A G_{l\downarrow}^K + G_{k\sigma}^{(c)K} G_{l\uparrow}^A G_{l\downarrow}^R \right] \\ &= \int \frac{d\epsilon}{2\pi} \left[\sum_{\pm} \frac{-2\pi i F_d(\epsilon) \delta(\epsilon - \epsilon_l \pm JS)}{(\epsilon^\pm - \epsilon_{k\sigma})(\epsilon^\pm - \epsilon_l \mp JS)} + \frac{-2\pi i F_c(\epsilon) \delta(\epsilon - \epsilon_{k\sigma})}{(\epsilon^- - \epsilon_l + JS)(\epsilon^+ - \epsilon_l - JS)} \right] \\ &= \sum_{\pm} \frac{\pm i}{2JS} \frac{F_d(\epsilon_l \mp JS)}{(\epsilon_l^\pm \mp JS - \epsilon_{k\sigma})} + \frac{i F_c(\epsilon_{k\sigma})}{2JS} \left[\frac{1}{\epsilon_{k\sigma}^- - \epsilon_l + JS} - \frac{1}{\epsilon_{k\sigma}^+ - \epsilon_l - JS} \right] \\ &= \frac{\pi}{2JS} \sum_{\pm} [F_d(\epsilon_l \mp JS) - F_c(\epsilon_{k\sigma})] \delta(\epsilon_{k\sigma} - \epsilon_l \pm JS), \end{aligned}$$

where $\epsilon^\pm = \epsilon \pm i0$ and we neglected the principal parts of the Green functions, since they disappear upon summation over momenta k and l . We can now introduce spin components of the tunneling current between the fixed and free layers as

$$I_{\sigma\sigma'} = 4\pi s \sum_{kl} |W_{kl}|^2 [n_c(\epsilon_{k\sigma}) - n_d(\epsilon_{l\sigma'})] \delta(\epsilon_{k\sigma} - \epsilon_{l\sigma'}), \quad (13.56)$$

where $n_{c(d)} = (1 - F_{c(d)})/2$ are occupation numbers of the fixed (free) layers, $\epsilon_{l\sigma'} = \epsilon_l - \sigma' JS$, and $s = 1/2$ is the spin of an electron. The total spin current is given by

$$I_s = \sum_{\sigma\sigma'} \sigma I_{\sigma\sigma'} = I_{\uparrow\uparrow} + I_{\uparrow\downarrow} - I_{\downarrow\uparrow} - I_{\downarrow\downarrow}. \quad (13.57)$$

With this notation one finds for the part of the action linear in $b(t)$ fields

$$S_1 = \frac{iI_s}{\sqrt{S}} \int dt [b^q(t) \sin \theta e^{-i\phi} - \bar{b}^q(t) \sin \theta e^{i\phi}] \quad (13.58)$$

Before tackling terms quadratic in the b -fields, let us discuss what we have found so far. Taking the first term on the right-hand side of Eq. (13.54) along with the first order induced action (13.58), one finds

$$S_0 + S_1 = \int dt \left[\bar{b}^q (i\partial + 2H_z) b^{\text{cl}} - 2H_+ \sqrt{S} \bar{b}^q - \frac{iI_s}{\sqrt{S}} \bar{b}^q \sin \theta e^{i\phi} + \text{c.c.} \right]. \quad (13.59)$$

Since this action is linear in $\bar{b}^q$ and b^q , integration over them results in the functional delta-function, imposing classical equations of motion on b^{cl} and $\bar{b}^{\text{cl}}$, respectively. Employing the fact that $b^{\text{cl}} = S_+/\sqrt{S}$, one finds

$$i\partial_t S_+ = -2(H_z S_+ - H_+ S) + iI_s \sin \theta (\cos \phi + i \sin \phi), \quad (13.60)$$

along with the complex conjugate equation for S_- . The imaginary and real parts provide equations for S_x and S_y . These equations are written in the instantaneous reference frame, where the spin $\mathbf{S}$ points in the z -direction (i.e. $S_{\pm} = 0$ and $S_z = S$). The latter has relative polar angles θ and ϕ with the reference frame of the fixed layer. One can define a vector $\mathbf{I}_s$ with length I_s and the direction of the fixed layer polarization and rewrite Eq. (13.60) in the vector form:

$$\partial_t \mathbf{S} = 2[\mathbf{H} \times \mathbf{S}] + \frac{1}{S^2} [\mathbf{S} \times [\mathbf{I}_s \times \mathbf{S}]] \quad (13.61)$$

The first term here is the Landau-Lifshitz precession, Eq. (11.37), while the last one is the Slonczewski-Berger [220,221] spin-torque contribution. It is easy to check that its angular dependence is exactly one, which we derived for the tunneling spin-current, the last term in Eq. (13.60). Notice also that it is independent of the exchange coupling constant J . For the positive spin-current (i.e. flowing from the fixed to the free layer), the spin torque forces the spin of the free layer to align with the direction of the fixed layer polarization.

We turn now to the terms quadratic in the b -fields. There are two kinds of them, $\bar{b}^q b^{\text{cl}} + \text{c.c.}$ and $|b^q|^2$ (indeed, $|b^{\text{cl}}|^2$ is forbidden by the normalization). As we shall see, they describe dissipation and noise, respectively. In equilibrium, that is, in the absence of the spin-current, the two are related through FDT. In the presence of the spin-current, however, the noise has an additional spin shot-noise component, which is a subject of the subsequent discussion. We first focus on second order in the $[\hat{\sigma}_- b^\alpha + \hat{\sigma}_+ \bar{b}^\alpha] \hat{\gamma}^\alpha$ terms, which leads to the diagrams depicted in Fig. 13.4(b),(c). These diagrams lead to

$$S_2 = \frac{i}{S} \iint dt dt' (\bar{b}^{\text{cl}}(t), \bar{b}^q(t)) \begin{pmatrix} 0 & D^A(t-t') \\ D^R(t-t') & D^K(t-t') \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b^{\text{cl}}(t') \\ b^q(t') \end{pmatrix} \quad (13.62)$$

where

$$D^R(\omega) = -(JS)^2 \sum_{kl,\sigma} \left[\left| W_{kl}^{\sigma\uparrow} \right|^2 \text{Tr} \left\{ \hat{G}_{k\sigma}^{(c)}(\epsilon) \hat{G}_{l\uparrow}(\epsilon) \hat{\gamma}^{\text{cl}} \hat{G}_{l\downarrow}(\epsilon + \omega) \hat{\gamma}^q \hat{G}_{l\uparrow}(\epsilon) \right\} \right. \\ \left. + \left| W_{kl}^{\sigma\downarrow} \right|^2 \text{Tr} \left\{ \hat{G}_{k\sigma}^{(c)}(\epsilon) \hat{G}_{l\downarrow}(\epsilon) \hat{\gamma}^q \hat{G}_{l\uparrow}(\epsilon - \omega) \hat{\gamma}^{\text{cl}} \hat{G}_{l\downarrow}(\epsilon) \right\} \right],$$

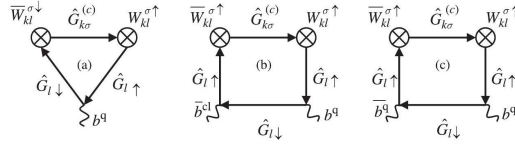


Figure 13.4 Contributions to the action in second order in tunneling amplitudes, $W_{kl}^{\sigma,\sigma'}$, denoted by crossed circles. (a) The S_1 action, linear in $b^q(t)$, leads to the spin-torque term; (b) part of the S_2 action, proportional to $\bar{b}^{cl}(t)b^q(t')$, leads to the damping term; (c) part of the S_2 action, proportional to $\bar{b}^q(t)b^q(t')$, leads to the noise cumulant. Fields b^α flip down the spin of electrons in the free layer; $\bar{b}^\alpha$ flip it up.

while

$$D^A(\omega) = - (JS)^2 \sum_{kl,\sigma} \left[\left| W_{kl}^{\sigma\uparrow} \right|^2 \text{Tr} \left\{ \hat{G}_{k\sigma}^{(c)}(\epsilon) \hat{G}_{l\uparrow}(\epsilon) \hat{\gamma}^q \hat{G}_{l\downarrow}(\epsilon + \omega) \hat{\gamma}^{cl} \hat{G}_{l\uparrow}(\epsilon) \right\} \right. \\ \left. + \left| W_{kl}^{\sigma\downarrow} \right|^2 \text{Tr} \left\{ \hat{G}_{k\sigma}^{(c)}(\epsilon) \hat{G}_{l\downarrow}(\epsilon) \hat{\gamma}^{cl} \hat{G}_{l\uparrow}(\epsilon - \omega) \hat{\gamma}^q \hat{G}_{l\downarrow}(\epsilon) \right\} \right].$$

Notice that transformation from the retarded to the advanced component requires not only changing $\omega \rightarrow -\omega$, but also flipping all the spin indices, in particular $\sigma' \rightarrow -\sigma'$. This is a manifestation of the time-reversal symmetry in quantum mechanics with spin [36]. Finally,

$$D^K(\omega) = -(JS)^2 \sum_{kl,\sigma\sigma'} \left| W_{kl}^{\sigma\sigma'} \right|^2 \text{Tr} \left\{ \hat{G}_{k\sigma}^{(c)}(\epsilon) \hat{G}_{l\sigma'}(\epsilon) \hat{\gamma}^q \hat{G}_{l-\sigma'}(\epsilon + \sigma'\omega) \hat{\gamma}^q \hat{G}_{l\sigma'}(\epsilon) \right\}.$$

Calculation of the traces of the four matrix Green functions is lengthy, but straightforward. For example, terms contributing to D^K for a particular spin configuration read as ⁷

$$\hat{G}_{k\uparrow}^{(c)R} \hat{G}_{l\uparrow}^R \hat{G}_{l\downarrow}^A(\epsilon + \omega) \hat{G}_{l\uparrow}^R + \hat{G}_{k\uparrow}^{(c)A} \hat{G}_{l\uparrow}^A \hat{G}_{l\downarrow}^R(\epsilon + \omega) \hat{G}_{l\uparrow}^A + \hat{G}_{k\uparrow}^{(c)K} \hat{G}_{l\uparrow}^A \hat{G}_{l\downarrow}^K(\epsilon + \omega) \hat{G}_{l\uparrow}^R,$$

if the energy argument is not written explicitly it is understood as ϵ . Integrating over the energy and employing $\epsilon_{l\sigma'} = \epsilon_l - \sigma'JS$, one finds for this specific contribution

$$\frac{2\pi}{(2JS - \omega)^2} [1 - F_c(\epsilon_{k\uparrow}) F_d(\epsilon_{l\downarrow})] \delta(\epsilon_{k\uparrow} - \epsilon_{l\downarrow} + \omega) \\ = \frac{2\pi}{(2JS - \omega)^2} \coth \frac{eV + \omega}{2T} [F_c(\epsilon_{k\uparrow}) - F_d(\epsilon_{l\downarrow})] \delta(\epsilon_{k\uparrow} - \epsilon_{l\downarrow} + \omega),$$

⁷ We have omitted terms $\propto G_{l\downarrow}^K(\epsilon + \omega) G_{l\uparrow}^K(\epsilon) \sim \delta(\epsilon + \omega - \epsilon_l - JS) \delta(\epsilon - \epsilon_l + JS)$, since the two delta-functions are incompatible unless $\omega = 2JS$.

where we assumed equilibrium Fermi distributions in the fixed and free layers with $\mu_c - \mu_d = eV$. Being multiplied by the proper tunneling matrix element $|W_{kl}^{\uparrow\uparrow}|^2$, Eq. (13.51), and summed over momenta, this contribution is $\propto \cos^2(\theta/2) I_{\uparrow\downarrow}(eV + \omega)$, where we used expression (13.56) for the components of the spin current. Restricting ourselves to $\omega \ll 2JS$ and collecting all spin components, we find

$$D^K(\omega) = \frac{1}{2} \cos^2 \frac{\theta}{2} \left[\coth \frac{eV + \omega}{2T} I_{\uparrow\downarrow}(eV + \omega) + \coth \frac{eV - \omega}{2T} I_{\downarrow\uparrow}(eV - \omega) \right] \\ + \frac{1}{2} \sin^2 \frac{\theta}{2} \left[\coth \frac{eV + \omega}{2T} I_{\downarrow\downarrow}(eV + \omega) + \coth \frac{eV - \omega}{2T} I_{\uparrow\uparrow}(eV - \omega) \right]. \quad (13.63)$$

The very similar calculations for $D^{R(A)}$ yield

$$\begin{aligned}
D^R(\omega) &= \frac{1}{4} \cos^2 \frac{\theta}{2} [I_{\uparrow\downarrow}(eV + \omega) - I_{\downarrow\uparrow}(eV - \omega)] \\
&\quad + \frac{1}{4} \sin^2 \frac{\theta}{2} [I_{\downarrow\downarrow}(eV + \omega) - I_{\uparrow\uparrow}(eV - \omega)], \\
D^A(\omega) &= \frac{1}{4} \cos^2 \frac{\theta}{2} [I_{\downarrow\uparrow}(eV - \omega) - I_{\uparrow\downarrow}(eV + \omega)] \\
&\quad + \frac{1}{4} \sin^2 \frac{\theta}{2} [I_{\uparrow\uparrow}(eV - \omega) - I_{\downarrow\downarrow}(eV + \omega)].
\end{aligned} \tag{13.64}$$

In equilibrium, $eV = 0$, FDT is satisfied, that is, $D^K = \coth(\omega/2T) [D^R - D^A]$ (notice that having $\omega \leftrightarrow -\omega$ and $\uparrow \leftrightarrow \downarrow$ between the retarded and advanced components is crucial for FDT validity). We focus here on the opposite limit of strong non-equilibrium and small frequencies, $\omega \ll eV$. In the Keldysh component one may put $\omega = 0$, while the retarded/advanced components need to be expanded to first order in ω . The reason for the latter is that $iD^R(0) = -iD^A(0)$ enter the action (13.62) as an effective z -component of the magnetic field H_z ; see Eq. (13.59). In the instantaneous reference frame, where $S_z = S$ and $S_x = S_y = 0$, the H_z component drops from the equation of motion (13.60) and does not influence the dynamics. We thus drop $D^{R(A)}(0)$,⁸ but keep the first order in ω , since $i\bar{b}^q \omega b^{cl} \rightarrow -\bar{b}^q \partial_t b^{cl}$. As a result, the low-frequency second-order action (13.62) acquires a time-local dissipative form (cf. Eq. (4.2)),

$$S_2 = \frac{1}{S} \int dt (\bar{b}^{cl}(t), \bar{b}^q(t)) \begin{pmatrix} 0 & \alpha \partial_t \\ -\alpha \partial_t & 2i\mathcal{D} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b^{cl}(t) \\ b^q(t) \end{pmatrix} \tag{13.65}$$

where the dissipation and noise amplitude are given by [273]

$$\alpha(\theta, V) = \frac{\partial I_{sf}(\theta, V)}{\partial eV}; \quad \mathcal{D}(\theta, V) = \coth\left(\frac{eV}{2T}\right) I_{sf}(\theta, V). \tag{13.66}$$

We have introduced here the spin-flip current, defined as

$$I_{sf}(\theta, V) = \frac{1}{4} \cos^2 \frac{\theta}{2} [I_{\uparrow\downarrow}(eV) + I_{\downarrow\uparrow}(eV)] + \frac{1}{4} \sin^2 \frac{\theta}{2} [I_{\downarrow\downarrow}(eV) + I_{\uparrow\uparrow}(eV)]. \tag{13.67}$$

To proceed it is convenient to split the $e^{-2\mathcal{D}|b^q|^2/S}$ part of e^{iS_2} using the HubbardStratonovich transformation with the auxiliary complex field $j(t)$,

$$e^{-\frac{2\mathcal{D}}{S} \int dt |b^q(t)|^2} = \int \mathbf{D}[\bar{j}, j] e^{-\int dt \left[\frac{1}{2\mathcal{D}} |j(t)|^2 + \frac{i}{\sqrt{S}} \bar{b}^q(t) j(t) + \frac{i}{\sqrt{S}} \bar{j}(t) b^q(t) \right]}.$$

Then the action takes the form $S_2 = -\int dt \bar{b}^q \left((\alpha/S) \partial_t b^{cl} + j(t)/\sqrt{S} \right) + \text{c.c.}$, which should be added to the $S_0 + S_1$ part (13.59). Being still linear in $\bar{b}^q$, the combined action imposes the classical equation of motion for $b^{cl}(t) = S_+(t)/\sqrt{S}$. In the instantaneous rotating reference frame, where $S_\pm = 0$ and $S_z = S$, it takes the form $i\partial_t S_+ = \alpha \partial_t S_+/S + j(t) + \dots$, while $i\partial_t S_z = 0$. It is convenient to denote real and imaginary parts of the complex function j as $-j_y$ and j_x , respectively. Transforming then to the laboratory frame, one finally finds

$$\partial_t \mathbf{S} = 2[\mathbf{H} \times \mathbf{S}] - \frac{\alpha}{S} [\mathbf{S} \times \partial_t \mathbf{S}] + \frac{1}{S^2} [\mathbf{S} \times [(\mathbf{I}_s + \mathbf{j}(t)) \times \mathbf{S}]]. \tag{13.68}$$

⁸ For the same reason we drop terms originating from the expansion of $\text{Tr} \ln(1 + \dots)$ to first order in the very last term on the right-hand side of Eq. (13.55). Indeed, all such terms are frequency-independent and thus inconsequential.

The α -term here is Gilbert damping, which forces the spin $\mathbf{S}$ to align against the external magnetic field $\mathbf{H}$. In our model the damping is associated with the tunneling of the spin-polarized electrons from the fixed layer and equilibrating them with the instantaneous spin polarization direction of the free layer. The Gilbert damping constant α is thus given by the spin-flip tunneling conductance, as defined by Eqs. (13.66) and (13.67). In general, one should also add another contribution, say α_0 , which accounts for all other mechanisms of dissipation.

The dissipation also induces fluctuations, which enter the equation as the fluctuating part of the spin-current $\mathbf{j}(t)$.⁹ Since the random complex field j has Gaussian statistics with $\langle j(t)\bar{j}(t') \rangle = \langle j_y j_y \rangle + \langle j_x j_x \rangle = 2\mathcal{D}\delta(t-t')$, one notices that the vector noise $\mathbf{j}(t)$ has an isotropic Gaussian correlator

$$\langle j_\mu(t)j_\nu(t') \rangle = \mathcal{D}(\theta, V)\delta(t-t')\delta_{\mu\nu}, \quad (13.69)$$

given by Eqs. (13.66) and (13.67). Notice that for small voltage, $eV \ll T$, the spin-flip current I_{sf} is linear in voltage, and therefore $\mathcal{D} = 2T\alpha$. In this limit thus

$\langle j_\mu j_\nu \rangle = 2T\alpha\delta_{\mu\nu}$ in agreement with the FDT equilibrium magnetic noise, first discussed by Brown [274]. In the opposite limit $eV \gg T$, Eqs. (13.66)-(13.69) describe spin shot noise [273] with the correlator $\langle jj \rangle \approx 2s|I_{\text{sf}}|$, where $s = 1/2$. This result should be compared with the Schottky (tunneling limit) charge shot noise $\langle \delta J \delta J \rangle = 2e|J|$, Eq. (13.19). The difference, which stems from the vector nature of the spin degree of freedom, is that the spin noise is not proportional to the spin-current I_s itself, but rather to a somewhat different object - the spin-flip current I_{sf} .

13.1.7 13.7 Problems

13.7.1 Meir-Wingreen Formula

Consider electron transport through an interacting quantum dot, sandwiched between two noninteracting metallic leads, labeled as $s = \text{L, R}$. The Hamiltonian is given by

$$\hat{H} = \sum_{k,s} \epsilon_{k,s} \hat{c}_{k,s}^\dagger \hat{c}_{k,s} + \hat{H}_{\text{dot}} [\hat{d}_n^\dagger, \hat{d}_n] + \sum_{n,k,s} [W_{kn}^{(s)} \hat{c}_{k,s}^\dagger \hat{d}_n + \text{h.c.}] \quad (13.70)$$

where n denotes some set of quantum numbers characterizing states of the dot and operators $\hat{d}_n^\dagger (\hat{d}_n)$ create (annihilate) electrons in these states; $\hat{H}_{\text{dot}}$ is a Hamiltonian of the isolated dot, which may include arbitrary interactions. Finally, $W_{kn}^{(\text{L,R})}$ are tunneling matrix elements between the leads and the dot.

Define current operators as $\hat{J}_s = \partial_t \hat{N}_s = i [\hat{H}, \hat{N}_s]$, where the particle number operators in the leads are $\hat{N}_s = \sum_k \hat{c}_{k,s}^\dagger \hat{c}_{k,s}$. Perform commutations and show that $\hat{J}_s = i \sum_{n,k} [W_{kn}^{(s)} \hat{c}_{k,s}^\dagger \hat{d}_n - \text{h.c.}]$.

Write down the Keldysh action, corresponding to the Hamiltonian (13.70), where two-component Grassmann vectors $\bar{\psi}_n, \psi_n$ encode $\hat{d}_n^\dagger, \hat{d}_n$ operators and $\bar{\chi}_{k,s}, \chi_{k,s}$ encode $\hat{c}_{k,s}^\dagger, \hat{c}_{k,s}$ operators. One includes quantum sources, which generate the two currents, as $i \sum_s A_s^q \sum_{n,k} [W_{kn}^{(s)} \bar{\chi}_{k,s} \hat{\gamma}^q \psi_n - W_{kn}^{*(s)} \bar{\psi}_n \hat{\gamma}^q \chi_{k,s}]$ term in the action. This way, the expectation values of the current operators are given by $J_s = \frac{i}{2} \delta Z [A_L^q, A_R^q] / \delta A_s^q|_{A_s^q=0}$, cf. (10.46). Use now the fact that the leads are noninteracting to perform the Gaussian integrations over $\bar{\chi}_{k,s}, \chi_{k,s}$ variables to find $Z[A_L^q, A_R^q] = \int \mathbf{D}[\bar{\psi}, \psi] e^{iS_{\text{eff}}[\bar{\psi}, \psi; A_L^q, A_R^q]}$, with the effective action

⁰⁹ One could equally well rewrite the fluctuating term as the random part of the magnetic field $\mathbf{H} \rightarrow \mathbf{H} + \mathbf{h}(t)$, where $\mathbf{h}(t)$ is a Gaussian isotropic random vector with the correlator $\langle h_\mu(t)h_\nu(t') \rangle = \delta_{\mu\nu}\delta(t-t')\mathcal{D}/4S^2$.

$$S_{\text{eff}} [\bar{\psi}, \psi; A_L^q, A_R^q] = \int dt \left[\sum_n \bar{\psi}_n i \partial_t \psi_n - H_{\text{dot}} [\bar{\psi}_n, \psi_n] \right] \quad (13.71)$$

$$- \iint dt dt' \sum_{n,n',s} \bar{\psi}_n(t) [1 - i A_s^q \hat{\gamma}^q] \hat{\Gamma}_{nn'}^{(s)}(t-t') [1 + i A_s^q \hat{\gamma}^q] \psi_{n'}(t')$$

where $\hat{\Gamma}_{nn'}^{(s)}(t-t') = \sum_k W_{kn}^{*(s)} \hat{G}_k^{(s)}(t-t') W_{kn'}^{(s)}$ and $\hat{G}_k^{(s)}(t-t')$ is the Keldysh matrix Green function of the lead s . Since the leads are assumed to be in local equilibrium, the FDT dictates that $\Gamma_{nn'}^{(s),K}(\epsilon) = F_s(\epsilon) (\Gamma_{nn'}^{(s),R}(\epsilon) - \Gamma_{nn'}^{(s),A}(\epsilon))$, where $F_s(\epsilon) = \tanh(\epsilon - \mu_s)/2T_s$.

Differentiate the effective action over the quantum sources to show that

$$J_s = \frac{1}{2} \int \frac{d\epsilon}{2\pi} \text{Tr} \left\{ [\hat{\Gamma}^{(s)}(\epsilon), \hat{\gamma}^q] \hat{G}(\epsilon) \right\} = \frac{i}{2} \int d\epsilon \Gamma_{nn'}^s [G_{n'n}^K - F_s (G_{n'n}^R - G_{n'n}^A)] \quad (13.72)$$

Here $\hat{G}_{n'n} = -i \langle \psi_{n'} \bar{\psi}_n \rangle$ are components of the exact Green function of the dot, where $\langle \dots \rangle$ is averaging with the action $S = \bar{\psi} i \partial_t \psi - H_{\text{dot}}[\bar{\psi}, \psi] - \bar{\psi} (\hat{\Gamma}^{(R)} + \hat{\Gamma}^{(L)}) \psi$. We have also introduced the notation $\mathbf{\Gamma}_{nn'}^s(\epsilon) = \sum_k W_{kn}^{*(s)} \delta(\epsilon - \epsilon_{k,s}) W_{kn'}^{(s)}$, where $\hat{G}_k^{(s),R}(\epsilon) - \hat{G}_k^{(s),A}(\epsilon) = -2\pi i \delta(\epsilon - \epsilon_{k,s})$. Verify that, if the dot and the two leads are in equilibrium, then $J_L = J_R = 0$.

In a non-equilibrium stationary state $J_L = -J_R$. This leads to the expression for the dc current through the dot, $J = (J_L - J_R)/2$:

$$J = \frac{i}{4} \int d\epsilon \text{Tr} \left\{ (\mathbf{\Gamma}^L - \mathbf{\Gamma}^R) G^K - (\mathbf{\Gamma}^L F_L - \mathbf{\Gamma}^R F_R) (G^R - G^A) \right\} \quad (13.73)$$

where the trace is understood over the orbital n, n' indexes. This result is known as Meir-Wingreen formula [275]. It expresses the current through the $\Gamma^{L,R}(\epsilon)$ coupling matrices and the exact Green functions of the interacting dot. The latter refer not to the isolated dot, but rather to the dot coupled to the leads. This coupling is included through the $\bar{\psi} (\hat{\Gamma}^{(R)} + \hat{\Gamma}^{(L)}) \psi$ term in the dot action.

Consider a particular case $\Gamma^R(\epsilon) = \lambda \Gamma^L(\epsilon)$, [275]. Let's also assume that $G_{n'n}^K(\epsilon) = F_{\text{dot}}(\epsilon) (G_{n'n}^R(\epsilon) - G_{n'n}^A(\epsilon))$ with the distribution function $F_{\text{dot}}(\epsilon)$, which is independent on the orbital indexes. Show that the current conservation, $J_L = -J_R$, implies $F_{\text{dot}} = (\lambda F_R + F_L)/(\lambda + 1)$ and therefore

$$J = \int d\epsilon (F_R(\epsilon) - F_L(\epsilon)) \text{Im Tr} \left\{ \frac{\mathbf{\Gamma}^R \mathbf{\Gamma}^L}{\mathbf{\Gamma}^R + \mathbf{\Gamma}^L} G^R \right\} \quad (13.74)$$

Although this expression looks like its noninteracting analog, it may still fully incorporate interaction effects in the dot through $G^R(\epsilon)$.

13.7.2 Levitons: Optimal Voltage Pulses

The counting statistics of transmitted charge, given by Eq. (13.30), is derived for a constant voltage, V . One may generalize it for a time-dependent voltage, given by a periodic sequence of pulses. In particular, it is instructive to consider pulses with a period T_0 , such that $\int_0^{T_0} dt eV(t) = 2\pi m \hbar$, where m is an integer. Hereafter, we put $m = 1$, but this does not affect the conclusions. To this end, notice that the diagonal matrix $\hat{n}_F = \text{diag}\{n(\epsilon - eV), n(\epsilon)\}$ may be written in the time representation as

$$\hat{n}_F(t, t') = \begin{pmatrix} e^{-i\Phi(t)} & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} n(t-t') \hat{1} \begin{pmatrix} e^{i\Phi(t')} & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (13.75)$$

where $n(t - t')$ is the Fourier transform of the equilibrium distribution $n(\epsilon)$. Since we operate in the basis of T_0 -periodic functions, the energies are quantized in units $\epsilon_n = 2\pi n/T_0$. One thus finds for the zero-temperature distribution function $n(\epsilon_n) = \theta(-\epsilon_n)$:

$$n(t - t') = \frac{1}{T_0} \sum_n n(\epsilon_n) e^{-i\epsilon_n(t-t')} = \frac{i}{2T_0} \frac{e^{i\pi(t-t')/T_0}}{\sin(\pi(t-t')/T_0)} \quad (13.76)$$

For a constant voltage, $\Phi(t) = eVt$, which may be immediately generalized as $\Phi(t) = \int_0^t eV(t)dt$, or $\partial_t \Phi(t) = eV(t)$. For the normalization of voltage pulses, discussed earlier, $\Phi(T_0) - \Phi(0) = 2\pi$, and therefore $e^{\pm i\Phi(t)}$ is also a T_0 -periodic function. Substitute these equations into the generation function (13.30), employ the fact that $\log Z[\eta] = \text{Tr} \log [1 - \hat{n}_F(t, t') (1 - \mathcal{S}_{-\eta}^\dagger \mathcal{S}_\eta)]$, where the trace is understood both in the time space and in the left-right 2×2 space, and calculate the first two irreducible moments of the transmitted charge as [276]

$$\begin{aligned} \langle q \rangle &= e \frac{d \log Z[\eta]}{d\eta} \Big|_{\eta=0} = e |\mathbf{t}|^2 N_0 \int_0^{T_0} \frac{dt}{2\pi i} e^{-i\Phi(t)} \partial_t e^{i\Phi(t)} \\ \langle \langle q^2 \rangle \rangle &= e^2 \frac{d^2 \log Z[\eta]}{d\eta^2} \Big|_{\eta=0} = e^2 |\mathbf{t}|^2 |\mathbf{r}|^2 N_0 \iint_0^{T_0} \frac{dt dt'}{T_0^2} \frac{\sin^2 \left[\frac{\Phi(t) - \Phi(t')}{2} \right]}{\sin^2 [\pi(t - t')/T_0]} \end{aligned} \quad (13.77)$$

where $N_0 = t_0/T_0$ is the number of voltage pulse periods. From here one notices that the first cumulant, that is, the average current, is given by the Landauer formula independently of the shape of the voltage pulses, $\Phi(T_0) - \Phi(0) = 2\pi$. On the other hand, the second cumulant, that is, the noise, depends explicitly on the shape of the pulse. One can therefore ask what pulse shape (or shapes) minimize the noise (with a fixed average current $\langle q \rangle$).

Notice that the expression for the noise coincides with the Ambegoakar-Eckern-Schön action [40] (3.45), used in the theory of the Coulomb blockade; see Problem 3.6.2. Also notice that, while AES action is written in the imaginary time, the expression for the noise is in the real time. Yet they formally coincide with the periodicity given by $\beta = 1/T$ in the AES case and by the voltage pulse period T_0 in the present case. Therefore, minimization of noise is formally equivalent to looking for stationary configurations of AES action. The latter task is discussed in Problem 3.6.2. Calculate the variation of the noise with respect to $\Phi(t)$ and show [276] that the resulting extremal condition is satisfied by the Korshunov instantons [41]

$$e^{i\Phi(t)} = \frac{z - z_1}{1 - z\bar{z}_1} \quad (13.78)$$

where $z = e^{2\pi i t/T_0}$ and z_1 is an arbitrary complex number inside the unit circle, $|z_1| < 1$. Plot $\Phi(t)$ and $V(t)$ for various z_1 . Calculate the noise for such pulses and show that it is given by the Lesovik formula $\langle \langle q^2 \rangle \rangle = e^2 |\mathbf{t}|^2 |\mathbf{r}|^2 N_0$, independent of z_1 . This shows that the constant voltage, that is, $z_1 = 0$ and thus $\Phi(t) = 2\pi t/T_0$, results in a minimal possible noise. Amazingly this is not the only option: one may choose $|z_1| \rightarrow 1$, resulting in short and sharp voltage pulses. Such pulses, called Levitons after L. Levitov, carry the same average current and produce the same noise as the time-independent voltage. This observation is used extensively in quantum devices [277].

13.2 Disordered Fermionic Systems

This chapter deals with a Fermi gas in the presence of a static random potential. It is first treated with the kinetic equation approach, which leads to the classical diffusion of density perturbations. We then derive an effective low-energy fieldtheory, known as the Keldysh

nonlinear sigma-model. It contains classical diffusion as its stationary point, while fluctuations around such a stationary point provide quantum weak localization corrections as well as a scaling theory of localization transition in $2 + \epsilon$ dimensions.

13.2.1 14.1 Kinetic Equation Approach

One is often interested in calculating various observables, such as current or density, in the presence of a static (quenched) space-dependent disorder potential $V_{\text{dis}}(\mathbf{r})$. As any other single-particle operator, the disorder potential modifies the quadratic part of the fermionic action, bringing the term

$$\begin{aligned} S_{\text{dis}}[V_{\text{dis}}] &= - \int_{\mathcal{C}} dt \int d\mathbf{r} V_{\text{dis}}(\mathbf{r}) \bar{\psi}(\mathbf{r}, t) \psi(\mathbf{r}, t) \\ &= - \int d\mathbf{r} V_{\text{dis}}(\mathbf{r}) \int_{-\infty}^{\infty} dt \bar{\psi}^a(\mathbf{r}, t) \hat{\gamma}_{ab}^{\text{cl}} \psi^b(\mathbf{r}, t) \end{aligned} \quad (14.1)$$

where in the second line we used the fact that the disorder potential is purely classical, that is, the same on both branches of the time contour. Although we limit ourselves to a static potential, we still assume that it is adiabatically switched on and off sometime after and before $t = -\infty$. As a result, the initial density matrix $\hat{\rho}_0$ and therefore the factor $\text{Tr}\{\hat{\rho}_0\}$ in Eq. (10.14) are disorder independent. We thus absorb it into the measure of the fermionic functional integration and do not show it explicitly.

Since the exact form of the disorder potential is usually unknown, one is typically interested in average values of observables over an ensemble of realizations of $V_{\text{dis}}(\mathbf{r})$. To perform such an averaging one needs to specify certain statistical properties of the disorder potential. It is usually assumed that the latter is Gaussian, that is, that the third and higher irreducible cumulants of V_{dis} are absent. Although in practice this is probably not really the case, the higher cumulants turn out to be irrelevant in the RG sense. As a result they do not affect most of the large-scale observables. Under this assumption, one needs to specify only the second cumulant of the disorder potential: ¹

$$\langle V_{\text{dis}}(\mathbf{r}) V_{\text{dis}}(\mathbf{r}') \rangle_{\text{dis}} = g(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (14.2)$$

We shall see that the Fourier transform $g(\mathbf{q}) = g(-\mathbf{q})$ of the correlation function $g(\mathbf{r})$ specifies the relative probability of scattering with the change of electronic wavenumber by $\mathbf{q}$.

We start by deriving the kinetic equation for the mass-shell electronic distribution function $\tilde{F}(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t)$. In doing so, we shall treat the disorder potential $V_{\text{dis}}(\mathbf{r})$ not as a part of the kinetic term (cf. Eq. (11.3)), but rather as a source for the selfenergy and thus for the collision integral. Calculating the self-energy, we restrict ourselves to the second-order expansion in $V_{\text{dis}}(\mathbf{r})$, which is then averaged over the disorder. This is certainly an approximation, which misses a number of important phenomena such as localization or mesoscopic fluctuations. The systematic way to improve on this approximation is a subject of the subsequent sections. Meanwhile, we proceed with the outlined program. Expanding $e^{iS_{\text{dis}}[V_{\text{dis}}]}$, Eq. (14.1), to second order and applying the fermionic Wick theorem (10.12), one obtains for the self-energy matrix in the Keldysh space, Fig. 14.1(a),

$$\hat{\Sigma}(x, x') = V_{\text{dis}}(\mathbf{r}) V_{\text{dis}}(\mathbf{r}') \hat{G}(x, x') \quad (14.3)$$

where $x = (\mathbf{r}, t)$ and we used $\hat{\gamma}_{ab}^{\text{cl}} = \delta_{ab}$. Performing averaging over disorder according to Eq. (14.2) and going to the Fourier representation, one finds $\hat{\Sigma}(\mathbf{k}, \epsilon) = \sum_{\mathbf{k}'} g(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \hat{G}(\mathbf{k}', \epsilon)$, Fig. 14.1(b). Employing $G^K = F(G^R - G^A)$ and $G^R - G^A = -2\pi i \delta(\epsilon - \xi_{\mathbf{k}'})$, one finds for the

collision integral (11.3)

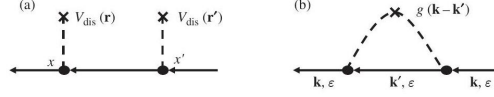


Figure 14.1 Fermionic self-energy to second order in $V_{\text{dis}}(\mathbf{r})$: (a) before averaging over the disorder; (b) after the averaging.

$$I^{\text{coll}} = i\Sigma^K - iF(\Sigma^R - \Sigma^A) = 2\pi \sum_{\mathbf{k}'} g(\mathbf{k} - \mathbf{k}') [\tilde{F}(\mathbf{k}') - \tilde{F}(\mathbf{k})] \delta(\xi_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{k}'}), \quad (14.4)$$

where we have restricted the distribution function to the mass-shell by putting $\epsilon = \xi_{\mathbf{k}}$. The collision integral is nothing but the Golden Rule with the scattering probability between $\mathbf{k} \leftrightarrow \mathbf{k}'$ being $g(\mathbf{k} - \mathbf{k}') = g(\mathbf{k}' - \mathbf{k})$, "in" and "out" occupation factors and energy conservation.

To proceed we notice that elastic scattering tends to make the distribution function uniform in momentum directions, that is, dependent mostly on the energy $\xi_{\mathbf{k}} = \epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_F$ and only weakly on the direction, characterized by the unit vector $\mathbf{n}_{\mathbf{k}} = \mathbf{k}/k$. The residual weak dependence on the direction may be represented by the spherical harmonic expansion

$$\tilde{F}(\mathbf{k}, x) = F_0(\epsilon, x) + \mathbf{n}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{F}_1(\epsilon, x) + \dots, \quad (14.5)$$

where we used that $\epsilon = \xi_{\mathbf{k}}$ and the first omitted term is $n_{\mathbf{k}}^\mu n_{\mathbf{k}}^\nu F_2^{\mu\nu}(\epsilon)$ with $F_2^{\mu\nu}$ a rank-two traceless tensor. We now employ essentially the same method, which leads from the Fokker-Planck equation (4.32) to the diffusion equation (4.34). We substitute spherical harmonic expansion (14.5) into the kinetic equation (11.3),

$$[\partial_t + \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \nabla_{\mathbf{r}}] \tilde{F}(\mathbf{k}, x) = I^{\text{coll}}[\tilde{F}] \quad (14.6)$$

with the collision integral (14.4). We now (i) integrate it over the angular directions $\int d\Omega_{\mathbf{k}}$ of the unit vector $\mathbf{n}_{\mathbf{k}}$; (ii) multiply by $\mathbf{n}_{\mathbf{k}}$ and then integrate over the angle. This way one obtains the scalar and vector equations

$$\partial_t F_0 + \frac{v_F}{d} \text{div} \mathbf{F}_1 = 0, \quad (14.7)$$

$$\partial_t \mathbf{F}_1 + v_F \nabla_{\mathbf{r}} F_0 = -\frac{1}{\tau_{\text{tr}}} \mathbf{F}_1, \quad (14.8)$$

where we put $\nabla_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}} = v_{\mathbf{k}} \approx v_F \mathbf{n}_{\mathbf{k}}$, employed the fact that $\int d\Omega_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}}^\mu n_{\mathbf{k}}^\nu = \delta^{\mu\nu}/d$, where d is the dimensionality of space, and introduced the transport scattering time

$$\frac{1}{\tau_{\text{tr}}} = 2\pi \sum_{\mathbf{k}'} g(\mathbf{k} - \mathbf{k}') [1 - \mathbf{n}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{n}_{\mathbf{k}'}] \delta(\xi_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{k}'}) = 2\pi v \int_0^\pi \frac{d\theta}{\pi} g(\theta) (1 - \cos \theta) \quad (14.9)$$

where ν is the density of states, defined as $\sum_{\mathbf{k}} \dots = v \int d\xi_{\mathbf{k}} \dots$. In the last expression θ is an angle between $\mathbf{n}_{\mathbf{k}}$ and $\mathbf{n}_{\mathbf{k}'}$ and $k = k' \approx k_F$. If $g(\theta) = g$ is a constant, that is, scattering with any momentum transfer is equally probable, the cosine term ("in" term in the collision integral (14.4)) averages out to zero. In this case $1/\tau_{\text{tr}} = 1/\tau_{\text{el}} = 2\pi\nu g$ is an elastic or "out" relaxation rate and τ_{el} is the elastic scattering time. Assuming that the characteristic frequency

⁰¹ The first cumulant $\langle V_{\text{dis}}(\mathbf{r}) \rangle_{\text{dis}}$ may be always absorbed into a redefinition of the chemical potential and thus thought of as being zero.

of external fields is

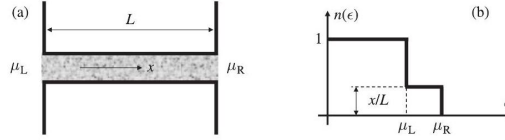


Figure 14.2 (a) Quasi-one-dimensional wire of length L attached to two leads with the chemical potentials $\mu_R - \mu_L = eV$. (b) The fermionic occupation number $n(\epsilon, x) = (1 - F_\epsilon(x))/2$. much less than the transport relaxation rate, one may neglect the $\partial_t \mathbf{F}_1$ term on the left-hand side of Eq. (14.8). One then finds $\mathbf{F}_1 = -v_F \tau_{tr} \nabla_{\mathbf{r}} F_0$ and accordingly

$$\partial_t F_\epsilon(\mathbf{r}, t) = D \nabla_{\mathbf{r}}^2 F_\epsilon(\mathbf{r}, t); \quad D = v_F^2 \tau_{tr} / d \quad (14.10)$$

where we used the shorthand notation $F_\epsilon(\mathbf{r}, t) \equiv F_0(\epsilon, \mathbf{r}, t) = \int d\Omega_{\mathbf{k}} \tilde{F}(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t)$. We found thus that the average over the angle part of the distribution function obeys the diffusion equation with the diffusion constant proportional to the transport relaxation time. Equation (14.7) is the continuity relation with the current density given by $\mathbf{j}(\epsilon) = -v_F \mathbf{F}_1 / (2d) = D \nabla_{\mathbf{r}} F_\epsilon / 2$.² The total electric current is therefore given by $\mathbf{J} = e \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{j}(\epsilon) = (evD/2) \int d\epsilon \nabla_{\mathbf{r}} F_\epsilon$.

As an example, let us consider a disordered quasi-one-dimensional wire of length L , attached to two leads, kept at different voltages [278], Fig. 14.2(a). We look for a space-dependent, stationary function $F_\epsilon(x)$, where x is the coordinate along the wire. It ought to satisfy the diffusion equation (14.10), $D \partial_x^2 F_\epsilon(x) = 0$, supplemented by the boundary conditions $F_\epsilon(0) = F_L(\epsilon)$ and $F_\epsilon(L) = F_R(\epsilon)$, where $F_{L(R)}(\epsilon)$ are the distribution functions of the left and right leads. The proper solution is

$$F_\epsilon(x) = F_L(\epsilon) + [F_R(\epsilon) - F_L(\epsilon)] \frac{x}{L} \quad (14.11)$$

At low temperature, $T \ll eV$, the distribution function looks like a two-step function, Fig. 14.2(b), where the energy separation between the steps is the applied voltage, eV , while the relative height linearly depends on the position x . The total current along the wire is

$$J = \frac{evD}{2} \int d\epsilon \partial_x F_\epsilon = \frac{evD}{2L} \int d\epsilon [F_R(\epsilon) - F_L(\epsilon)] = \frac{evD}{L} eV = \sigma_D \frac{V}{L} \quad (14.12)$$

where the Drude conductivity of the diffusive wire is given by $\sigma_D = e^2 \nu D$.

We now discuss the Boltzmann-Langevin stochastic term in the kinetic equation; see Section 12.4:

$$[\partial_t + \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \nabla_{\mathbf{r}}] \tilde{F}(\mathbf{k}, x) = I^{\text{coll}}[\tilde{F}] + \tilde{\xi}_F(\mathbf{k}, x) \quad (14.13)$$

where the noise correlator $\langle \tilde{\xi}_F(\mathbf{k}_1, x_1) \tilde{\xi}_F(\mathbf{k}_2, x_2) \rangle$ is given by Eqs. (12.48) and (12.50) with

$$I(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = 2\pi g(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) [\tilde{F}(\mathbf{k}_2) - \tilde{F}(\mathbf{k}_1)] \delta(\xi_{\mathbf{k}_1} - \xi_{\mathbf{k}_2}). \quad (14.14)$$

The leading contribution comes from the zeroth spherical harmonic of the noise $\xi_\epsilon(x) = \int d\Omega_{\mathbf{k}} \tilde{\xi}_F(\mathbf{k}, x)$. Using Eq. (14.5) and integrating over $\mathbf{k}_1$ and $\mathbf{k}_2$ angles, one finds its correlation function to be

$$\langle \xi_\epsilon(x) \xi_{\epsilon'}(x') \rangle = \delta(\epsilon - \epsilon') \delta(x - x') \frac{4}{\pi v d \tau_{tr}} \mathbf{F}_1^2 = \delta(\epsilon - \epsilon') \delta(x - x') \frac{4D}{\pi v} (\nabla_{\mathbf{r}} F_\epsilon)^2 \quad (14.15)$$

Clearly the noise is only present in the out-of-equilibrium current-carrying state. Following Eqs. (14.7) and (14.8), one finds that the distribution function satisfies the stochastic diffusion equation

⁰² The factor of minus one-half is due to the fact that $\tilde{F}(\mathbf{k}) = 1 - 2n(\mathbf{k})$, while $j(\epsilon) = \int d\Omega_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} n(\mathbf{k})$.

$$\partial_t F_\epsilon(x) - D \nabla_{\mathbf{r}}^2 F_\epsilon(x) = \xi_\epsilon(x) \quad (14.16)$$

where $x = (\mathbf{r}, t)$. This equation belongs to the Edwards-Wilkinson class of stochastic models, and appeared in Problems 9.10.1-9.10.2. We shall return to the discussion of the stochastic term in the end of Section 14.4.

13.2.2 14.2 Averaging over the Quenched Disorder

As was mentioned, the diffusion equation (14.10) is only an approximation, which in some cases (most notably in the localized state) completely fails to describe the system. To develop a more systematic approach it is desirable to perform the disorder averaging at an early stage and deduce an effective deterministic, that is, without randomness, field theory. The latter may be then either treated by perturbation theory in disorder strength, RG, or possibly solved exactly (e.g. in 1d, or on a graph). Notice that so far we have been doing things in the opposite order: first expanding and only then averaging. The idea that the averaging may be performed first is facilitated by the observation that it is seemingly easy to average $e^{iS_{\text{dis}}}$ over the Gaussian distribution of V_{dis} . Indeed, it brings the Gaussian integral over $\mathbf{D}[V_{\text{dis}}]$, which may be immediately evaluated.

This appealing observation can not be straightforwardly applied in the framework of the equilibrium formalism. The reason is that one has to average the logarithm of the partition function and not the partition function itself.³ Observables are obtained then as derivatives of the (averaged) logarithm of the partition function with respect to various sources. Indeed, averaging of the partition function itself $\langle Z[V_{\text{dis}}] \rangle_{\text{dis}} = \langle \text{Tr} \{ e^{-H[V_{\text{dis}}]/T} \} \rangle_{\text{dis}}$, although technically straightforward, grossly overemphasizes rare disorder realizations with the smallest energy. On the

other hand, averaging the logarithm $\langle \ln Z[V_{\text{dis}}] \rangle_{\text{dis}}$, gives the right weight to various disorder realizations, but technically is rather demanding.

Two techniques were invented to perform the averaging of the logarithm. Historically the first was the replica trick [279,280,281,282,283]. It is based on the following observation: $\ln Z = \lim_{n \rightarrow 0} (Z^n - 1)/n$. It calls for the introduction of (integer) n identical replicas of the same disordered system, calculating the disorder average of Z^n and finally taking the limit $n \rightarrow 0$. While evaluating $\langle Z^n \rangle_{\text{dis}}$ is relatively straightforward, it is the analytical continuation from integer to real n that produces most of the problems. The procedure certainly works within perturbation theory. Extending it to non-perturbative calculations, while successful in some cases, for example, [284,285,287], has not yet been achieved in full generality.

Another method, pioneered by Efetov [289, 290], is the supersymmetric technique. It is based on the fact that the Z^{-1} of a noninteracting fermionic system is equal to the Z of a bosonic system with the same disorder potential, see Eqs. (10.11) and (2.20). Therefore, the factor Z^{-1} in $\delta \ln Z / \delta \mathbf{A} = Z^{-1} \delta Z / \delta \mathbf{A}$, where $\mathbf{A}$ is a source field such as a vector or scalar potential, may be substituted by the bosonic partition function Z . One thus introduces a fictitious bosonic replica of the fermionic system at hand and performs the disorder averaging of such a fermionboson pair. This approach has proven to be extremely powerful in deriving various non-perturbative results for disordered systems [290,291]. It is strictly limited, however, to noninteracting fermions and is incapable of incorporating the effects of electron-electron interactions. Indeed, the basic relation between the fermionic and bosonic partition functions is based on the properties of the corresponding Gaussian integrals, Eqs. (10.11) and (2.20), and can't be generalized to non-Gaussian ones.

In the Keldysh formalism, observables are given by derivatives of the generating function (and not the logarithm of the generating function!) over appropriate quantum source fields,

³In other words, there is a disorder-dependent denominator in Eq. (1.5).

which are then put to zero. More precisely, the two definitions, with and without the logarithm, coincide owing to the normalization identity $Z = 1$ in the absence of quantum sources. The Keldysh formalism thus provides an alternative to replica and supersymmetry, ensuring that $Z = 1$ by construction [292, 294, 295, 296, 297, 298]. In the diagrammatic language any proper disorder averaging technique must exclude parasitic closed loop diagrams. The replica trick does it by assigning a factor of n to such closed loops and putting $n \rightarrow 0$ at the end. The supersymmetric technique is based on the mutual cancelation of bosonic and fermionic loops. In the Keldysh technique the corresponding closed loops are nullified in view of the identity (10.29). Another fundamental advantage of the Keldysh technique is that it allows one to calculate observables under non-equilibrium conditions, while replica and supersymmetry are usually limited to the linear response at equilibrium. The purpose of this chapter is to show how

the effective field theory of a disordered electron liquid, known as the nonlinear sigma-model (NLSM), may be constructed within the Keldysh formalism.

The disorder action (14.1) brings the factor $e^{iS_{\text{dis}}[V_{\text{dis}}]}$ into the definition of the generating function (10.44). As was argued previously, it is the generating function and thus the factor $e^{iS_{\text{dis}}[V_{\text{dis}}]}$ that needs to be averaged over realizations of the disorder potential. To simplify the subsequent calculations we shall assume that the disorder correlation function $g(\mathbf{r})$, Eq. (14.2), is short-ranged and therefore may be written as $g(\mathbf{r}) = g\delta(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r})/(2\pi\nu\tau_{\text{el}})$, where τ_{el} is the elastic, or "out," scattering time defined after Eq. (14.9). With the locality assumption the disorder averaging takes the form of the Gaussian integral over $V_{\text{dis}}(\mathbf{r})$ with the local weight

$$\langle \dots \rangle_{\text{dis}} = \int \mathbf{D}[V_{\text{dis}}] \exp \left\{ -\pi\nu\tau_{\text{el}} \int d\mathbf{r} V_{\text{dis}}^2(\mathbf{r}) \right\} \dots \quad (14.17)$$

One can now perform the disorder averaging of the appropriate term in the generating function:

$$\begin{aligned} \langle e^{iS_{\text{dis}}} \rangle_{\text{dis}} &= \int \mathbf{D}[V_{\text{dis}}] e^{-\int d\mathbf{r} [\pi\nu\tau_{\text{el}} V_{\text{dis}}^2(\mathbf{r}) + iV_{\text{dis}}(\mathbf{r}) \int_{-\infty}^{+\infty} dt \bar{\psi}^a(\mathbf{r}, t) \hat{\gamma}_{ab}^{\text{cl}} \psi^b(\mathbf{r}, t)]} \\ &= \exp \left\{ -\frac{1}{4\pi\nu\tau_{\text{el}}} \int d\mathbf{r} \iint_{-\infty}^{+\infty} dt dt' [\bar{\psi}^a(\mathbf{r}, t) \psi^a(\mathbf{r}, t)] [\bar{\psi}^b(\mathbf{r}, t') \psi^b(\mathbf{r}, t')] \right\}, \end{aligned} \quad (14.18)$$

where $a, b = 1, 2$ and summations over all repeated indices are assumed. Grassmann fields in the exponent may be rearranged as (notice the sign change) $[\bar{\psi}^a(\mathbf{r}, t) \psi^a(\mathbf{r}, t)] [\bar{\psi}^b(\mathbf{r}, t') \psi^b(\mathbf{r}, t')] = -[\bar{\psi}^a(\mathbf{r}, t) \psi^b(\mathbf{r}, t')] [\bar{\psi}^b(\mathbf{r}, t') \psi^a(\mathbf{r}, t)]$. One can employ now the Hubbard-Stratonovich transformation with the matrix-valued field $\hat{Q} = Q_{tt'}^{ab}(\mathbf{r})$ to decouple the (time nonlocal) four-fermion term as ⁴

$$\begin{aligned} &\exp \left\{ \frac{1}{4\pi\nu\tau_{\text{el}}} \int d\mathbf{r} \iint_{-\infty}^{+\infty} dt dt' [\bar{\psi}^a(\mathbf{r}, t) \psi^b(\mathbf{r}, t')] [\bar{\psi}^b(\mathbf{r}, t') \psi^a(\mathbf{r}, t)] \right\} \\ &= \int \mathbf{D}[\hat{Q}] e^{-\frac{\pi\nu}{4\tau_{\text{el}}} \text{Tr}\{\hat{Q}^2\} - \frac{1}{2\tau_{\text{el}}} \int d\mathbf{r} \iint_{-\infty}^{+\infty} dt dt' Q_{tt'}^{ab}(\mathbf{r}) \bar{\psi}^a(\mathbf{r}, t) \psi^b(\mathbf{r}, t')} } \end{aligned} \quad (14.19)$$

where $\hat{Q}$ is a Hermitian matrix in the Keldysh as well as in the time space, that is, $Q_{tt'}^{ab} = [Q_{t't}^{ba}]^*$. Here the trace of $\hat{Q}^2$ implies summation over the matrix indices as well as time and spatial integrations,

⁴ Here we do not keep track of the time-reversal symmetry, i.e. the fact that the Hamiltonian is a real symmetric operator. As a result, the following considerations are restricted to the case where the time-reversal invariance is broken by, e.g. an external magnetic field (complex Hermitian Hamiltonian). This is the so-called unitary symmetry class. The orthogonal class, i.e. the one where the time-reversal symmetry is present, is considered in Section 14.7.

$$\text{Tr} \{ \hat{Q}^2 \} = \int d\mathbf{r} \int \int_{-\infty}^{+\infty} dt dt' \sum_{a,b=1}^2 Q_{tt'}^{ab}(\mathbf{r}) Q_{t't}^{ba}(\mathbf{r}) \quad (14.20)$$

As a result, one has traded the initial functional integral over the static field $V_{\text{dis}}(\mathbf{r})$ for the functional integral over the dynamic Hermitian matrix field $\hat{Q}_{tt'}^{ab}(\mathbf{r})$. At first glance, it does not strike as a terribly bright idea. Nevertheless, there is a great simplification hidden in this procedure. The advantage is that the disorder potential, being δ -correlated, is a rapidly oscillating function. On the other hand, as shown in what follows, the $\hat{Q}$ -matrix field is slow (both in space and time). It thus represents the true macroscopic (or hydrodynamic) degrees of freedom of the system, which are diffusively propagating modes.

The Grassmann fields now enter the action only as the following quadratic form: $\text{Tr} \left\{ \vec{\Psi} \left[\hat{G}^{-1} + \frac{i}{2\tau_{\text{el}}} \hat{Q} \right] \vec{\Psi} \right\}$, where $\hat{G}^{-1}$ is the free fermion inverse Green function (10.36) and the $\hat{Q}$ -matrix originates from the disorder averaging, Eq. (14.19). Since the action is quadratic in fermions, they may be explicitly integrated out using the rules of fermionic Gaussian integration (Eq. (10.11); cf. also Eq. (10.50)), leading to the determinant of the corresponding quadratic form, $\hat{G}^{-1} + \frac{i}{2\tau_{\text{el}}} \hat{Q}$. All of the matrices here should be understood as having 2×2 Keldysh structure along with the $N \times N$ structure in discrete time. One thus finds for the disorder-averaged generating function

$$\begin{aligned} \langle Z \rangle_{\text{dis}} &= \int \mathbf{D}[\hat{Q}] \exp\{iS[\hat{Q}]\} \\ iS[\hat{Q}] &= -\frac{\pi v}{4\tau_{\text{el}}} \text{Tr} \{ \hat{Q}^2 \} + \text{Tr} \ln \left[\hat{G}^{-1} + \frac{i}{2\tau_{\text{el}}} \hat{Q} \right] \end{aligned} \quad (14.21)$$

where the source fields are hidden in the inverse bare Green function $\hat{G}^{-1}$; see Section 14.5.

13.2.3 14.3 Nonlinear Sigma-Model

To proceed, we need to understand what configurations of the matrix-valued field $\hat{Q}$ contribute most to the functional integral (14.21). To this end we look for stationary configurations of the action $S[\hat{Q}]$ in (14.21). Taking the variation over $\hat{Q}_{tt'}(\mathbf{r})$, one obtains the stationary point equation

$$\hat{Q}_{tt'}(\mathbf{r}) = \frac{i}{\pi v} \left(\hat{G}^{-1} + \frac{i}{2\tau_{\text{el}}} \hat{Q} \right)_{tt',\mathbf{r}\mathbf{r}}^{-1} \quad (14.22)$$

where $\hat{Q}_{tt'}(\mathbf{r})$ denotes a stationary configuration of the fluctuating field $\hat{Q}_{tt'}(\mathbf{r})$. We first look for a spatially uniform and time-translationally invariant solution $\hat{Q}_{t-t'}$ of (14.22) and then consider space- and time-dependent deviations from such a solution. This strategy is adopted from the theory of magnetic systems, where one first finds a uniform static magnetized configuration and then treats spin-waves as smooth perturbations on top of such a static uniform solution. From the structure of (14.22) one expects that the stationary configuration $\hat{Q}$ possesses the same form as the fermionic self-energy (10.30) (more accurately, one expects that among possible stationary configurations there is a classical configuration that admits the causality structure (10.30)). One looks, therefore, for a solution of (14.22) in the form of the matrix

$$\hat{Q}_{t-t'} = \hat{\Lambda}_{t-t'} = \begin{pmatrix} \Lambda_{t-t'}^{\text{R}} & \Lambda_{t-t'}^{\text{K}} \\ 0 & \Lambda_{t-t'}^{\text{A}} \end{pmatrix} \quad (14.23)$$

The fact that the stationary $\hat{Q}$ -matrix is not Hermitian implies that the integration path in the space of complex matrices is distorted from staying in the subspace of Hermitian matrices to pass through the stationary matrix (14.23).

Substituting this expression into (14.22), which in the energy-momentum representation reads as $\hat{\Lambda}_\epsilon = \frac{i}{\pi\nu} \sum_{\mathbf{k}} \left(\epsilon - \xi_{\mathbf{k}} + \frac{i}{2\tau_{\text{el}}} \hat{\Lambda}_\epsilon \right)^{-1}$, with $\xi_{\mathbf{k}} \equiv k^2/2m - \epsilon_F$, one finds

$$\Lambda_\epsilon^{\text{R(A)}} = \frac{i}{\pi\nu} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\epsilon - \xi_{\mathbf{k}} + \frac{i}{2\tau_{\text{el}}} \Lambda_\epsilon^{\text{R(A)}}} = \pm 1 \quad (14.24)$$

where the way one performs momentum summation is $\sum_{\mathbf{k}} \dots = v \int d\xi_{\mathbf{k}} \dots$. The signs on the right-hand side are chosen so as to respect causality: the retarded (advanced) Green function is analytic in the entire upper (lower) half-plane of the complex energy ϵ . One has also assumed that $1/\tau_{\text{el}} \ll \epsilon_F$ to extend the energy integration to minus/plus infinity, while using constant density of states ν . The Keldysh component, as always, may be parametrized by a Hermitian distribution function: $\Lambda_\epsilon^K = \Lambda_\epsilon^{\text{R}} \circ F_\epsilon - F_\epsilon \circ \Lambda_\epsilon^{\text{A}} = 2F_\epsilon$, where the distribution function F_ϵ is not fixed by the stationary point equation (14.22) and must be determined through the boundary conditions. In equilibrium, however, F_ϵ is nothing but the thermal fermionic distribution function $F_\epsilon^{\text{eq}} = \tanh \epsilon/2T$. Finally, we have for the stationary $\hat{Q}$ -matrix configuration

$$\hat{\Lambda}_\epsilon = \begin{pmatrix} 1_\epsilon^{\text{R}} & 2F_\epsilon \\ 0 & -1_\epsilon^{\text{A}} \end{pmatrix} \quad (14.25)$$

where we have introduced the retarded and advanced unit matrices to remind us about the causality structure. Transforming back to the time representation, one finds $\Lambda_{t-t'}^{\text{R(A)}} = \pm \delta(t - t' \mp 0)$, where ∓ 0 indicates that the delta-function is shifted below (above) the main diagonal, $t = t'$. As a result, $\text{Tr}\{\hat{\Lambda}\} = 0$ and $S[\hat{\Lambda}] = 0$, as it should be, of course, for any purely classical field configuration (14.23). One should note, however, that this particular form of the saddle-point solution (14.25) is a result of the approximation that the single-particle density of states v is independent of energy. In general, it does depend on ϵ and thus the retarded (advanced) component of $\hat{\Lambda}_\epsilon$ is an analytic function of energy in the upper (lower) half-plane, which does depend on energy on the scale of the order of the Fermi energy ϵ_F . Therefore, the infinitesimally shifted delta-functions in $\Lambda_{t-t'}^{\text{R(A)}} = \pm \delta(t - t' \mp 0)$ should be understood as $\delta_{t\mp 0} = f_\pm(t)\theta(\pm t)$, where $\theta(\pm t)$ is the Heaviside step function, and $f_\pm(t)$ are functions that are highly peaked for $|t| \lesssim \epsilon_F^{-1}$ and satisfy the normalization $\int_0^{\pm\infty} dt f_\pm(t) = \pm 1$. This high-energy regularization is important to remember in calculations to avoid spurious divergences. In particular, for this reason $1_{t-t'}^{\text{R}} M_{t',t}^{\text{R}} = 0$ and $1_{t-t'}^{\text{A}} M_{t',t}^{\text{A}} = 0$, where $M_{t',t}^{\text{R(A)}}$ is an arbitrary retarded (advanced) two-point function in time space.

Now we are in a position to examine fluctuations around the stationary configuration (14.25). The fluctuations of $\hat{Q}$ fall into two general classes: (i) massive, with mass $\propto \nu/\tau_{\text{el}}$ and (ii) massless or Goldstone modes, that is, such that the action depends only on gradients or time derivatives of these degrees of freedom. The fluctuations along the massive directions can be integrated out in the Gaussian approximation and lead to insignificant renormalization of the parameters in the action. The massless, or Goldstone, modes describe diffusive motion of the electrons. Fluctuations of the $\hat{Q}$ -matrix along the massless directions may be not small and should be taken into account beyond small deviations. To this end one needs a way to parametrize a manifold of massless modes as a certain (nonlinear) constraint imposed on the allowed (i.e. massless) $\hat{Q}$ -matrices. To identify the relevant Goldstone modes, consider the first term in the action $S[\hat{Q}]$ of (14.21). The stationary configuration given by (14.25) satisfies

$$\hat{Q}^2 = \begin{pmatrix} 1_\epsilon^{\text{R}} & 0 \\ 0 & 1_\epsilon^{\text{A}} \end{pmatrix} = \hat{1}. \quad (14.26)$$

Note that $\text{Tr} \{\hat{Q}^2\} = \text{Tr} \{\hat{1}^R\} + \text{Tr} \{\hat{1}^A\} = 0$, owing to the definition of the retarded and advanced unit matrices; see Eq. (2.44). Fluctuations of $\hat{Q}$ that do not satisfy the constraint (14.26) are massive. The manifold of $\hat{Q}$ -matrix configurations that obey the nonlinear constraint (14.26) is generated by rotations of the stationary matrix $\hat{\Lambda}_\epsilon$ and may be parametrized as follows:

$$\hat{Q} = \hat{\mathcal{R}}^{-1} \circ \hat{\Lambda} \circ \hat{\mathcal{R}} \quad (14.27)$$

Indeed, if $\mathcal{R}_{tt'}(\mathbf{r}) = \mathcal{R}_{t-t'}$ is stationary and uniform, it commutes with $\hat{G}^{-1}$ and thus the rotated stationary matrix $\hat{\mathcal{R}}^{-1} \circ \hat{\Lambda} \circ \hat{\mathcal{R}}$ still satisfies the stationary point equation (14.22). The specific form of $\hat{\mathcal{R}}$ is not important at the moment and will be chosen later. The massless modes, or spin waves if one adopts the magnetic analogy, that are associated with $\hat{\mathcal{R}}_{tt'}(\mathbf{r})$ are slow functions of $t+t'$ and $\mathbf{r}$ and their gradients are small. Our goal now is to derive an effective action for the soft-mode $\hat{Q}$ -field configurations given by Eqs. (14.26) and (14.27).

To this end one substitutes Eq. (14.27) into Eq. (14.21) and cyclically permutes $\hat{\mathcal{R}}$ matrices under the trace operation. This way, one obtains $\hat{\mathcal{R}} \circ \hat{G}^{-1} \circ \hat{\mathcal{R}}^{-1} \simeq \hat{G}^{-1} + \hat{\mathcal{R}} \circ [\hat{G}^{-1}, \hat{\mathcal{R}}^{-1}] = \hat{G}^{-1} + i\hat{\mathcal{R}}\partial_t\hat{\mathcal{R}}^{-1} + i\hat{\mathcal{R}}\mathbf{v}_F\nabla_{\mathbf{r}}\hat{\mathcal{R}}^{-1}$, where one uses the explicit form of the bare inverse Green function (10.36) and linearizes the dispersion relation near the Fermi energy $\xi_{\mathbf{k}} = k^2/2m - \epsilon_F \approx \mathbf{v}_F\mathbf{k} \rightarrow -i\mathbf{v}_F\nabla_{\mathbf{r}}$. As a result, the desired action acquires the form

$$iS[\hat{Q}] = \text{Tr} \ln \left[\hat{G}^{-1} + \frac{i}{2\tau_{\text{el}}} \hat{\Lambda} + i\hat{\mathcal{R}}\partial_t\hat{\mathcal{R}}^{-1} + i\hat{\mathcal{R}}\mathbf{v}_F\nabla_{\mathbf{r}}\hat{\mathcal{R}}^{-1} \right] \quad (14.28)$$

where we omit the circular multiplication sign for brevity. Let us define now the impurity dressed Green function matrix $\hat{\mathcal{G}}$ as the solution of the following Dyson equation:

$$\left(\hat{G}^{-1} + \frac{i}{2\tau_{\text{el}}} \hat{\Lambda} \right) \hat{\mathcal{G}} = \hat{1} \quad (14.29)$$

It is indeed straightforward to see that $\hat{\Sigma} = -i\hat{\Lambda}/2\tau_{\text{el}}$ is the self-energy matrix (cf. Eq. (14.3)). For subsequent calculations it is convenient to write $\hat{\mathcal{G}}$, reflecting its causality structure, as

$$\hat{\mathcal{G}} = \begin{pmatrix} \mathcal{G}^R & \mathcal{G}^K \\ 0 & \mathcal{G}^A \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\mathcal{G}^R[\hat{1} + \hat{\Lambda}] + \frac{1}{2}\mathcal{G}^A[\hat{1} - \hat{\Lambda}] \quad (14.30)$$

with retarded, advanced, and Keldysh components given by

$$\mathcal{G}^{R(A)}(\mathbf{k}, \epsilon) = [\epsilon - \xi_{\mathbf{k}} \pm i/2\tau_{\text{el}}]^{-1}, \quad \mathcal{G}^K(\mathbf{k}, \epsilon) = \mathcal{G}^R(\mathbf{k}, \epsilon)F_\epsilon - F_\epsilon\mathcal{G}^A(\mathbf{k}, \epsilon) \quad (14.31)$$

Employing now the fact that $\text{Tr} \ln \hat{\mathcal{G}} = 0$ (cf. Eq. (10.29)), one may rewrite the action (14.28) as

$$\begin{aligned} iS[\hat{Q}] &= \text{Tr} \ln \left[\hat{1} + i\hat{\mathcal{G}}\hat{\mathcal{R}}\partial_t\hat{\mathcal{R}}^{-1} + i\hat{\mathcal{G}}\hat{\mathcal{R}}\mathbf{v}_F\nabla_{\mathbf{r}}\hat{\mathcal{R}}^{-1} \right] \\ &\approx i \text{Tr} \left\{ \hat{\mathcal{G}}\hat{\mathcal{R}}\partial_t\hat{\mathcal{R}}^{-1} \right\} + \frac{1}{2} \text{Tr} \left\{ \hat{\mathcal{G}} \left(\hat{\mathcal{R}}\mathbf{v}_F\nabla_{\mathbf{r}}\hat{\mathcal{R}}^{-1} \right) \hat{\mathcal{G}} \left(\hat{\mathcal{R}}\mathbf{v}_F\nabla_{\mathbf{r}}\hat{\mathcal{R}}^{-1} \right) \right\} \end{aligned} \quad (14.32)$$

where in the second line we have expanded the logarithm in gradients of the rotation matrices $\hat{\mathcal{R}}$ to linear order in $\partial_t\hat{\mathcal{R}}^{-1}$ and to quadratic order in $\nabla_{\mathbf{r}}\hat{\mathcal{R}}^{-1}$. (The term linear in the spatial gradient vanishes due to the angular integration.) Since $\sum_{\mathbf{k}} \hat{\mathcal{G}}(\mathbf{k}, \epsilon) = -i\pi\nu\hat{\Lambda}_\epsilon$, which directly follows from the stationary point equation (14.22), one finds for the ∂_t term in the effective action (14.28) $i \text{Tr} \left\{ \hat{\mathcal{G}}\hat{\mathcal{R}}\partial_t\hat{\mathcal{R}}^{-1} \right\} = \pi\nu \text{Tr} \left\{ \hat{\Lambda}\hat{\mathcal{R}}\partial_t\hat{\mathcal{R}}^{-1} \right\} = \pi\nu \text{Tr} \left\{ \partial_t\hat{\mathcal{R}}^{-1}\hat{\Lambda}\hat{\mathcal{R}} \right\} = \pi\nu \text{Tr} \left\{ \partial_t\hat{Q} \right\}$, where $\text{Tr} \left\{ \partial_t\hat{Q} \right\} = \int dt \partial_t \text{Tr} \left\{ \hat{Q}_{tt'} \right\} \Big|_{t'=t}$. For the $\nabla_{\mathbf{r}}$ term, one finds $-\frac{1}{4}\pi\nu D \text{Tr} \left\{ (\nabla_{\mathbf{r}}\hat{Q})^2 \right\}$, where $D = v_F^2\tau_{\text{el}}/d$ is the diffusion constant and d is the spatial dimensionality. ⁵

Finally, one finds for the action of the soft-mode configurations [296, 297, 298]

$$iS[\hat{Q}] = -\frac{\pi v}{4} \text{Tr} \left\{ D \left(\nabla_{\mathbf{r}} \hat{Q} \right)^2 - 4 \partial_t \hat{Q} \right\} \quad (14.33)$$

Notice that, since we deal with the short-ranged potential, $\tau_{\text{el}} = \tau_{\text{tr}}$ and therefore the diffusion coefficient D is in agreement with Eq. (14.10). Should we work with a generic disorder (14.2), we would arrive at the action (14.33) with D given by Eq. (14.10). Despite its simple appearance, the action (14.33) is highly nonlinear owing to the constraint $\hat{Q}^2 = \hat{1}$. The theory specified by Eqs. (14.26) and (14.33) is called the matrix nonlinear sigma-model. The name came from the theory of magnetism, where the unit-length vector $\vec{\sigma}(\mathbf{r})$ represents a local classical spin rotating over the sphere $\vec{\sigma}^2 = 1$.

13.2.4 14.4 Stationary Point and Fluctuations

As a first step, one needs to determine the most probable (stationary) configuration, $\hat{Q}_{t_1 t_2}(\mathbf{r})$, on the soft-mode manifold defined by the nonlinear constraint (14.26). In a time-independent and spatially uniform case we already know the answer: it is $\hat{Q} = \hat{\Lambda}$, Eq. (14.25). Here we look for a stationary configuration in the presence of weak spatial and temporal gradients. To this end, one may parametrize deviations from $\hat{Q}_{t_1 t_2}(\mathbf{r})$ as $\hat{Q} = \hat{\mathcal{R}}^{-1} \circ \hat{Q} \circ \hat{\mathcal{R}}$ and choose $\hat{\mathcal{R}} = \exp(\hat{\mathcal{W}}/2)$, where $\hat{\mathcal{W}}_{t_1 t_2}(\mathbf{r})$ is a generator of rotations. Expanding to first order in $\hat{\mathcal{W}}$, one finds $\hat{Q} = \hat{Q} - [\hat{\mathcal{W}}, \hat{Q}]/2$. One may now substitute such a $\hat{Q}$ -matrix into the action (14.33) and require that the terms linear in the generators $\hat{\mathcal{W}}$ vanish. This leads to the stationary point equation for $\hat{Q}$. For the spatial gradient term in (14.33) one obtains $\frac{1}{2} \text{Tr} \left\{ \hat{\mathcal{W}} \nabla_{\mathbf{r}} D \left[\left(\nabla_{\mathbf{r}} \hat{Q} \right) \hat{Q} - \hat{Q} \nabla_{\mathbf{r}} \hat{Q} \right] \right\} = -\text{Tr} \left\{ \hat{\mathcal{W}} \nabla_{\mathbf{r}} D \left(\hat{Q} \nabla_{\mathbf{r}} \hat{Q} \right) \right\}$, where one has employed $\nabla_{\mathbf{r}} \hat{Q} \circ \hat{Q} + \hat{Q} \circ \nabla_{\mathbf{r}} \hat{Q} = 0$, since $\hat{Q}^2 = \hat{1}$. For the second term one finds $\text{Tr} \left\{ \hat{\mathcal{W}}_{t_1 t_2} (\partial_{t_1} + \partial_{t_2}) \hat{Q}_{t_1 t_2} \right\} = \text{Tr} \left(\hat{\mathcal{W}} \left\{ \partial_t, \hat{Q} \right\} \right)$, where the curly brackets denote the anti-commutator. Demanding that the linear term in $\hat{\mathcal{W}}$ vanishes, one obtains

5 Indeed, for the product of the Green functions one uses

$$\sum_{\mathbf{k}} \mathcal{G}^{\text{R}}(\mathbf{k}, \epsilon) \mathbf{v}_{\text{F}}^{\mu} \mathcal{G}^{\text{A}}(\mathbf{k}, \epsilon) \mathbf{v}_{\text{F}}^{\nu} = v v_{\text{F}}^2 \int \frac{d\xi_{\mathbf{k}}}{(\epsilon - \xi_{\mathbf{k}} + i/2\tau_{\text{el}})(\epsilon - \xi_{\mathbf{k}} - i/2\tau_{\text{el}})} \int d\Omega_{\mathbf{k}} \mathbf{n}_{\mathbf{k}}^{\mu} \mathbf{n}_{\mathbf{k}}^{\nu} = v v_{\text{F}}^2 2\pi\tau_{\text{el}} \frac{\delta_{\mu\nu}}{d}$$

where $\mathbf{n}_{\mathbf{k}}$ is the unit vector and $\int d\Omega_{\mathbf{k}}$ is the normalized integral over the unit sphere in d dimensions. The corresponding RR and AA terms vanish upon $\xi_{\mathbf{k}}$ integration. Employing Eq. (14.30) along with $\hat{\Lambda}^2 = \hat{1}$ and $\hat{\mathcal{R}} \nabla_{\mathbf{r}} \hat{\mathcal{R}}^{-1} = -\nabla_{\mathbf{r}} \hat{\mathcal{R}} \hat{\mathcal{R}}^{-1}$, one then notices that

$$\text{Tr} \left\{ [\hat{1} + \hat{\Lambda}] \left(\hat{\mathcal{R}} \nabla_{\mathbf{r}} \hat{\mathcal{R}}^{-1} \right) [\hat{1} - \hat{\Lambda}] \left(\hat{\mathcal{R}} \nabla_{\mathbf{r}} \hat{\mathcal{R}}^{-1} \right) \right\} = -\frac{1}{2} \text{Tr} \left\{ \left[\nabla_{\mathbf{r}} \left(\hat{\mathcal{R}}^{-1} \hat{\Lambda} \hat{\mathcal{R}} \right) \right]^2 \right\} = -\frac{1}{2} \text{Tr} \left\{ \left(\nabla_{\mathbf{r}} \hat{Q} \right)^2 \right\}$$

$$\nabla_{\mathbf{r}} \left(D \hat{Q} \circ \nabla_{\mathbf{r}} \hat{Q} \right) - \left\{ \partial_t, \hat{Q} \right\} = 0. \quad (14.34)$$

In the context of superconductivity this equation is known as the Usadel equation [299]. We'll keep this name even for the normal metal considered here.

Let us look for a solution of the Usadel equation in the subspace of "classical," that is, having causality structure, configurations. We then put $\hat{Q} = \hat{\Lambda}$, Eq. (14.25). Since the lower-left component is zero by causality, the condition $\hat{Q}^2 = 1$ dictates ± 1 on the diagonal. As a result, the only yet unspecified component is the upperright distribution function $F_{t_1 t_2}(\mathbf{r})$. Therefore, in this case the Usadel equation is reduced to the single equation for the distribution function $F_{t_1 t_2}(\mathbf{r})$. Substituting $\hat{\Lambda}$ (14.25) into Eq. (14.34) and performing a Wigner transformation,

$$F_{t_1 t_2}(\mathbf{r}) = \int \frac{d\epsilon}{2\pi} F_\epsilon(\mathbf{r}, t) e^{-i\epsilon(t_1 - t_2)}, \quad t = \frac{t_1 + t_2}{2}, \quad (14.35)$$

one obtains

$$\nabla_{\mathbf{r}} [D(\mathbf{r}) \nabla_{\mathbf{r}} F_\epsilon(\mathbf{r}, t)] - \partial_t F_\epsilon(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (14.36)$$

where we allowed for a (smooth) spatial dependence of the diffusion constant. This is the already familiar diffusion kinetic equation (14.10) for the isotropic component of the fermionic distribution function. Note that it is the same equation for any energy ϵ and different energies do not "talk" to each other, which is natural for a noninteracting system. In the presence of interactions, the equation acquires the collision integral on the right-hand side that mixes different energies; see Section 16.5. It is worth mentioning that the elastic scattering does not show up in the collision integral. It was already fully taken into account in the derivation of the Usadel equation and went into the diffusion term.

We see now that the kinetic equation (14.10) describes only the stationary configuration $\hat{Q}_{tt'}(\mathbf{r}) = \hat{\Lambda}_{tt'}$ of the nonlinear sigma-model and does not account for the fluctuations around it. Discussing the fluctuations, we restrict ourselves to the Goldstone (soft) modes fluctuations, which satisfy $\hat{Q}^2 = \hat{1}$ and neglect all massive modes, which deviate away from this manifold. To parametrize such soft modes we first notice that (cf. Eq. (10.34))

$$\hat{\Lambda} = \hat{\mathcal{U}}^{-1} \circ \hat{\sigma}_3 \circ \hat{\mathcal{U}}, \quad \hat{\mathcal{U}} = \begin{pmatrix} 1 & F \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = e^{\hat{\sigma}_+ F}, \quad (14.37)$$

where $\hat{\sigma}_3$ is the third Pauli matrix acting in the Keldysh subspace, which has 1_ϵ^R and -1_ϵ^A on its main diagonal; see Eq. (14.25). The distribution function $F_{tt'}(\mathbf{r})$ is a solution of the saddle-point equation (14.36). The soft-mode fluctuations, obeying $\hat{Q}^2 = \hat{1}$, may be obtained by $\hat{\sigma}_3 \rightarrow \hat{\mathcal{R}}^{-1} \hat{\sigma}_3 \hat{\mathcal{R}}$, where $\hat{\mathcal{R}}_{t_1 t_2}(\mathbf{r})$ is a rotation matrix, which is convenient to write through the rotation generators as $\hat{\mathcal{R}} = e^{\hat{\mathcal{W}}/2}$. As a result, all proper $\hat{Q}$ -matrices may be parametrized as

$$\hat{Q} = \hat{\mathcal{U}}^{-1} \circ e^{-\hat{\mathcal{W}}/2} \circ \hat{\sigma}_3 \circ e^{\hat{\mathcal{W}}/2} \circ \hat{\mathcal{U}}. \quad (14.38)$$

To provide a nontrivial rotation of the $\hat{\sigma}_3$ matrix, the rotation generator $\hat{\mathcal{W}}$ must be a purely off-diagonal matrix in the Keldysh space. As a result, the rotation generator may be written as

$$\hat{\mathcal{W}}_{tt'}(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} 0 & d_{tt'}^{\text{cl}}(\mathbf{r}) \\ d_{tt'}^{\text{q}}(\mathbf{r}) & 0 \end{pmatrix} \quad (14.39)$$

where $d_{tt'}^{\text{cl}}(\mathbf{r})$ and $d_{tt'}^{\text{q}}(\mathbf{r})$ are two independent two-point functions in time space. As we shall see, these two functions serve as the classical and quantum components of the $\hat{Q}$ -matrix field, respectively. The classical component $d_{tt'}^{\text{cl}}(\mathbf{r})$ provides deviations of the distribution function F from its stationary value, while the quantum component $d_{tt'}^{\text{q}}(\mathbf{r})$ provides a source to differentiate over. In particular, one may check that $S[d^{\text{cl}}, d^{\text{q}} = 0] = 0$. From the fact that $d_{tt'}^{\text{cl}}$ describes fluctuations of the Hermitian distribution matrix $F_{tt'}$, while $d_{tt'}^{\text{q}}$ is the corresponding source field, it follows that both $d_{tt'}^{\text{cl}}(\mathbf{r})$ and $d_{tt'}^{\text{q}}(\mathbf{r})$ are Hermitian matrices in time space. One thus understands the functional integration over $\hat{Q}_{tt'}(\mathbf{r})$ in Eq. (14.21) as an integration over two mutually independent Hermitian matrices in the time domain, $d_{tt'}^{\text{cl}}(\mathbf{r})$ and $d_{tt'}^{\text{q}}(\mathbf{r})$.

One may expand now the action (14.33) in powers of $d_{tt'}^{\text{cl}}(\mathbf{r})$ and $d_{tt'}^{\text{q}}(\mathbf{r})$. Since $\hat{Q}_{tt'}$ was chosen to be a stationary configuration, the expansion starts from second order. If the stationary distribution F is spatially uniform, so $\nabla_{\mathbf{r}} \hat{\mathcal{U}} = 0$, one obtains in the second order

$$iS [d^{\text{cl}}, d^{\text{q}}] = -\frac{\pi v}{2} \int d\mathbf{r} \int dt \int dt' d_{tt'}^{\text{q}}(\mathbf{r}) [-D\nabla_{\mathbf{r}}^2 + \partial_t + \partial_{t'}] d_{t't}^{\text{cl}}(\mathbf{r}) \quad (14.40)$$

The quadratic form may be diagonalized by going to the energy-momentum representation according to

$$\hat{\mathcal{W}}_{\epsilon\epsilon'}(\mathbf{q}) = \int d\mathbf{r} \int dt \int dt' \hat{\mathcal{W}}_{tt'}(\mathbf{r}) e^{i\epsilon t - i\epsilon' t'} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} \quad (14.41)$$

which brings the quadratic action (14.40) into the diagonal form

$$iS [d^{\text{cl}}, d^{\text{q}}] = -\frac{\pi v}{2} \sum_{\mathbf{q}, \epsilon, \epsilon'} d_{\epsilon\epsilon'}^{\text{q}}(-\mathbf{q}) [D\mathbf{q}^2 + i\epsilon - i\epsilon'] d_{\epsilon'\epsilon}^{\text{cl}}(\mathbf{q}) \quad (14.42)$$

As a result, the Gaussian propagators of the $\hat{Q}$ -matrix fluctuations are

$$\begin{aligned} \langle d_{\epsilon_1\epsilon_2}^{\text{cl}}(\mathbf{q}) d_{\epsilon_3\epsilon_4}^{\text{q}}(-\mathbf{q}) \rangle_{\mathcal{W}} &= -\frac{2}{\pi v} \frac{\delta_{\epsilon_2\epsilon_3} \delta_{\epsilon_1\epsilon_4}}{Dq^2 - i\omega} \equiv -\frac{2}{\pi v} \delta_{\epsilon_2\epsilon_3} \delta_{\epsilon_1\epsilon_4} \mathcal{D}^{\text{R}}(\mathbf{q}, \omega) \\ \langle d_{\epsilon_1\epsilon_2}^{\text{q}}(\mathbf{q}) d_{\epsilon_3\epsilon_4}^{\text{cl}}(-\mathbf{q}) \rangle_{\mathcal{W}} &= -\frac{2}{\pi v} \frac{\delta_{\epsilon_2\epsilon_3} \delta_{\epsilon_1\epsilon_4}}{Dq^2 + i\omega} \equiv -\frac{2}{\pi v} \delta_{\epsilon_2\epsilon_3} \delta_{\epsilon_1\epsilon_4} \mathcal{D}^{\text{A}}(\mathbf{q}, \omega) \end{aligned} \quad (14.43)$$

where $\omega \equiv \epsilon_1 - \epsilon_2 = \epsilon_4 - \epsilon_3$ and the object

$$\mathcal{D}^{\text{R(A)}}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{Dq^2 \mp i\omega} \quad (14.44)$$

is called the diffuson. As we shall see, it describes the diffusive motion of the electron density fluctuations at small frequency $\omega \ll 1/\tau_{\text{el}}$ and small wavenumbers $Dq^2 \ll 1/\tau_{\text{el}}$, that is, $q \ll 1/l_{\text{el}}$, where the elastic mean free path is $l_{\text{el}} = \sqrt{D\tau_{\text{el}}} \sim v_{\text{F}}\tau_{\text{el}}$.

If the stationary-point distribution function $F_{\epsilon}(\mathbf{r})$ is spatially nonuniform, there is an additional quantum-quantum term in the quadratic action of the form

$$i\tilde{S} [d^{\text{q}}] = -\frac{\pi\nu D}{2} \int d\mathbf{r} \sum_{\epsilon, \epsilon'} d_{\epsilon\epsilon'}^{\text{q}}(\mathbf{r}) (\nabla_{\mathbf{r}} F_{\epsilon'}) d_{\epsilon'\epsilon}^{\text{q}}(\mathbf{r}) (\nabla_{\mathbf{r}} F_{\epsilon}) \quad (14.45)$$

This term generates a nonzero Keldysh correlation function, which is given by

$$\langle d_{\epsilon_1\epsilon_2}^{\text{cl}}(\mathbf{r}) d_{\epsilon_2\epsilon_1}^{\text{cl}}(\mathbf{r}') \rangle_{\mathcal{W}} = -\frac{4D}{\pi v} \int d\mathbf{r}'' \mathcal{D}^{\text{R}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'', \omega) (\nabla_{\mathbf{r}''} F_{\epsilon_1}) (\nabla_{\mathbf{r}''} F_{\epsilon_2}) \mathcal{D}^{\text{A}}(\mathbf{r}'', \mathbf{r}', \omega) \quad (14.46)$$

where $\omega \equiv \epsilon_1 - \epsilon_2$. Unlike the usual bosons, the matrix field correlator $\langle d^{\text{cl}} d^{\text{cl}} \rangle_{\mathcal{W}}$ exists only out of equilibrium. Indeed, being proportional to $(\nabla_{\mathbf{r}} F_{\epsilon})^2$, it scales as a square of the applied voltage. Nevertheless, it may show up even in linear response problems, such as, for example, mesoscopic conductance fluctuations, Section 15.3. For the use of this term for interaction effects in the shot-noise power, see [300]. Notice that, in accordance with the causality structure, there can not be a classical-classical, that is, $\sim d^{\text{cl}} d^{\text{cl}}$, term in the action, and therefore $\langle d^{\text{q}} d^{\text{q}} \rangle_{\mathcal{W}} = 0$.

An alternative interpretation of the quantum-quantum part of the action (14.45) is found by doing Wigner, $d_{\epsilon\epsilon'}^{\text{q}}(\mathbf{r}) \rightarrow d_{\epsilon}^{\text{q}}(\mathbf{r}, t)$, and Hubbard-Stratonovich transformations, $i\tilde{S} \rightarrow -(\pi\nu/2) \int d\mathbf{r} dt \sum_{\epsilon} d_{\epsilon}^{\text{q}}(\mathbf{r}, t) \xi_{\epsilon}(\mathbf{r}, t)$, where $\xi_{\epsilon}(\mathbf{r}, t)$ is a Gaussian stochastic field with the correlation function (14.15). Together with the diffuson action (14.40) this leads (upon integration over $d_{\epsilon}^{\text{q}}(\mathbf{r}, t)$) to the Boltzmann-Langevin stochastic kinetic equation (14.16) for the Wigner transform of the classical component of the distribution function, $d_{\epsilon\epsilon'}^{\text{cl}}(\mathbf{r}) \rightarrow F_{\epsilon}(\mathbf{r}, t)$.

The higher-order terms in the expansion of the action (14.33) in powers of $d_{tt'}^{\text{cl}}(\mathbf{r})$ and $d_{tt'}^{\text{q}}(\mathbf{r})$ describe mutual interactions of the diffuson modes. Such nonlinear corrections to the classical linear diffusion are consequences of the quantum nature of the electron motion. They may eventually lead to the Anderson localization [301] of the density fluctuations, instead of the diffusive spreading. The localization phenomenon is due to generation of the effective mass for the d -fluctuations, which causes exponential decay of the correlations. This effect is essentially nonperturbative. On the level of the perturbation theory the nonlinear interactions of the diffusive modes lead to singular weak localization corrections to the diffusion constant D [302, 303, 304, 305]. In the unitary symmetry class we have been working with so far, such corrections start from the two-loop level [302, 306]. We shall discuss them in Section 14.8 in the framework of the orthogonal symmetry class, where the weak-localization corrections are present already in one loop.

13.2.5 14.5 Sources and External Fields

One may now incorporate the source terms S_V and S_A , Eqs. (10.39) and (10.43), into the fermionic action: $\text{Tr} \left\{ \vec{\Psi} \left[\hat{G}^{-1} + \frac{i}{2\tau_{\text{el}}} \hat{Q} - \hat{V} - \mathbf{v}_F \hat{\mathbf{A}} \right] \vec{\Psi} \right\}$, where, for example, $\hat{V} = V^\alpha \hat{\gamma}^\alpha$ and $\alpha = \text{cl}, \text{q}$. After fermionic Gaussian integration over $\vec{\psi}$ and $\vec{\Psi}$ one finds for the generating function (cf. Eq. (14.21)),

$$\langle Z[\mathbf{A}, V] \rangle_{\text{dis}} = \int \mathbf{D}[\hat{Q}] \exp \{ iS[\hat{Q}, \mathbf{A}, V] \}$$

$$iS[\hat{Q}, \mathbf{A}, V] = -\frac{\pi v}{4\tau_{\text{el}}} \text{Tr} \{ \hat{Q}^2 \} + \text{Tr} \ln \left[\hat{G}^{-1} + \frac{i}{2\tau_{\text{el}}} \hat{Q} - \hat{V} - \mathbf{v}_F \hat{\mathbf{A}} \right] \quad (14.47)$$

We now expand the trace of the logarithm in both gradients of $\hat{Q}$ and in the source fields $\hat{V}$ and $\hat{\mathbf{A}}$. The latter assumes that the source fields are small on the scale of the elastic scattering rate and do not strongly disturb the stationary configuration (14.25) (see Chapter 16 for more discussions of this point). Then, similarly to Eq. (14.33), one finds from Eq. (14.47)

$$iS[\hat{Q}, \mathbf{A}, V] = \frac{iv}{2} \text{Tr} \{ \hat{V} \hat{\sigma}_1 \hat{V} \} - \frac{\pi v}{4} \text{Tr} \left\{ D \left(\hat{\partial}_r \hat{Q} \right)^2 - 4\partial_t \hat{Q} - 4i\hat{V} \hat{Q} \right\}, \quad (14.48)$$

where $\hat{\sigma}_1$ is the first Pauli matrix acting in Keldysh space, and we have introduced the gauge-invariant space derivative

$$\hat{\partial}_r \hat{Q} = \nabla_r \hat{Q} + i[\hat{\mathbf{A}}, \hat{Q}]. \quad (14.49)$$

A few comments are in order regarding Eq. (14.48). First, it is still restricted to the manifold of $\hat{Q}$ -matrices satisfying $\hat{Q}^2 = \hat{1}$. The second trace on the right-hand side of Eq. (14.48), containing $\hat{Q}$, originates from the $\sum_{\mathbf{k}} \mathbf{v}_F \mathcal{G}^R \mathbf{v}_F \mathcal{G}^A$ and $\sum_{\mathbf{k}} \mathcal{G}^{R(A)}$ combinations in the expansion of the logarithm. On the other hand, the first term on the right-hand side of Eq. (14.48) originates from $\sum_{\mathbf{k}} \mathcal{G}^R \mathcal{G}^R$ and $\sum_{\mathbf{k}} \mathcal{G}^A \mathcal{G}^A$ combinations. These terms should be retained since the matrix $V^\alpha (\epsilon - \epsilon') \hat{\gamma}^\alpha$ is not restricted to the $1/\tau_{\text{el}}$ shell near the Fermi energy. This is so because the scalar potential shifts the entire electronic band and not only the energy shell $|\epsilon|, |\epsilon'| < 1/\tau_{\text{el}}$. Thus, it is essential to follow the variations of the electron spectrum all the way down to the bottom of the band to respect the charge neutrality.

Equations (14.48) and (14.49) generalize the sigma-model action (14.33) for the presence of the scalar and vector potentials.⁶

⁶ Here we provide some technical details needed to derive the effective action (14.48) from Eq. (14.47). The gradient expansion of the logarithm in Eq. (14.47) uses a $\hat{Q}$ -matrix in the form of (14.27) and leads, in analogy with Eq. (14.28), to

$$iS = \text{Tr} \ln \left[\hat{1} + i\hat{\mathcal{G}}\hat{\mathcal{R}}\partial_t\hat{\mathcal{R}}^{-1} + i\hat{\mathcal{G}}\hat{\mathcal{R}}\mathbf{v}_F\nabla_{\mathbf{r}}\hat{\mathcal{R}}^{-1} - \hat{\mathcal{G}}\hat{\mathcal{R}}\hat{V}\hat{\mathcal{R}}^{-1} - \hat{\mathcal{G}}\hat{\mathcal{R}}\mathbf{v}_F\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathcal{R}}^{-1} \right] \quad (14.50)$$

Expanding this expression to linear order in $\hat{\mathcal{G}}\hat{\mathcal{R}}\partial_t\hat{\mathcal{R}}^{-1}$ and quadratic order in $\hat{\mathcal{G}}\hat{\mathcal{R}}\mathbf{v}_F\nabla_{\mathbf{r}}\hat{\mathcal{R}}^{-1}$, one reproduces Eq. (14.32), which leads eventually to the action (14.33). To linear order in $\hat{V}$ and $\hat{\mathbf{A}}$ one finds

$$iS_1[\hat{Q}, \mathbf{A}, V] = -\text{Tr} \left\{ \hat{\mathcal{G}}\hat{\mathcal{R}}\hat{V}\hat{\mathcal{R}}^{-1} \right\} + i\text{Tr} \left\{ \hat{\mathcal{G}} \left(\hat{\mathcal{R}}\mathbf{v}_F\nabla_{\mathbf{r}}\hat{\mathcal{R}}^{-1} \right) \hat{\mathcal{G}} \left(\hat{\mathcal{R}}\mathbf{v}_F\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathcal{R}}^{-1} \right) \right\}. \quad (14.51)$$

Proceeding with the first term on the right-hand side in the same way as with the ∂_t term, one finds $-\text{Tr} \left\{ \hat{\mathcal{G}}\hat{\mathcal{R}}\hat{V}\hat{\mathcal{R}}^{-1} \right\} = i\pi\nu \text{Tr} \left\{ \hat{\Lambda}\hat{\mathcal{R}}\hat{V}\hat{\mathcal{R}}^{-1} \right\} = i\pi\nu \text{Tr} \left\{ \hat{V}\hat{Q} \right\}$. For the second term, employing Eq. (14.30) for the disorder dressed Green function and retaining retarded-advanced products of the Green functions $\sum_{\mathbf{k}} \mathcal{G}^R(\mathbf{k}, \epsilon) \mathbf{v}_F \mathcal{G}^A(\mathbf{k}, \epsilon) \mathbf{v}_F = 2\pi\nu D$, one finds

$$-\pi\nu D \text{Tr} \left\{ \left(\hat{\mathcal{R}}^{-1}\nabla_{\mathbf{r}}\hat{\mathcal{R}} + \hat{\mathcal{R}}^{-1}\hat{\Lambda}\hat{\mathcal{R}}\nabla_{\mathbf{r}}\hat{\mathcal{R}}^{-1}\hat{\Lambda}\hat{\mathcal{R}} \right) \hat{\mathbf{A}} \right\} = -\pi\nu D \text{Tr} \left\{ \hat{Q}\nabla_{\mathbf{r}}\hat{Q}\hat{\mathbf{A}} \right\},$$

where $\hat{\mathcal{R}}\nabla_{\mathbf{r}}\hat{\mathcal{R}}^{-1} = -\nabla_{\mathbf{r}}\hat{\mathcal{R}}\hat{\mathcal{R}}^{-1}$ was used. All together it gives for Eq. (14.51)

$$iS_1[\hat{Q}, \mathbf{A}, V] = i\pi\nu \text{Tr} \left\{ \hat{V}\hat{Q} \right\} - i\pi\nu D \text{Tr} \left\{ \hat{Q}\nabla_{\mathbf{r}}\hat{Q}\hat{\mathbf{A}} \right\}. \quad (14.52)$$

In the second order in $\hat{V}$ and $\hat{\mathbf{A}}$ one finds

$$iS_2[\hat{Q}, \mathbf{A}, V] = -\frac{1}{2} \text{Tr} \left\{ \hat{\mathcal{G}}\hat{V}\hat{\mathcal{G}}\hat{V} \right\} - \frac{1}{2} \text{Tr} \left\{ \hat{\mathcal{G}} \left(\hat{\mathcal{R}}\mathbf{v}_F\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathcal{R}}^{-1} \right) \hat{\mathcal{G}} \left(\hat{\mathcal{R}}\mathbf{v}_F\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathcal{R}}^{-1} \right) \right\} \quad (14.53)$$

Note that in the term $\sim \hat{V}^2$ we took $\hat{\mathcal{R}} = \hat{\mathcal{R}}^{-1} = \hat{1}$. This is because the $\hat{V}^2$ contribution represents essentially static compressibility of the electron gas, which is determined by the entire energy band, while the $\hat{\mathcal{R}}$ and $\hat{\mathcal{R}}^{-1}$ matrices deviate from the unit matrix only in the narrow energy shell around the Fermi energy. Thus, for the first term on the right-hand side of Eq. (14.53) one can write $\text{Tr} \left\{ \hat{\mathcal{G}}\hat{V}\hat{\mathcal{G}}\hat{V} \right\} = V^\alpha \Upsilon^{\alpha\beta} V^\beta$, where

$$\Upsilon^{\alpha\beta} = \sum_{\mathbf{k}} \int \frac{d\epsilon}{2\pi} \text{Tr} \left\{ \hat{\mathcal{G}}(\mathbf{k}, \epsilon) \hat{\gamma}^\alpha \hat{\mathcal{G}}(\mathbf{k}, \epsilon) \hat{\gamma}^\beta \right\}$$

where the last trace spans only over the Keldysh matrix structure. Using Eq. (14.30) for the matrix Green function, and retaining only retarded-retarded and advanced-advanced products, one finds

$$\begin{aligned} \Upsilon^{\alpha\beta} &= \frac{1}{4} \sum_{\mathbf{k}} \int \frac{d\epsilon}{2\pi} \text{Tr} \left\{ (\mathcal{G}^R)^2 [\hat{1} + \hat{\Lambda}] \hat{\gamma}^\alpha [\hat{1} + \hat{\Lambda}] \hat{\gamma}^\beta + (\mathcal{G}^A)^2 [\hat{1} - \hat{\Lambda}] \hat{\gamma}^\alpha [\hat{1} - \hat{\Lambda}] \hat{\gamma}^\beta \right\} \\ &= \sigma_1^{\alpha\beta} \int \frac{d\epsilon}{2\pi} F_\epsilon \sum_{\mathbf{k}} \left[[\mathcal{G}^R]^2 - [\mathcal{G}^A]^2 \right] = \sigma_1^{\alpha\beta} \int \frac{d\epsilon}{2\pi} \frac{\partial F_\epsilon}{\partial \epsilon} \sum_{\mathbf{k}} [\mathcal{G}^R - \mathcal{G}^A] = -2iv\sigma_1^{\alpha\beta} \end{aligned}$$

where we used the fact that $[\mathcal{G}^{R(A)}(\mathbf{k}, \epsilon)]^2 = -\partial_\epsilon \mathcal{G}^{R(A)}(\mathbf{k}, \epsilon)$, integrated by parts; employed the fact that $\sum_{\mathbf{k}} (\mathcal{G}^R(\mathbf{k}, \epsilon) - \mathcal{G}^A(\mathbf{k}, \epsilon)) = -2\pi i\nu$, and assumed that for any reasonable fermionic distribution $F_{\epsilon \rightarrow \pm\infty} \rightarrow \pm 1$. Because of the latter assumption, $\int d\epsilon \partial F_\epsilon / \partial \epsilon = 2$.

The second term on the right-hand side of Eq. (14.53) is dealt with in the same way as we did after Eq. (14.32),

$$\text{Tr} \left\{ \hat{\mathcal{G}} \left(\hat{\mathcal{R}}\mathbf{v}_F\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathcal{R}}^{-1} \right) \hat{\mathcal{G}} \left(\hat{\mathcal{R}}\mathbf{v}_F\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathcal{R}}^{-1} \right) \right\} = \pi\nu D \text{Tr} \left\{ [\hat{1} + \hat{\Lambda}] \hat{\mathcal{R}} \hat{\mathbf{A}} \hat{\mathcal{R}}^{-1} [\hat{1} - \hat{\Lambda}] \hat{\mathcal{R}} \hat{\mathbf{A}} \hat{\mathcal{R}}^{-1} \right\} = \pi\nu D \text{Tr} \left\{ \hat{\mathbf{A}}^2 - \hat{\mathbf{A}}\hat{Q}\hat{\mathbf{A}}\hat{Q} \right\},$$
 which finally gives for the $S_2[\hat{Q}, \mathbf{A}, V]$ part of the action

$$iS_2[\hat{Q}, \mathbf{A}, V] = \frac{iv}{2} \text{Tr} \{ \hat{V} \hat{\sigma}_1 \hat{V} \} + \frac{\pi v D}{2} \text{Tr} \{ \hat{\mathbf{A}} \hat{Q} \hat{\mathbf{A}} \hat{Q} - \hat{\mathbf{A}}^2 \} \quad (14.54)$$

Combining now Eq. (14.33) with Eqs. (14.52) and (14.54), and taking into account that $\text{Tr} \left\{ \left(\nabla_{\mathbf{r}} \hat{Q} \right)^2 + 4i \hat{\mathbf{A}} \hat{Q} \nabla_{\mathbf{r}} \hat{Q} - 2 \left(\hat{\mathbf{A}} \hat{Q} \hat{\mathbf{A}} \hat{Q} - \hat{\mathbf{A}}^2 \right) \right\} = \text{Tr} \left\{ \left(\hat{\partial}_{\mathbf{r}} \hat{Q} \right)^2 \right\}$, where the covariant derivative is defined by Eq. (14.49), one finds the full action in the form of Eq. (14.48).

The electric current is defined as a variational derivative of the generating function with respect to the quantum component of the vector potential $\mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = (ei/2) \delta \langle Z[\mathbf{A}] \rangle_{\text{dis}} / \delta \mathbf{A}^q(\mathbf{r}, t)$; compare Eq. (10.46). According to Eq. (14.48) it gives

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = \frac{e\pi\nu D}{2} \left\langle \text{Tr} \left\{ \hat{\gamma}^q \hat{Q}(\mathbf{r}) \hat{\partial}_{\mathbf{r}} \hat{Q}(\mathbf{r}) \right\}_{tt} \right\rangle_Q, \quad (14.55)$$

where the $\hat{\mathbf{d}}_{\mathbf{r}}$ operator, Eq. (14.49), includes the vector potential. Neglecting the $\hat{Q}$ -matrix fluctuations, that is, putting $\hat{Q} = \hat{\Lambda}$, and also $\hat{\mathbf{A}} = 0$, one finds that $\mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = (e\pi\nu D) \int (d\epsilon/2\pi) \nabla_{\mathbf{r}} F_{\epsilon}(\mathbf{r}, t)$, which was already used at the end of Section 14.1. The latter expression, however, is only an approximation that neglects the fluctuations. As a result it misses, for example, mesoscopic fluctuations, discussed in Chapter 15, and interaction corrections, Chapter 16.

13.2.6 14.6 Kubo Formula and Linear Response

The linear response theory in the framework of the Keldysh technique was formulated in Section 10.5. Let us see now how the disorder-averaged response functions may be obtained from the sigma-model action. To this end one employs the general definition of the density response function $\Pi^R(x, x')$, Eq. (10.49), along with the disorder-averaged generating function (14.47), (14.48), which give

$$\begin{aligned} \Pi^R(x - x') &= - \frac{i}{2} \frac{\delta^2 \langle Z[V^{\text{cl}}, V^q] \rangle_{\text{dis}}}{\delta V^{\text{cl}}(x') \delta V^q(x)} \Big|_{\hat{V}=0} \\ &= v \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t') \\ &\quad + \frac{i}{2} (\pi\nu)^2 \left\langle \text{Tr} \left\{ \hat{\gamma}^q \hat{Q}_{tt}(\mathbf{r}) \right\} \text{Tr} \left\{ \hat{\gamma}^{\text{cl}} \hat{Q}_{t't'}(\mathbf{r}') \right\} \right\rangle_Q, \end{aligned} \quad (14.56)$$

where $x = (\mathbf{r}, t)$ and angular brackets stand for the averaging over the action (14.33). The first term on the right-hand side of Eq. (14.56) originates from the differentiation of the $\text{Tr} \{ \hat{V} \hat{\sigma}_1 \hat{V} \}$ part of the action (14.48), while the second term comes from double differentiation of the exponentiated $i\pi\nu \text{Tr} \{ \hat{V} \hat{Q} \}$. Equation (14.56) represents the sigma-model equivalent of the Kubo formula for the linear density response. In the Fourier representation it takes the form

$$\Pi^R(\mathbf{q}, \omega) = \nu + \frac{i}{2} (\pi\nu)^2 \iint \frac{d\epsilon d\epsilon'}{(2\pi)^2} \left\langle \text{Tr} \left\{ \hat{\gamma}^q \hat{Q}_{\epsilon+\omega, \epsilon}(\mathbf{q}) \right\} \text{Tr} \left\{ \hat{\gamma}^{\text{cl}} \hat{Q}_{\epsilon', \epsilon'+\omega}(-\mathbf{q}) \right\} \right\rangle_Q. \quad (14.57)$$

Employing Eqs. (14.38) and (14.39), one finds to linear order in the diffuson modes (since $\text{Tr} \{ \hat{\gamma}^{\text{cl}} \hat{\Lambda} \} = 0$, the only contribution in the zeroth order is ν):

$$\text{Tr} \left\{ \hat{\gamma}^{\text{cl}} \hat{Q}_{\epsilon', \epsilon'+\omega}(-\mathbf{q}) \right\} = d_{\epsilon', \epsilon'+\omega}^q(-\mathbf{q}) (F_{\epsilon'+\omega} - F_{\epsilon'}) \quad (14.58a)$$

$$\text{Tr} \left\{ \hat{\gamma}^q \hat{Q}_{\epsilon+\omega, \epsilon}(\mathbf{q}) \right\} = d_{\epsilon+\omega, \epsilon}^q(\mathbf{q}) (1 - F_{\epsilon} F_{\epsilon+\omega}) - d_{\epsilon+\omega, \epsilon}^{\text{cl}}(\mathbf{q}) \quad (14.58b)$$

Since $\langle d^q d^q \rangle_{\mathcal{W}} = 0$, only the last term on the right-hand side of Eq. (14.58b), being paired with Eq. (14.58a), contributes to the average value in Eq. (14.57). The result is

$$\Pi^R = v + \frac{i\pi v^2}{4} \int d\epsilon (F_\epsilon - F_{\epsilon+\omega}) \langle d_{\epsilon+\omega,\epsilon}^{\text{cl}}(\mathbf{q}) d_{\epsilon,\epsilon+\omega}^{\text{cl}}(-\mathbf{q}) \rangle_{\mathcal{W}} = v \left[1 + \frac{i\omega}{Dq^2 - i\omega} \right], \quad (14.59)$$

where we have used propagator (14.43) and the integral $\int d\epsilon (F_\epsilon - F_{\epsilon+\omega}) = -2\omega$, which is valid for any distribution function satisfying $F_{\epsilon \rightarrow \mp\infty} = \mp 1$. One has obtained thus the diffusive form of the density-density response function (i.e. the retarded component of the polarization matrix)

$$\Pi^R(\mathbf{q}, \omega) = v \frac{Dq^2}{Dq^2 - i\omega}. \quad (14.60)$$

The fact that $\Pi^R(0, \omega) = 0$ is a consequence of particle number conservation. Also notice that this function is indeed retarded (i.e. analytic in the entire upper half-plane of the complex frequency ω), as it should be. The weak-localization corrections to the classical diffusion are obtained by expanding, for example, $\text{Tr} \left\{ \left(\nabla_{\mathbf{r}} \hat{Q} \right)^2 \right\}$ in the action to fourth and sixth orders in the diffusion generators d^α and contracting them with Eqs. (14.58). Equation (14.60) may be compared with Eq. (10.55) for the response function of a clean electron gas. The latter exhibits singularities at $\omega = \pm v_F q$, which are characteristic for the ballistic motion. The diffusive expression (14.60) is valid for $\omega \lesssim 1/\tau_{\text{el}}$ and $q \lesssim 1/l_{\text{el}}$, while the ballistic one (10.55) is applicable outside this region.

The current-current response function, $K^R(\mathbf{q}, \omega)$, may be obtained in a similar way, by taking variations of the disorder-averaged generating function with respect to the vector potential. It may be also found, however, using the continuity relation $\mathbf{q} \cdot \mathbf{j} + \omega \rho = 0$, which implies the following relation between density and current responses: $K^R(\mathbf{q}, \omega) = e^2 \omega^2 \Pi^R(\mathbf{q}, \omega)/q^2$. As a result, the conductivity is given by ⁷

$$\sigma(\mathbf{q}, \omega) = \frac{e^2}{i\omega} K^R(\mathbf{q}, \omega) = e^2 \frac{-i\omega}{q^2} \Pi^R(\mathbf{q}, \omega) = e^2 \nu D \frac{-i\omega}{Dq^2 - i\omega}. \quad (14.61)$$

In the limit of the uniform external field, $\mathbf{q} \rightarrow 0$, this leads to the already familiar Drude result $\sigma(0, \omega) = e^2 \nu D = \sigma_D$; see Eq. (14.12).

13.2.7 14.7 Cooper Channel

If the system possesses time-reversal symmetry (TRS) (for the spinless case it means that there is a basis in which the Hamiltonian is real, $\hat{H}^T = \hat{H}$), there

is an additional set of soft degrees of freedom, which has been neglected so far. It originates from another way of decoupling the four-fermion term (14.18), obtained upon averaging over the quenched disorder. Instead of rearranging it as $-\left[\bar{\psi}^a \psi'^b\right] \left[\bar{\psi}'^b \psi^a\right]$, where the prime indicates the different time argument, one could also rewrite it as $\left[\bar{\psi}^a \bar{\psi}'^b\right] \left[\psi'^b \psi^a\right]$. By decoupling it with a Hubbard-Stratonovich field, one obtains another set of soft modes. Due to apparent similarities with the theory of superconductivity, see Chapter 17, these soft modes are known as the Cooper channel. One should be aware, though, that superconductivity typically involves spin in a crucial way, while our treatment here is given for the spinless case.

To implement this idea in a systematic way, one notices that for a quadratic Hamiltonian,

⁰⁷ The factor $1/(i\omega)$ is due to the fact that K^R is a response function on the vector potential $\mathbf{A}$, while the conductivity is a response on the electric field, $\mathbf{E}$. The latter is related to the vector potential as $\mathbf{E} = -\partial_t \mathbf{A} = i\omega \mathbf{A}$.

$$\hat{H}(\bar{\psi}, \psi) = \bar{\psi} \hat{H} \psi = [\bar{\psi} \hat{H} \psi]^T = -\psi^T \hat{H}^T \bar{\psi}^T = -\psi^T \hat{H} \bar{\psi}^T,$$

where in the third equality we permuted Grassmann numbers and in the last one employed the time-reversal symmetry $\hat{H}^T = \hat{H}$. This observation suggests that one may double the fermionic basis by introducing the time-reversal space. To this end we define two-component "spinors" as

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \psi \\ -\bar{\psi} \end{pmatrix}; \quad \bar{\Psi} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\bar{\psi}, \psi); \quad \bar{\Psi} = \Psi^T (i\hat{\tau}_2) \quad (14.62)$$

where $\hat{\tau}_\mu$ are Pauli matrices acting in the time-reversal space. With this notation the quadratic fermionic action on the closed time contour may be written as

$$S = \int_c dt \bar{\Psi} (i\hat{\tau}_3 \partial_t - \hat{H}) \Psi \quad (14.63)$$

The fact that the Hamiltonian enters with the unit matrix, that is, $\hat{\tau}_0$, is a manifestation of TRS. For our problem the Hamiltonian is $\hat{H} = -\nabla_{\mathbf{r}}^2/(2m) - \epsilon_F + V_{\text{dis}}(\mathbf{r})$.

We now proceed exactly as before: (i) split the fields Ψ and $\bar{\Psi}$ into forward and backward components and perform Keldysh-Larkin-Ovchinnikov rotation (10.23), (10.24); (ii) average over the disorder according to Eq. (14.18); (iii) perform a Hubbard-Stratonovich transformation with the help of the Hermitian matrix $\check{Q}_{tt'}(\mathbf{r})$, which is a 4×4 matrix in the direct product of the Keldysh and timereversal spaces, as well as an $N \times N$ matrix in the discretized time space. Since the $\check{Q}$ -matrix has the same symmetry as $\Psi(t') \bar{\Psi}(t)$ it obeys the symplectic relation

$$\check{Q}^T = \hat{\tau}_2 \check{Q} \hat{\tau}_2, \quad (14.64)$$

where the transposition operation involves matrix transposition as well as the interchange of the two time arguments. The presence of the additional symmetry (14.64) dictates that the Hubbard-Stratonovich part of the action takes the form $(\pi v/8\tau_{\text{el}}) \text{Tr} \{ \check{Q}^2 \}$; see Eq. (14.19). Finally, one performs Gaussian integration over the Ψ and $\bar{\Psi}$ fields. Since only half of the fermionic fields are independent (due to the symmetry $\bar{\Psi} = \Psi^T (i\hat{\tau}_2)$), it brings in the factor $\det^{1/2} [\check{G}^{-1} + i\check{Q}/(2\tau_{\text{el}})]$ (similarly to the bosonic Gaussian integral over the real variables, Eq. (2.22)), where $\check{G}^{-1} = i\hat{\tau}_3 \partial_t - \xi_{\mathbf{k}}$. Repeating the calculations that brought in the sigma-model action (14.33), we obtain its generalization for the TRS case:

$$iS[\check{Q}] = -\frac{\pi v}{8} \text{Tr} \left\{ D (\check{\partial}_{\mathbf{r}} \check{Q})^2 - 4\hat{\tau}_3 \partial_t \check{Q} \right\}, \quad (14.65)$$

where the covariant derivative is given by $\check{\partial}_{\mathbf{r}} \check{\mathcal{Q}} = \nabla_{\mathbf{r}} \check{\mathcal{Q}} + i [\hat{\mathbf{A}} \hat{\tau}_3, \check{\mathcal{Q}}]$. Since the magnetic field breaks TRS, the source vector potential enters the action with the symmetry-breaking factor $\hat{\tau}_3$. If TRS is completely broken by, for example, a strong enough magnetic field, the soft-mode manifold acquires the block-diagonal form $\check{Q} = \text{diag} \{ \hat{Q}, \hat{Q}^T \}$ in time-reversal space, where the $\hat{Q}$ -matrix is the one we used before in the unitary symmetry class. The action (14.65) reduces then back to (14.33). In the presence of TRS $\check{Q}$ also has the off-diagonal blocks in time-reversal space, which are the additional soft modes or Cooperons.

To parametrize this soft-mode manifold, one notices that the stationary point $\check{Q}$ matrix takes the form $\check{\Lambda} = \text{diag} \{ \hat{\Lambda}, \hat{\Lambda}^T \}$, which may be written, using Eq. (14.37), as $\check{\Lambda} = \check{U}^{-1} (\hat{\sigma}_3 \hat{\tau}_0) \check{U}$, where $\check{U} = \text{diag} \{ \hat{U}, \hat{U}^T \}$. The $\check{Q}$ -matrix may be then parametrized as $\check{Q} = \check{U}^{-1} e^{-\check{W}/2} (\hat{\sigma}_3 \hat{\tau}_0) e^{\check{W}/2} \check{U}$ (cf. Eq. (14.38)), where $\check{W}$ matrices acquire structure in time-reversal space. The symplectic symmetry (14.64) dictates that $\check{W}^T = -\hat{\tau}_2 \check{W} \hat{\tau}_2$, which leads to

$$\check{\mathcal{W}} = \begin{pmatrix} \hat{\mathcal{W}} & \hat{\mathcal{B}}_1 \\ \hat{\mathcal{B}}_2 & -\hat{\mathcal{W}}^T \end{pmatrix}_{\text{TR}} ; \quad \hat{\mathcal{B}}_1^T = \hat{\mathcal{B}}_1, \quad \hat{\mathcal{B}}_2^T = \hat{\mathcal{B}}_2, \quad (14.66)$$

where the subscript TR indicates that the displayed structure is in time-reversal space. To induce a rotation of the $(\hat{\sigma}_3 \hat{\tau}_0)$ matrix, the generator $\check{\mathcal{W}}$ (and therefore all three matrices $\hat{\mathcal{W}}$, $\hat{\mathcal{B}}_1$ and $\hat{\mathcal{B}}_2$) must be off-diagonal in the Keldysh space, that is, $\check{\mathcal{W}}(\hat{\sigma}_3 \hat{\tau}_0) + (\hat{\sigma}_3 \hat{\tau}_0)\check{\mathcal{W}} = 0$. This leads to

$$\hat{\mathcal{W}} = \begin{pmatrix} 0 & d^{\text{cl}} \\ d^{\text{q}} & 0 \end{pmatrix}_K ; \quad \hat{\mathcal{B}}_1 = \begin{pmatrix} 0 & c_1 \\ c_1^T & 0 \end{pmatrix}_K ; \quad \hat{\mathcal{B}}_2 = \begin{pmatrix} 0 & c_2^T \\ c_2 & 0 \end{pmatrix}_K, \quad (14.67)$$

where the displayed structure is in Keldysh space (K). The two-point functions $c_{1;tt'}(\mathbf{r})$ and $c_{2;tt'}(\mathbf{r})$ represent Cooperon modes, while $d_{tt'}^{\text{cl}}(\mathbf{r})$ and $d_{tt'}^{\text{q}}(\mathbf{r})$ are the already familiar diffusion modes. Unlike diffusons, which may be identified as classical and quantum, the Cooperons (similarly to the fermion fields) lack such a distinction and are labeled by the Keldysh index $a = 1, 2$. It is often convenient to deal with the parametrization (14.66), (14.67) in the energy representation. In doing so it is important to remember that, due to the chosen Fourier convention (14.41) and $(c_a^T)_{tt'} = c_{a;t't}$, the transposition operation in energy space takes the form

$$(c_a^T)_{\epsilon\epsilon'} = c_{a;-\epsilon'-\epsilon} \quad (14.68)$$

Substituting the parametrization (14.66), (14.67) into the action (14.65) and expanding to second order in the d^a and c_a fields, one obtains the Gaussian action of the diffusion and Cooperon modes. The diffusion part is exactly that of Eq. (14.42), while the Cooperon part takes the form

$$iS[c_1, c_2] = -\frac{\pi\nu}{2} \sum_{\mathbf{q}, \epsilon, \epsilon'} c_{1;\epsilon\epsilon'}(-\mathbf{q}) [D\mathbf{q}^2 - i\epsilon - i\epsilon'] c_{2;\epsilon'\epsilon}(\mathbf{q}) \quad (14.69)$$

As a result, the Gaussian propagator of the Cooperon modes is

$$\langle c_{2;\epsilon_1\epsilon_2}(\mathbf{q}) c_{1;\epsilon_3\epsilon_4}(-\mathbf{q}) \rangle = -\frac{2}{\pi\nu} \frac{\delta_{\epsilon_2\epsilon_3} \delta_{\epsilon_1\epsilon_4}}{Dq^2 - i(\epsilon_1 + \epsilon_2)} \equiv \frac{-2}{\pi\nu} \delta_{\epsilon_2\epsilon_3} \delta_{\epsilon_1\epsilon_4} \mathcal{C}(\mathbf{q}, \epsilon_1 + \epsilon_2) \quad (14.70)$$

where the object $\mathcal{C}(\mathbf{q}, \epsilon) = (Dq^2 - i\epsilon)^{-1}$ is called the Cooperon. In the absence of the magnetic field it is very similar to the diffusion (14.44) and, as was mentioned previously, provides an additional slow diffusive mode. Perturbations that break TRS, such as an external magnetic field or magnetic impurities, induce mass to the Cooperon (but not to the diffusion) and therefore gradually suppress the corresponding fluctuations.

13.2.8 14.8 Weak Localization and Scaling

We are now in a position to investigate the first quantum correction to the Drude conductivity $\sigma_D = e^2 \nu D$, Eqs. (14.12) and (14.61). To this end we focus on the $(\pi\nu D/8) \text{Tr} \left\{ [\hat{\mathbf{A}} \hat{\tau}_3, \check{\mathbf{Q}}]^2 \right\}$ term of the action (14.65), where $\hat{\mathbf{A}} = \hat{\gamma}^\alpha \mathbf{A}^\alpha(t)$. Other terms, such as $\sim \text{Tr} \left\{ [\hat{\mathbf{A}} \hat{\tau}_3, \check{\mathbf{Q}}] \nabla_{\mathbf{r}} \check{\mathbf{Q}} \right\}$, do not contribute to the one-loop correction considered here. According to linear response theory (Kubo formula), developed in Section 10.5 (see also the footnote at the end of Section 14.6), the linear conductivity is given by (cf. Eq. (10.47)),

$$\sigma^R(\omega) = \frac{e^2}{i\omega} \frac{1}{2i} \frac{\delta^2 Z[A^{\text{cl}}, A^{\text{q}}]}{\delta A_\omega^{\text{cl}} \delta A_{-\omega}^{\text{q}}} \Big|_{A=0}$$

where both the classical vector potential and the current are directed along, say, the x -axis. For our purposes $Z[A^{\text{cl}}, A^{\text{q}}] = (\pi\nu D/8) \langle \text{Tr} \{ [\hat{\gamma}^\alpha A^\alpha \hat{\tau}_3, \check{Q}]^2 \} \rangle$, where the angular brackets denote averaging over $\check{Q}$ -matrix fluctuations. First, neglecting all the fluctuations, one puts the $\check{Q}$ -matrix at its stationary point $\check{\Lambda}_\epsilon = \text{diag} \{ \hat{\Lambda}_\epsilon, \hat{\Lambda}_{-\epsilon}^T \}$,

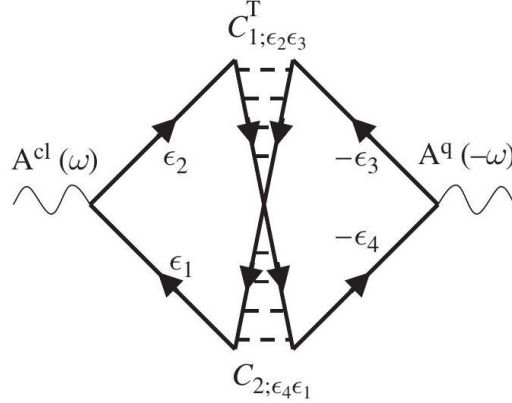


Figure 14.3 One loop weak-localization correction. The bold square is the local vertex $\text{Tr} \{ \hat{\mathcal{U}}_{\epsilon_1} \hat{\gamma}^{\text{cl}} \hat{\mathcal{U}}_{\epsilon_2} \hat{\sigma}_- (\hat{\mathcal{U}}^T)_{\epsilon_3} \hat{\gamma}^{\text{q}} (\hat{\mathcal{U}}^T)_{\epsilon_4} \hat{\sigma}_- \}$, known also as the Hikami box. The vertical ladder is the Cooperon propagator $\delta_{-\epsilon_3\epsilon_1} \delta_{-\epsilon_2\epsilon_4} \sum_{\mathbf{q}} \mathcal{C}(\mathbf{q}, \omega)$, Eq. (14.70), between the coinciding spatial points. The fact that its legs cross indicates that the relevant contraction involves transposition, that is, it is between c_1^T and c_2 , where $\hat{\Lambda}_\epsilon$ is given by Eq. (14.25) and we employed Eq. (14.68) for the transposition operation in energy space. The generating function is then given by

$$Z = \frac{\pi\nu D}{8} \sum_{\epsilon, \epsilon'} \text{Tr} \{ (\hat{\gamma}^\alpha A_{\epsilon-\epsilon'}^\alpha \hat{\tau}_3 \check{\Lambda}_{\epsilon'} - \check{\Lambda}_\epsilon \hat{\gamma}^\alpha A_{\epsilon-\epsilon'}^\alpha \hat{\tau}_3) (\hat{\gamma}^\beta A_{\epsilon'-\epsilon}^\beta \hat{\tau}_3 \check{\Lambda}_\epsilon - \check{\Lambda}_{\epsilon'} \hat{\gamma}^\beta A_{\epsilon'-\epsilon}^\beta \hat{\tau}_3) \}.$$

Evaluating the trace and derivatives over the vector potential, one obtains

$$\sigma^{\text{R}}(\omega) = -\frac{e^2 \pi \nu D}{\omega} \int \frac{d\epsilon}{2\pi} (F_\epsilon - F_{\epsilon+\omega}) = e^2 \nu D = \sigma_{\text{D}},$$

as expected.

We now expand the two $\check{Q}$ -matrices to first order in the fluctuations, that is, $\check{Q} \rightarrow \check{\mathcal{U}}^{-1} (\hat{\sigma}_3 \hat{\tau}_0) \check{\mathcal{W}} \check{\mathcal{U}}^8$. The typical term, resulting from such an expansion, acquires the form (Fig. 14.3)

$$\begin{aligned} & \text{Tr} \{ \check{A}_{\epsilon_1 \epsilon_2} (\hat{\sigma}_3 \hat{\tau}_0) \check{\mathcal{W}}_{\epsilon_2 \epsilon_3} \check{A}_{\epsilon_3 \epsilon_4} (\hat{\sigma}_3 \hat{\tau}_0) \check{\mathcal{W}}_{\epsilon_4 \epsilon_1} \} = A_{\epsilon_1 - \epsilon_2}^\alpha A_{\epsilon_3 - \epsilon_4}^\beta \\ & \times \text{Tr} \left(\begin{array}{cc} 0 & \hat{\mathcal{U}}_{\epsilon_1} \hat{\gamma}^\alpha \hat{\mathcal{U}}_{\epsilon_2} \hat{\sigma}_3 (\hat{\mathcal{B}}_1)_{\epsilon_2 \epsilon_3} \\ -\hat{\mathcal{U}}_{-\epsilon_1}^T \hat{\gamma}^\alpha \hat{\mathcal{U}}_{-\epsilon_2}^T \hat{\sigma}_3 (\hat{\mathcal{B}}_2)_{\epsilon_2 \epsilon_3} & 0 \end{array} \right) \left(\begin{array}{cc} 0 & \hat{\mathcal{U}}_{\epsilon_3} \hat{\gamma}^\beta \hat{\mathcal{U}}_{\epsilon_4} \hat{\sigma}_3 (\hat{\mathcal{B}}_1)_{\epsilon_4 \epsilon_1} \\ -\hat{\mathcal{U}}_{-\epsilon_3}^T \hat{\gamma}^\beta \hat{\mathcal{U}}_{-\epsilon_4}^T \hat{\sigma}_3 (\hat{\mathcal{B}}_2)_{\epsilon_4 \epsilon_1} & 0 \end{array} \right) \end{aligned}$$

where

$$\check{A}_{\epsilon \epsilon'} \equiv \check{\mathcal{U}}_\epsilon \hat{\gamma}^\alpha \mathbf{A}_{\epsilon - \epsilon'}^\alpha \hat{\tau}_3 \check{\mathcal{U}}_{\epsilon'}^{-1} \quad (14.71)$$

and we kept only the Cooper channel generators $\hat{\mathcal{B}}_a$, since the diffuson generator $\hat{\mathcal{W}}$ does not contribute at this order (due to the energy integration of a purely retarded function). We now put $\alpha = \text{cl}$ and $\beta = \text{q}$, employ the explicit form (14.37) of the $\hat{\mathcal{U}}_\epsilon$ -matrix along with the

⁰⁸ Expanding one $\check{Q}$ -matrix to second order in $\check{\mathcal{W}}$, while putting the other one to be $\check{\Lambda}$, produces terms that all vanish due to the energy integration of purely retarded/advanced functions.

energy transposition convention (14.68), and find for the coefficient multiplying $-A_{\epsilon_1-\epsilon_2}^{\text{cl}} A_{\epsilon_3-\epsilon_4}^{\text{q}}$:

$$\begin{aligned} & \text{Tr} \left(\begin{pmatrix} (F_{\epsilon_1} - F_{\epsilon_2}) (c_1^{\text{T}})_{\epsilon_2 \epsilon_3} & c_{1;\epsilon_2 \epsilon_3} \\ - (c_1^{\text{T}})_{\epsilon_2 \epsilon_3} & 0 \end{pmatrix} \right)_{\text{K}} \left(\begin{pmatrix} c_{2;\epsilon_4 \epsilon_1} & F_{-\epsilon_4} (c_2^{\text{T}})_{\epsilon_4 \epsilon_1} \\ F_{-\epsilon_3} c_{2;\epsilon_4 \epsilon_1} & (F_{-\epsilon_3} F_{-\epsilon_4} - 1) (c_2^{\text{T}})_{\epsilon_4 \epsilon_1} \end{pmatrix} \right)_{\text{K}} \\ &= (F_{\epsilon_1} - F_{\epsilon_2}) \langle c_{1;-\epsilon_3-\epsilon_2} c_{2;\epsilon_4 \epsilon_1} \rangle + F_{-\epsilon_3} \langle c_{1;\epsilon_2 \epsilon_3} c_{2;\epsilon_4 \epsilon_1} \rangle - F_{-\epsilon_4} \langle c_{1;-\epsilon_3-\epsilon_2} c_{2;-\epsilon_1-\epsilon_2} \rangle, \end{aligned}$$

where in the last line the angular brackets denote Gaussian averaging over $\tilde{Q}$ fluctuations according to Eq. (14.70). The last two terms here are proportional to $\delta_{\epsilon_2 \epsilon_1} \delta_{\epsilon_3 \epsilon_4}$ and vanish during the energy integrations. The first term, however, has a very different structure. It is proportional to $\delta_{-\epsilon_3 \epsilon_1} \delta_{-\epsilon_2 \epsilon_4}$ and thus to $A_{\epsilon_1-\epsilon_2}^{\text{cl}} A_{-\epsilon_1+\epsilon_2}^{\text{q}}$, while the Cooperon $\mathcal{C} \propto \langle c_{1;\epsilon_1 \epsilon_4} c_{2;\epsilon_4 \epsilon_1} \rangle$ depends on $\epsilon_4 + \epsilon_1 = \epsilon_1 - \epsilon_2 = \omega$. Collecting all such terms, differentiating over the vector potentials and integrating over $(\epsilon_1 + \epsilon_2)/2$, one finally obtains for the one-loop correction to the frequencydependent conductivity

$$\delta\sigma^{\text{R}}(\omega) = -\frac{2e^2 D}{\pi} \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{Dq^2 - i\omega} \quad (14.72)$$

Summation over the wavenumber $\mathbf{q}$ is due to the fact that the c_1^{T} and c_2 fields are taken at the same spatial point and thus the Cooperons $\mathcal{C}(\mathbf{q}, \omega)$ of all wavenumbers contribute equally.

One notices that for $d \leq 2$ the correction to the ac conductivity diverges at small ω as

$$\delta\sigma(\omega) \propto -e^2 \left(\frac{D}{\omega} \right)^{1-d/2} \quad (14.73)$$

In particular, for $d = 2$ in the dc limit one finds

$$\delta\sigma = -\frac{e^2}{2\pi^2} \ln \frac{\tau_{\phi}}{\tau_{\text{el}}} \quad (14.74)$$

where the upper limit of momentum integration in (14.72) is set by $Dq^2 \lesssim 1/\tau_{\text{el}}$. On the other hand, the lower limit $Dq^2 \gtrsim 1/\tau_{\phi}$ is given either by a phase-breaking mechanism (e.g. due to electron-electron interactions) or by a TRS-breaking perturbation, such as a magnetic field or magnetic impurities. The latter observation implies a weak field positive magneto-conductivity; see Problem 14.10.3, which

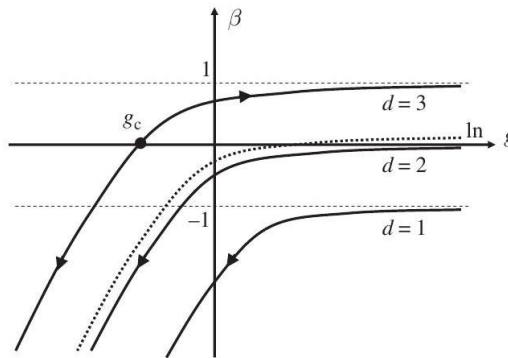


Figure 14.4 One parameter scaling theory of localization, after [308]. The scaling function $\beta = d \ln g / dl$ versus $\ln g$ for $d = 1, 2, 3$ (full lines) and $d = 2 + \epsilon$ (dotted line). The arrows show the directions of RG flow.

is indeed observed in a wide class of disordered materials [307]. The divergent nature of the correction indicates that the metallic fixed point, characterized by small fluctuations around the stationary point $\tilde{\Lambda}$, is unstable. That is, the symmetry breaking does not occur and the $\tilde{Q}$ -matrix field freely rotates around the entire manifold $\tilde{Q}^2 = \tilde{1}$. In the language of the magnetic analogy: the metal corresponds to a ferromagnetic (i.e. spontaneously broken symmetry) state, while the insulator corresponds to a paramagnetic (i.e. symmetric) state.

To put these observations at a more quantitative level one may develop the renormalization group (RG) treatment of the sigma-model [308, 280, 281, 306]; see Section 9.4. To this end, one splits the $\tilde{Q}$ -matrix degrees of freedom into slow and fast ones, integrates out the fast ones, and then rescales the phase space and the fields to recast the action into the initial form, albeit with renormalized constants. A way to implement it is to write the $\tilde{Q}$ -matrix as (cf. Eq. (14.38)),

$$\tilde{Q} = \tilde{\mathcal{U}}_s^{-1} \circ e^{-\tilde{\mathcal{W}}_f/2} \circ (\hat{\sigma}_3 \hat{\tau}_0) \circ e^{\tilde{\mathcal{W}}_f/2} \circ \tilde{\mathcal{U}}_s, \quad (14.75)$$

where the slow degrees of freedom $\tilde{\mathcal{U}}_s$ are not restricted to the specific form (14.37), but rather encode an arbitrary slow $\tilde{Q}_s = \tilde{\mathcal{U}}_s^{-1} (\hat{\sigma}_3 \hat{\tau}_0) \tilde{\mathcal{U}}_s$ matrix. The rotation generators $\tilde{\mathcal{W}}_f$, having the structure of Eqs. (14.66) and (14.67), represent now the fast degrees of freedom.

One now rescales $\mathbf{r} \rightarrow b\mathbf{r}$, $t \rightarrow b^z t$, where b is the contraction factor of the momentum space. The scaling dimension of $\tilde{\mathcal{W}}_f$, $\tilde{\mathcal{U}}_s$, and $\tilde{Q}$ is z , which is consistent with the fact that $\int dt'' \tilde{Q}_{tt''} \tilde{Q}_{t''t'} = \delta_{t,t'}$. From here one deduces the bare scaling dimensions of the two constants in the action (14.65), $g \equiv \nu D$ and ν , to be $[g] = d - 2$ and $[\nu] = z$. Next, one expands the action in powers of $\tilde{\mathcal{W}}_f$ and integrates over the fast degrees of freedom. To second order one encounters terms like

$g \langle \text{Tr} \{ \tilde{\mathcal{U}}_s \nabla_{\mathbf{r}} \tilde{\mathcal{U}}_s^{-1} (\hat{\sigma}_3 \hat{\tau}_0) \tilde{\mathcal{W}}_f \tilde{\mathcal{U}}_s \nabla_{\mathbf{r}} \tilde{\mathcal{U}}_s^{-1} (\hat{\sigma}_3 \hat{\tau}_0) \tilde{\mathcal{W}}_f \} \rangle_{\mathcal{W}_f}$. They are represented by the diagram of Fig. 14.3, with $\tilde{\mathcal{U}}_s \nabla_{\mathbf{r}} \tilde{\mathcal{U}}_s^{-1}$ staying instead of the vector potential $\hat{\mathbf{A}}$. The calculations thus exactly follow the ones given previously, with the only difference that the momentum summation in Eq. (14.72) is limited to the shell $\Lambda < q < b\Lambda$ of the fast degrees of freedom. Putting $b = e^l \approx 1 + l$, where $l = \ln b$ is an infinitesimal increment, one obtains the RG equation for g :

$$\frac{d \ln g}{dl} = \epsilon - \frac{1}{2\pi^2} g + \dots = \beta(g) \quad (14.76)$$

where $\epsilon = d - 2$ and the constant $1/2\pi^2$ is taken from the $d = 2$ result (14.74). The time derivative term in the action has a somewhat different structure. Its expansion brings terms like $v \langle \text{Tr} \{ \tilde{\mathcal{U}}_s \partial_t \tilde{\mathcal{U}}_s^{-1} (\hat{\sigma}_3 \hat{\tau}_0) \tilde{\mathcal{W}}_f \tilde{\mathcal{W}}_f \} \rangle_{\mathcal{W}_f}$, which may be shown to vanish due to the energy integration of the purely retarded function. The same is true in all higher orders, leading to the absence of renormalization for v beyond the bare scaling. This is natural, since the disorder is not expected to alter the density of states (unlike the diffusion constant).

One is therefore left with the single parameter scaling description [308], given by Eq. (14.76). The RG flow suggested (since our calculations are valid only for $g \gg 1$, in units of $e^2/\hbar$) by Eq. (14.76) is schematically depicted in Fig. 14.4. One notices that for $d \leq 2$ the conductance g decreases with RG rescaling, indicating that a large enough system is always localized. On the other hand, for $d > 2$ there is a critical conductance g_c above which the system tends to be metallic. The latter means that the conductance $g \rightarrow L^{d-2}$, when the system size $L \rightarrow \infty$, which is exactly what is expected from Ohm's law. In the ϵ -expansion, that is, for $\epsilon \ll 1$, the critical conductance is large, $g_c \sim 1/\epsilon$, validating the perturbative RG calculations. In particular, the correlation (i.e. localization) length diverges as $\xi \propto (g_c - g)^{-\nu}$, where the critical exponent ν (not related to DOS) is $\nu^{-1} = d\beta/d \ln g|_{g_c} \approx \epsilon$; see Eq. (14.76).

13.2.9 14.9 Time-Dependent Perturbations

Here we briefly touch on an issue of a chaotic system subject to a fast time-dependent drive. We'll show that in the saddle-point approximation it leads to the diffusion in the energy direction. The fluctuation corrections may lead to dynamical localization, which curtails the system's ability to absorb the extra energy.

To be specific, let's assume that a disordered electronic system (e.g. a metallic ring) is subject to a uniform-in-space, time-dependent vector potential $\mathbf{A}(t)$. The latter may be provided

by a time-dependent Aharonov-Bohm flux threaded through the ring. It is clear that such time-dependent flux generates the electric field $e\mathbf{E}(t) = \partial_t \mathbf{A}(t)$, which leads to Joule heating of the metal. Neglecting spatial variations, the action (14.48) acquires the following form:⁹

$$iS[\hat{Q}, \mathbf{A}] = \frac{\pi}{4\delta} \text{Tr} \left\{ D \left([\mathbf{A} \hat{\gamma}^{\text{cl}}, \hat{Q}] \right)^2 + 4\partial_t \hat{Q} \right\} \quad (14.77)$$

where δ is the mean level spacing at the chemical potential, $\delta^{-1} = \int d^d \mathbf{r} v$. Taking the variation with respect to the $\hat{Q}$ -field, under the condition $\hat{Q}^2 = \hat{1}$, as described in the opening paragraph of Section 14.4, one finds the stationary point condition (recall that $\hat{\gamma}^{\text{cl}} = \hat{1}$):

$$D(\hat{Q} \circ \mathbf{A} \circ \hat{Q} \circ \mathbf{A} - \mathbf{A} \circ \hat{Q} \circ \mathbf{A} \circ \hat{Q}) - \{\partial_t, \hat{Q}\} = 0. \quad (14.78)$$

For a classical stationary point of the form (14.25) with a generic nonlocal in time distribution function, $F_{t_1 t_2}$, the nontrivial $(1, 2)$ matrix component of this equation becomes

$$-D(\mathbf{A}(t_1) - \mathbf{A}(t_2))^2 F_{t_1 t_2} - (\partial_{t_1} + \partial_{t_2}) F_{t_1 t_2} = 0 \quad (14.79)$$

Finally one performs the Wigner transform according to Eqs. (14.35) and (6.41). The first term, $\mathbf{A}_{t_1}^2 F_{t_1 t_2} - 2\mathbf{A}_{t_1} F_{t_1 t_2} \mathbf{A}_{t_2} + F_{t_1 t_2} \mathbf{A}_{t_2}^2 \xrightarrow{\text{WT}} -(\partial_t \mathbf{A})^2 \partial_\epsilon^2 F_\epsilon(t)$, requires expanding the exponent in Eq. (6.41) to the second order. This leads to the diffusion equation in the energy direction for the distribution function $F_\epsilon(t)$,

$$\mathcal{D} \partial_\epsilon^2 F_\epsilon(t) - \partial_t F_\epsilon(t) = 0 \quad (14.80)$$

where the energy diffusion coefficient is $\mathcal{D} = D \langle (\partial_t \mathbf{A})^2 \rangle = D e^2 \langle \mathbf{E}^2 \rangle$ and the angular brackets denote averaging over the fast time-dependent oscillations of the external field.

The energy diffusion equation (14.80) implies that the characteristic energy of an electron, that is, temperature, in a system subject to an ac perturbation grows as $T \propto \sqrt{\mathcal{D}t}$. The total energy of the electron gas $\propto \nu T^2 \propto \nu \mathcal{D}t$ grows linearly in time, resulting in a Joule heating. Indeed, the change of the total energy, that is, the energy absorption, is calculated as

$$W = \frac{d}{dt} \nu \int d\epsilon \epsilon \frac{1}{2} (1 - F_\epsilon(t)) = -\frac{\nu \mathcal{D}}{2} \int d\epsilon \epsilon \partial_\epsilon^2 F_\epsilon(t) = \nu \mathcal{D} \quad (14.81)$$

where we performed the energy integration by parts and used that $F_\infty = 1$ and $F_{-\infty} = -1$. For a harmonic ac electric field of the form $E(t) = E \cos \omega_0 t$, one finds $W = e^2 \nu D E^2 / 2$. This is the Joule heating of a metal with the conductivity $\sigma_D = e^2 \nu D$, in agreement with $\mathbf{q} = 0$ limit of Eq. (14.61).

Going beyond the stationary point treatment of the action (14.77), one may show [309, 310] that the energy diffusion coefficient $\mathcal{D}$ acquires weak localization corrections, similar in spirit to those discussed in Section 14.8. The one loop correction shows up in the case of $\propto \hat{\tau}_0$ ac field (see footnote 9). Since the problem is effectively one-dimensional (energy direction), it takes the form [310] (cf. the $d = 1$ case of Eq. (14.73))

$$W(t) = \nu \mathcal{D} \left(1 - \sqrt{\frac{t}{t_*}} \right), \quad (14.82)$$

where $t_* \propto \mathcal{D} / (\omega_0 \delta)^2$, and δ is the mean level spacing. One may argue that such weak localization corrections are bound to lead to localization in the energy direction at $t \gtrsim t_*$.

⁹ In the time-reversal space the vector potential comes with the $\hat{\tau}_3$ matrix, cf Eq. (14.65). One may derive a similar action, where the time-dependent field comes with time-reversal $\hat{\tau}_0$ matrix structure [309, 310]. To this end one may start with, e.g. an ac scalar potential, which is random in space (a uniform-in-space scalar potential is a pure gauge, which does not induce any transitions). Upon averaging over the random spatial component of such scalar potential, one arrives at the action (14.77) with the ac field $\propto \hat{\tau}_0$.

In this so-called dynamical localization scenario the initial diffusive growth of the effective temperature, $T(t) \propto \sqrt{Dt}$, is arrested at longer times and asymptotically $T(t \rightarrow \infty) \rightarrow \sqrt{Dt_*}$. The most famous example of the dynamical localization is provided by the quantum kicked rotor model [311, 312, 313, 314] (although it is not clear to what extent it may be described by the action like (14.77)).

13.2.10 14.10 Problems

14.10.1 Temperature Profile in a Mesoscopic Wire

Electronic distribution function in a short wire with an applied bias V is depicted in Fig. 14.2. This was obtained in an approximation that neglects any electron collisions and relaxation. Lets consider another limit of an intermediate-length wire, where a local electronic temperature, $T_e(x)$, and chemical potential, $\mu(x)$, are established due to electron-electron collisions. On the other hand, the wire is still short enough, so one can disregard electron-phonon collisions. As a result, the electronic temperature is different from the lattice one.

To find the temperature profile, consider the local electron energy $E_e(x)$ balance equation

$$\partial_t E_e = \nabla_x (\kappa(T_e) \nabla_x T_e) + vD (\nabla_x \mu)^2, \quad (14.83)$$

where the last term on the right-hand side represents locally deposited Joule heat and $\kappa(T_e)$ is the thermal conductance. In a metal the latter is given by $\kappa(T_e) = Dc_V(T_e) = (\pi^2/3) \nu D T_e$. (This statement is known as the Wiedemann-Franz law, stating $\kappa/\sigma_D = \mathcal{L}T_e$, where the Lorenz number is $\mathcal{L} = \pi^2/(3e^2)$; see Problem 18.8.1 for a derivation.) In a stationary state one puts $\partial_t E_e = 0$ and $\nabla_x \mu = eV/L$; the latter is a consequence of the charge continuity equation $\partial_t \rho_e = \nabla_x (\nu D \nabla_x \mu)$. Solve stationary equation (14.83) with the boundary conditions $T_e(0) = T_e(L) = 0$ to find the electronic temperature profile $T_e(x)$. What is the ratio of a maximal temperature in the middle of the wire and the applied voltage eV ? Plot the corresponding distribution functions $n(\epsilon, x)$ for a few representative values of $x \in [0, L]$.

14.10.2 Electrodynamics of Disordered Metals

Consider the sigma-model action $S[\hat{Q}, \mathbf{A}, V]$, Eq. (14.48), with both classical and quantum vector and scalar potentials. Expand the action up to the second order in deviations from the metallic stationary point $\hat{Q} = \hat{\Lambda}$ and perform the Gaussian integration over the fluctuations $d^{\text{cl}}, d^{\text{q}}$. Find the effective quadratic action $S_N[\mathbf{A}, V]$. Show that its quantum-classical (i.e. retarded) component has the form

$$S_N^{\text{q-cl}}[\mathbf{A}, V] = \sigma_D \sum_{\mathbf{q}, \omega} (\mathbf{A}_{\mathbf{q}, \omega}^{*\text{q}}, V_{\mathbf{q}, \omega}^{*\text{q}}) \begin{pmatrix} \frac{\omega^2}{Dq^2 - i\omega} & \frac{\mathbf{q}\omega}{Dq^2 - i\omega} \\ \frac{\omega \mathbf{q}}{Dq^2 - i\omega} & \frac{q^2}{Dq^2 - i\omega} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{A}_{\mathbf{q}, \omega}^{\text{cl}} \\ V_{\mathbf{q}, \omega}^{\text{cl}} \end{pmatrix}, \quad (14.84)$$

where $\sigma_D = e^2 \nu D$. The diagonal components of this matrix were already derived in Section 14.6 (cf. Eqs. (14.61) and (14.60)). Derive the advanced and Keldysh parts of this action. Show that the preceding action may be written in terms of the gauge-invariant electric field $\mathbf{E}_{\mathbf{q}, \omega} = i\omega \mathbf{A}_{\mathbf{q}, \omega} + i\mathbf{q} V_{\mathbf{q}, \omega}$ as

$$S_N^{\text{q-cl}}[\mathbf{E}] = \sigma_D \sum_{\mathbf{q}, \omega} \frac{\mathbf{E}_{\mathbf{q}, \omega}^{*\text{q}} \mathbf{E}_{\mathbf{q}, \omega}^{\text{cl}}}{Dq^2 - i\omega}. \quad (14.85)$$

This action describes dynamics of the electric field propagation in a noninteracting disordered metal. We shall discuss its generalization for the interacting case in Chapter 16; see Problem 16.6.1.

The electron current and density are given by variations of this action over the quantum components of the vector and scalar potential correspondingly. One thus finds

$$\mathbf{j}_{\mathbf{q},\omega} = \sigma_D \left[\frac{\omega^2 \mathbf{A}_{\mathbf{q},\omega}^{\text{cl}}}{Dq^2 - i\omega} + \frac{\mathbf{q}\omega V_{\mathbf{q},\omega}^{\text{cl}}}{Dq^2 - i\omega} \right] = \sigma_D \frac{-i\omega \mathbf{E}_{\mathbf{q},\omega}^{\text{cl}}}{Dq^2 - i\omega} \quad (14.86)$$

$$\rho_{\mathbf{q},\omega} = \sigma_D \left[\frac{\omega \mathbf{q} \cdot \mathbf{A}_{\mathbf{q},\omega}^{\text{cl}}}{Dq^2 - i\omega} + \frac{q^2 V_{\mathbf{q},\omega}^{\text{cl}}}{Dq^2 - i\omega} \right] = \sigma_D \frac{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{E}_{\mathbf{q},\omega}^{\text{cl}}}{Dq^2 - i\omega} \quad (14.87)$$

From here, verify the continuity and derive the material relation:

$$i\mathbf{q} \cdot \mathbf{j}_{\mathbf{q},\omega} - i\omega \rho_{\mathbf{q},\omega} = 0; \quad \mathbf{j}_{\mathbf{q},\omega} + D i \mathbf{q} \rho_{\mathbf{q},\omega} = \sigma_D \mathbf{E}_{\mathbf{q},\omega}^{\text{cl}}. \quad (14.88)$$

In real space-time these relations acquire the form

$$\nabla_{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{j} + \partial_t \rho = 0; \quad \mathbf{j} + D \nabla_{\mathbf{r}} \rho = \sigma_D \mathbf{E}^{\text{cl}} \quad (14.89)$$

In equilibrium, one can rewrite the action (14.85) in imaginary time (i.e. Matsubara) formalism, according to the recipe of Section 3.3. Substituting there the material relation, one ends up with the imaginary time action for the density and current fluctuations in the noninteracting metal:

$$S_N[\mathbf{j}, \rho] = \frac{1}{2\sigma_D} \iint d^d \mathbf{r} d^d \mathbf{r}' \iint_0^\beta d\tau d\tau' \mathbf{g}(\mathbf{r}, \tau) \mathcal{D}(\mathbf{r} - \mathbf{r}', \tau - \tau') \mathbf{g}(\mathbf{r}', \tau') \quad (14.90)$$

where $\mathbf{g}(\mathbf{r}, \tau) = \mathbf{j}(\mathbf{r}, \tau) + D \nabla_{\mathbf{r}} \rho(\mathbf{r}, \tau)$ and $\mathcal{D}(\mathbf{q}, \omega_m) = (Dq^2 + |\omega_m|)^{-1}$ is the imaginary time diffuson and $\omega_m = 2\pi mT$. This action was first derived by Levitov and Shytov [315]; see Problem 16.6.1.

14.10.3 Weak Localization Magneto-Conductance

Consider a disordered electronic system in the presence of a static magnetic field, characterized by a classical vector potential $\mathbf{A}(\mathbf{r})$. It enters the action (14.65) through the long derivative $\tilde{\partial}_{\mathbf{r}} \tilde{Q} = \nabla_{\mathbf{r}} \tilde{Q} + i\mathbf{A}(\mathbf{r}) [\hat{\gamma}^{\text{cl}} \hat{\gamma}_3, \tilde{Q}]$. Using the parametrization (14.66), (14.67), show that the action of the diffuson modes (14.40) is not affected by the field. On the other hand, the Cooperon action (14.69) is affected and acquires the following form:

$$iS[c_1, c_2] = -\frac{\pi\nu}{2} \sum_{\epsilon, \epsilon'} \int d\mathbf{r} c_{1;\epsilon\epsilon'}(\mathbf{r}) \left[-D(\nabla_{\mathbf{r}} - 2i\mathbf{A}(\mathbf{r}))^2 - i\epsilon - i\epsilon' \right] c_{2;\epsilon'\epsilon}(\mathbf{r}). \quad (14.91)$$

The corresponding Cooperon propagator in real space, $\mathcal{C}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \epsilon + \epsilon')$, is given by the inverse operator in the square brackets in this expression. Notice the factor of two in front of the vector potential, which shows that the Cooperon behaves as a charge- two particle in the magnetic field (while the diffuson has charge zero).

Let's focus on a uniform magnetic field $H = [\nabla_{\mathbf{r}} \times \mathbf{A}]$, perpendicular to a 2d metallic film. In this case the operator in (14.91) is the Schrödinger operator for the charge-two particle in the uniform field. Its spectrum is given by the familiar Landau levels $D\mathbf{q}^2 \rightarrow 4DH(n + 1/2)$, where $n = 0, 1, 2, \dots$. The weak localization correction (14.72) is $\delta\sigma(\omega) = -(2e^2 D/\pi) \mathcal{C}(\mathbf{r}, \mathbf{r}; \omega)$. Show that it is given by

$$\delta\sigma(H) = -\frac{2e^2 DH}{\pi^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{4DH(n + 1/2) + 1/\tau_\phi}, \quad (14.92)$$

where for the dc limit we substituted $-\mathrm{i}\omega \rightarrow 1/\tau_\phi$, frequency by the dephasing rate. The sum is logarithmically divergent at large n and should be cut off at $4DHn \approx 1/\tau_{\mathrm{el}}$. However, one can consider the magneto-conductance effect $\sigma(H) - \sigma(0)$, which is independent of the UV cutoff. Perform the summation and show that [316]

$$\sigma(H) - \sigma(0) = -\frac{e^2}{2\pi^2} \left[\log \left(\frac{H_\phi}{H} \right) - \Psi \left(\frac{1}{2} + \frac{H_\phi}{H} \right) \right], \quad (14.93)$$

where $H_\phi = (4D\tau_\phi)^{-1} = (2l_\phi)^{-2}$, and $\Psi(z)$ is the Euler digamma function. Plot the magneto-conductance in the range $0 < H < 50H_\phi$. Explain why the magnetoconductance is positive. For the phase-breaking length $l_\phi = 10^{-4}$ cm, calculate the characteristic magnetic field H_ϕ in Gauss. The logarithmic increase of the magnetoconductance is terminated at $H \approx l_{\mathrm{el}}^{-2} \approx (D\tau_{\mathrm{el}})^{-1}$. See, for example, Ref. [307] for experimental manifestations of this phenomenon.

13.3 Mesoscopic Effects

The physical properties of small metallic devices exhibit sample-to-sample fluctuations due to random realizations of the disorder potential. We first study fluctuations of the electron spectrum and density of states, deriving AltshulerShklovskii and Wigner-Dyson statistics (the oscillatory part of the latter requires careful consideration of nonclassical stationary points of the sigma-model). We then characterize mesoscopic fluctuations of the current, including a universal result for small bias conductance, as well as large bias fluctuations of the current-voltage characteristics. Following Nazarov, we consider full counting statistics of quasi-1d diffusive wire and derive the Dorokhov distribution of the eigenvalues of its transmission matrix. Finally, we introduce a generic tunneling action, which is used to study full counting statistics and dynamics of charge transfer through an open chaotic cavity.

13.3.1 15.1 Spectral Statistics

Consider a disordered metallic grain of size L such that $L \gg l_{\mathrm{el}}$, where $l_{\mathrm{el}} = v_{\mathrm{F}}\tau_{\mathrm{el}}$ is the elastic mean free path. The spectrum of the Schrödinger equation consists of a discrete set of levels, ϵ_n , that may be characterized by the sample-specific density of states (DOS), $\nu(\epsilon) = \sum_n \delta(\epsilon - \epsilon_n)$. This quantity fluctuates strongly and usually cannot (and doesn't need to) be calculated analytically. One may average it over realizations of disorder to obtain a mean DOS: $\langle \nu(\epsilon) \rangle_{\mathrm{dis}}$. The latter is a smooth function of energy on the scale of the Fermi energy and thus may be taken as a constant $\langle \nu(\epsilon_{\mathrm{F}}) \rangle_{\mathrm{dis}} \equiv \nu$. This is the DOS that was used in the previous chapter.¹

One may wonder how to describe sample-to-sample (i.e. mesoscopic) fluctuations of the DOS $\nu(\epsilon)$ and, in particular, how much a given spectrum at one energy

ϵ is correlated with itself at another energy ϵ' . To answer this question one may calculate the spectral correlation function

$$R(\epsilon_1, \epsilon_2) \equiv \langle (v(\epsilon_1) - v)(v(\epsilon_2) - v) \rangle_{\mathrm{dis}} = \langle v(\epsilon_1)v(\epsilon_2) \rangle_{\mathrm{dis}} - v^2. \quad (15.1)$$

This function was calculated by Altshuler and Shklovskii [317]. Here we discuss it using the Keldysh nonlinear sigma-model.

Since for a single quantum level $G^{\mathrm{R}} - G^{\mathrm{A}} = -2\pi\mathrm{i}\delta(\epsilon - \epsilon_0)$, see Eqs. (10.31a) and (10.31b), DOS may be written as

⁰¹ Actually, in this section we use the total DOS, not normalized per unit volume and thus having dimensionality of one over energy.

$$\nu(\epsilon) = \frac{i}{2\pi} \text{Tr} \{G^R(\epsilon) - G^A(\epsilon)\} = \frac{1}{2\pi} \text{Tr} \{ \langle \psi_1 \bar{\psi}_1 \rangle - \langle \psi_2 \bar{\psi}_2 \rangle \} = -\frac{1}{2\pi} \langle \dot{\vec{\Psi}} \hat{\sigma}_3 \vec{\Psi} \rangle,$$

where the angular brackets denote quantum (as opposed to disorder) averaging and the indices are in Keldysh space. To generate a DOS at any given energy one adds a source term

$$iS[J] = - \sum_{\epsilon} J_{\epsilon} \int d\mathbf{r} \vec{\Psi}(\epsilon, \mathbf{r}) \hat{\sigma}_3 \vec{\Psi}(\epsilon, \mathbf{r}) = - \iint dt dt' \int d\mathbf{r} \vec{\Psi}(\mathbf{r}, t) J_{t-t'} \hat{\sigma}_3 \vec{\Psi}(\mathbf{r}, t')$$

to the fermionic action (10.35). After averaging over disorder and changing to the $\hat{Q}$ -matrix representation, the DOS source term is translated to

$$iS_{\text{DOS}}[J] = \pi v \int \frac{d\epsilon}{2\pi} J_{\epsilon} \int d\mathbf{r} \text{Tr} \{ \hat{Q}_{\epsilon\epsilon}(\mathbf{r}) \hat{\sigma}_3 \}. \quad (15.2)$$

Then the DOS is generated by $\nu(\epsilon) = \delta \langle Z[J] \rangle_{\text{dis}} / \delta J_{\epsilon}$. It is now clear that $\langle \nu(\epsilon) \rangle_{\text{dis}} = \frac{1}{2} \nu \langle \text{Tr} \{ \hat{Q}_{\epsilon\epsilon} \hat{\sigma}_3 \} \rangle_Q$. Substituting $\hat{Q}_{\epsilon\epsilon} = \hat{\Lambda}_{\epsilon}$, Eq. (14.25), one finds $\langle \nu(\epsilon) \rangle_{\text{dis}} = \nu$, as it should be, of course. It is also easy to check that the fluctuations around $\hat{\Lambda}$ do not change the result (all the fluctuation diagrams cancel owing to the causality constraints). We are now in a position to calculate the correlation function (15.1),

$$R(\epsilon_1, \epsilon_2) \equiv \frac{\delta^2 \langle Z[J] \rangle_{\text{dis}}}{\delta J_{\epsilon_1} \delta J_{\epsilon_2}} - v^2 = v^2 \left[\frac{1}{4} \left\langle \text{Tr} \{ \hat{Q}_{\epsilon_1\epsilon_1} \hat{\sigma}_3 \} \text{Tr} \{ \hat{Q}_{\epsilon_2\epsilon_2} \hat{\sigma}_3 \} \right\rangle_Q - 1 \right]. \quad (15.3)$$

Employing the parametrization (14.38) of the $\hat{Q}$ -matrix and expanding up to second order in the diffusive fluctuations $\hat{\mathcal{W}}$, one finds

$$\text{Tr} \{ \hat{Q}_{\epsilon_1\epsilon_1} \hat{\sigma}_z \} = \frac{1}{2} \left[4 - 2F_{\epsilon_1} d_{\epsilon_1\epsilon_1}^q - 2d_{\epsilon_1\epsilon_1}^q F_{\epsilon_1} + \sum_{\epsilon} (d_{\epsilon_1\epsilon}^{\text{cl}} d_{\epsilon\epsilon_1}^q + d_{\epsilon_1\epsilon}^q d_{\epsilon\epsilon_1}^{\text{cl}}) \right]. \quad (15.4)$$

Since $\langle d^q d^q \rangle_{\mathcal{W}} = 0$, the only nonvanishing terms contributing to Eq. (15.3) are those with no d^{cl} and d^q at all (they cancel the $-v^2$ term in Eq. (15.1)) and those of the type $\langle d^{\text{cl}} d^q d^{\text{cl}} d^q \rangle_{\mathcal{W}}$. Collecting the latter terms, one finds

$$R(\epsilon_1\epsilon_2) = \frac{\nu^2}{16} \int d\mathbf{r} \sum_{\epsilon, \epsilon'} \langle (d_{\epsilon_1\epsilon}^{\text{cl}} d_{\epsilon\epsilon_1}^q + d_{\epsilon_1\epsilon}^q d_{\epsilon\epsilon_1}^{\text{cl}}) (d_{\epsilon_2\epsilon'}^{\text{cl}} d_{\epsilon'\epsilon_2}^q + d_{\epsilon_2\epsilon'}^q d_{\epsilon'\epsilon_2}^{\text{cl}}) \rangle_{\mathcal{W}}. \quad (15.5)$$

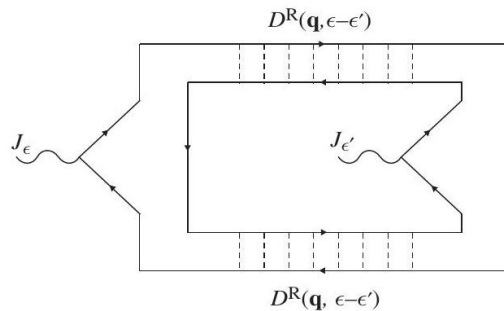


Figure 15.1 Diagram representing mesoscopic fluctuations of the density of states, $R(\epsilon_1, \epsilon_2)$, Eq. (15.3). It is generated from the Wick contraction $\langle d_{\epsilon_1\epsilon}^{\text{cl}} d_{\epsilon\epsilon_1}^q d_{\epsilon_2\epsilon'}^q d_{\epsilon'\epsilon_2}^{\text{cl}} \rangle_{\mathcal{W}} \rightarrow \langle d_{\epsilon_1\epsilon}^{\text{cl}} d_{\epsilon\epsilon_1}^q \rangle_{\mathcal{W}} \langle d_{\epsilon_2\epsilon'}^q d_{\epsilon'\epsilon_2}^{\text{cl}} \rangle_{\mathcal{W}} \propto [\mathcal{D}^R(\mathbf{q}, \epsilon_1 - \epsilon_2)]^2 \delta_{\epsilon_1\epsilon'} \delta_{\epsilon_2\epsilon}$; see Eq. (15.5). There is also a similar diagram for the advanced diffusons.

Now one has to perform Wick's contractions, using the correlation function $\langle d_{\epsilon\epsilon'}^{\text{cl}} d_{\epsilon'\epsilon}^{\text{q}} \rangle \mathcal{W} \propto \mathcal{D}^{\text{R}}(\mathbf{q}, \epsilon - \epsilon')$, which follows from Eq. (14.43), and also take into account that $\int d\epsilon [\mathcal{D}^{\text{R(A)}}(\mathbf{q}, \epsilon - \epsilon_1)]^2 = 0$, owing to the integration of a function that is analytic in the entire upper (lower) half-plane of ϵ . Due to the last observation, the only surviving Wick contractions are those where both energy summations in Eq. (15.5) are killed by the restrictions $\delta_{\epsilon, \epsilon_1}$ and $\delta_{\epsilon', \epsilon_2}$, or vice versa. As a result,

$$R(\epsilon_1, \epsilon_2) = \frac{1}{4\pi^2} \sum_{\mathbf{q}} \left[(\mathcal{D}^{\text{R}}(\mathbf{q}, \epsilon_1 - \epsilon_2))^2 + (\mathcal{D}^{\text{A}}(\mathbf{q}, \epsilon_1 - \epsilon_2))^2 \right] \quad (15.6)$$

where the momentum summation stands for a summation over the discrete modes of the diffusion operator $D\nabla_{\mathbf{r}}^2$ with the zero current (zero derivative) boundary conditions at the edge of the metallic grain. This is the result of Altshuler and Shklovskii [317] for the unitary symmetry class.² Note that the correlation function $R(\epsilon_1, \epsilon_2)$ depends only on the energy difference $\omega = \epsilon_1 - \epsilon_2$. A diagrammatic representation of the $R(\epsilon_1, \epsilon_2)$ function is shown in Fig. 15.1. Adopting an explicit form of the diffusion propagator, we find the spectral correlation function in the form

$$R(\omega) = \frac{1}{2\pi^2} \text{Re} \sum_n \frac{1}{(Dq_n^2 - i\omega)^2} \quad (15.7)$$

where, for example, for a rectangular grain, the wavenumbers of the diffusion operator are quantized as $q_n^2 = \sum_{\mu} \pi^2 n_{\mu}^2 / L_{\mu}^2$, with $\mu = x, y, z$; $n_{\mu} = 0, 1, 2, \dots$, and L_{μ} are the spatial dimensions of the mesoscopic sample.

For a small energy difference $\omega \lesssim E_{\text{Th}} = D/L_{\mu}^2$, where E_{Th} is known as the Thouless energy, only the lowest homogenous mode, $q_n = 0$, of the diffusion operator (the so-called zero mode) may be retained: $R(\omega) = -1/(2\pi^2\omega^2)$. This result is universal, in the sense that it does not depend on any microscopic details of the metallic grain. The fact that the correlation function is negative means that the energy levels are less likely to be found at a small distance ω from each other. This is a manifestation of the energy level repulsion. Note that the correlations decay very slowly - as the inverse square of the energy distance. In fact this result is a part of the celebrated random matrix theory (RMT) statistics [318]. The random matrix prediction for the unitary symmetry class, known as Wigner-Dyson statistics, reads as

$$R_{\text{RMT}}(\omega) = -\frac{1 - \cos(2\pi\omega/\delta)}{2\pi^2\omega^2}, \quad (15.8)$$

where $\delta = 1/\langle \nu \rangle_{\text{dis}}$ is the mean level spacing. In addition to the $-1/(2\pi^2\omega^2)$ term obtained earlier, it contains the oscillatory function of the energy difference with period δ . These oscillations reflect the discreteness of the underlying energy spectrum. They also regularize the behavior of the correlation function at small energy difference $\omega \rightarrow 0$. The oscillatory term cannot be found in the framework of perturbation theory in small fluctuations around the stationary configuration $\hat{\Lambda}$. However, it may be recovered once additional stationary configurations are taken into account [319]. We discuss its derivation in the next section.

For larger energy difference $E_{\text{Th}} \lesssim \omega \lesssim 1/\tau_{\text{el}}$, one may substitute summation over the discrete spectrum of the diffusion operator in Eq. (15.7) by integration over $\mathbf{q}$. This way one finds $R(\omega) \propto -E_{\text{Th}}^{-d/2} \omega^{d/2-2}$. To discuss this result it is convenient to look at the mean square fluctuation of the number of energy levels in the energy window E , defined as $\Sigma(E) =$

⁰² In the orthogonal symmetry class with unbroken time-reversal symmetry, Section 14.7, there are additional degrees of freedom - the Cooperon modes. They lead to the additional contribution to the correlation function (15.6), where $\mathcal{D}^{\text{R(A)}}(\mathbf{q}, \epsilon_1 - \epsilon_2) \rightarrow \mathcal{C}^{\text{R(A)}}(\mathbf{q}, \epsilon_1 - \epsilon_2)$; see Eq. (14.70). Since in the absence of the magnetic fields the diffuson $\mathcal{D}$ and the Cooperon $\mathcal{C}$ have the same analytic form, the correlation function $R(\epsilon_1, \epsilon_2)$ in the orthogonal case is twice as big as in the unitary one.

$\iint_0^E d\epsilon_1 d\epsilon_2 R(\epsilon_1 - \epsilon_2)$. If the energy level sequence were completely random, that is, Poisson distributed, it would result in $\Sigma_P(E) = E/\delta$, where the subscript stands for Poisson. The random matrix result (15.8) means $\Sigma_{\text{RMT}}(E) \propto \ln(E/\delta) \ll \Sigma_P(E)$, where $\delta \ll E \lesssim E_{\text{Th}}$. This signifies a spectacular rigidity of the energy spectrum, due to the level repulsion at energies less than the Thouless energy. At larger energies, $E_{\text{Th}} \lesssim \omega \lesssim 1/\tau_{\text{el}}$, we found that $\Sigma_{\text{AS}}(E) \propto (E/E_{\text{Th}})^{d/2}$. The Altshuler-Shklovskii variance is much larger than the RMT prediction, but still much less than the Poisson limit. This shows that the spectral rigidity persists for beyond the Thouless energy, but takes a different (softer) form than the RMT prediction. Such a level statistics in the intermediate range of energies is essentially responsible for mesoscopic fluctuations of many physical quantities. Some examples are given in what follows; for reviews see [305, 268, 320].

13.3.2 15.2 Wigner-Dyson Statistics

Here, following Altland and Kamenev [321], we discuss how the oscillatory part of RMT Wigner-Dyson statistics (15.8) may be derived in the framework of the Keldysh nonlinear sigma-model. As explained, RMT appears as the $\mathbf{q} = 0$ limit of the generic spectral statistics. The corresponding action may be thus limited to spatially uniform configurations of the $\hat{Q}_{\epsilon\epsilon'}$ -matrix field and takes the form (cf. Eq. (14.33))

$$iS[\hat{Q}] = -i\pi\nu \sum_{\epsilon} \text{Tr} \left\{ \left(\hat{\epsilon} + i\hat{J}_{\epsilon} \right) \hat{Q}_{\epsilon\epsilon} \right\} \quad (15.9)$$

where $\hat{J}_{\epsilon}$ is the source field, introduced in Eq. (15.2).³ The perturbative calculation, which leads us to the smooth part of RMT statistics, was done by considering Gaussian fluctuations around the classical stationary point, Eq. (14.25), of the action (15.9). Here we show that the oscillatory part originates from taking into account other nonclassical stationary points.

Notice that the distribution function F_{ϵ} does not show up in the calculations of the previous section. This is natural, since we discuss the spectrum of the noninteracting system, which is completely independent of the occupation numbers. We can thus put $F_{\epsilon} = 0$ without loss of generality. It is also convenient to discretize the energy ϵ with the small step δ_{ϵ} , such that the relevant energy interval $-E_{\text{Th}} < \epsilon < E_{\text{Th}}$ is divided into $K = 2E_{\text{Th}}/\delta_{\epsilon} \gg 1$ intervals. Then the $\hat{Q}$ -matrix is understood as a $2K \times 2K$ matrix in the product of the energy and Keldysh spaces.

Variation of the action (15.9) with respect to $\hat{Q}$ under the nonlinear constraint $\hat{Q}^2 = 1$ leads to the stationary point equation $[\hat{\epsilon}, \hat{Q}] = 0$; see Section 14.4. It is solved by any diagonal matrix, but the nonlinear constraint $\hat{Q}^2 = 1$ restricts acceptable solutions to $\hat{Q} = \text{diag}\{\pm 1, \dots, \pm 1; \pm 1, \dots, \pm 1\}$, in total 2^{2K} distinct configurations. The causality constraint, that is, the demand for $[\hat{G}^{-1} + i/2\tau_{\text{el}}\hat{Q}]^{-1}$ to be $\text{diag}\{G^{\text{R}}, G^{\text{A}}\}$ in Keldysh space, Section 14.3, selects the single classical configuration $\hat{\Lambda} = \text{diag}\{1, \dots, 1; -1, \dots, -1\}$. It is clear that the action (15.9) of such a classical configuration is zero, $S[\hat{\Lambda}] = 0$ (in the absence of the source $\hat{J}_{\epsilon}$), in agreement with the general structure of the theory; see Eq. (2.53).

To calculate the contribution of Gaussian fluctuations around the classical stationary point, one parametrizes the $\hat{Q}$ -matrix manifold as in Eqs. (14.38) and

(14.39). Expanding to second order in the diffuson modes d^{cl} and d^{q} , one finds for the zero-dimensional action (15.9) (cf. Eq. (14.42))

$$iS[d^{\text{cl}}, d^{\text{q}}] = -i\frac{\pi\nu}{2} \sum_{l,l'=1}^K d_{ll'}^{\text{q}} (\epsilon_l^{-} - \epsilon_{l'}^{+}) d_{l'l}^{\text{cl}}, \quad (15.10)$$

⁰³ In Eq. (15.2) we have chosen it as $\hat{J}_{\epsilon} = J_{\epsilon}\hat{\sigma}_3$ to generate the $G_{\epsilon}^{\text{R}} - G_{\epsilon}^{\text{A}}$ combination. Here it is more convenient to keep it as a generic, but still diagonal in energy and Keldysh space matrix.

where $\epsilon_l^\pm = \epsilon_l \pm i0$ and we ignored the source part $\hat{J}_\epsilon$. Performing Gaussian integration, one finds for the corresponding contribution to the partition function

$$Z_0 \propto \prod_{l,l'} \frac{1}{\epsilon_l^- - \epsilon_{l'}^+} = \exp \left\{ - \sum_{\epsilon, \epsilon'} \ln(\epsilon - \epsilon' - i0) \right\} = 1 \quad (15.11)$$

where we adopted the generic statement that the energy integral of a purely retarded or advanced function must be zero; see also the discussion after Eq. (2.52a). To show it explicitly, one has to involve a specific regularization of the highenergy behavior of the DOS, which renders convergence to the integral. It is possible to do, for example, for Gaussian RMT, where the average DOS takes the form of a semicircle [318]. The explicit calculation then shows [321] that indeed $Z_0 = 1$. It must be the case, however, for any physical regularization, because of the causality structure of the Keldysh correlation functions. Also, according to general principles, the exact partition function must be equal to unity, $Z = 1$. This means that all the other $2^{2K} - 1$ nonclassical stationary points do not contribute to the partition function. They (or rather one of them) still do contribute to the correlation function (15.3).

Consider a nonclassical stationary point, where the $\epsilon_{l'} = \epsilon_1$ position in the retarded block and $\epsilon_l = \epsilon_2$ position in the advanced block have the flipped signs, that is,

$$\hat{\Lambda} = \text{diag} \left\{ \underbrace{1, 1, \dots, 1, -1, 1, \dots, 1}_{K \text{ retarded positions}}; \underbrace{-1, -1, \dots, -1, 1, -1, \dots, -1}_{K \text{ advanced positions}} \right\}. \quad (15.12)$$

We also need to specify the diagonal source matrix, which is chosen to have J_1 in the retarded ϵ_1 and $-J_2$ in the advanced ϵ_2 positions, with all other positions being zero $\hat{J}_\epsilon = \text{diag} \{0, \dots, J_1, \dots, 0; 0, \dots, -J_2, \dots, 0\}$. This source is tailored to produce $G_{\epsilon_1}^R G_{\epsilon_2}^A = \delta^2 Z[\hat{J}] / \delta J_1 \delta J_2$. The spectral correlation function (15.1) is then obtained as $R = -2 \text{Re} [G_{\epsilon_1}^R G_{\epsilon_2}^A] / (2\pi)^2$. We look now for the contribution of the nonclassical stationary point (15.12) to the generating function $Z[\hat{J}]$.

First, the action $S[\hat{\Lambda}]$ is not zero any more. This is allowed, since the field configuration $\hat{\Lambda}$ is not classical. Comparing the action $S[\hat{\Lambda}]$ with $S[\hat{\Lambda}] = 0$, one notices that the former differs by $2\pi\nu\epsilon_1$, due to the flipped sign of the retarded ϵ_1 position, and by $-2\pi\nu\epsilon_2$, due to the flipped sign of the advanced ϵ_2 position. Finally $S[\hat{\Lambda}] = 2\pi\nu(\epsilon_1 - \epsilon_2)$. We look now for the contribution of the Gaussian fluctuations. Inspecting Eqs. (15.10) and (15.11), one understands that each pair of energies with the opposite signs of $\hat{Q}_\epsilon$ brings in the factor $(\epsilon_l - \epsilon_{l'})^{-1}$. The pairs with the same signs of $\hat{Q}_\epsilon$ do not contribute at all, since the corresponding $+\hat{1}$ and $-\hat{1}$ subblocks of $\hat{Q}$ do not allow for any nontrivial rotations. Most of the energy pairs in $\hat{\Lambda}$ are the same as in $\hat{\Lambda}$, and therefore the fluctuation factor is almost the same, that is, Z_0 , Eq. (15.11). One has to correct, though, for the flipped signs of the retarded ϵ_1 and advanced ϵ_2 positions. As a result,

$$\begin{aligned} \tilde{Z}[\hat{J}] &= Z_0 \prod_{\epsilon_l \neq \epsilon_2} \frac{\epsilon_l^- - \epsilon_1^+}{\epsilon_l^- - \epsilon_2 + iJ_2} \prod_{\epsilon_{l'} \neq \epsilon_1} \frac{\epsilon_{l'}^+ - \epsilon_2^-}{\epsilon_{l'}^+ - \epsilon_1 - iJ_1} e^{iS[\hat{\Lambda}]} \\ &= \prod_l \frac{\epsilon_l^- - \epsilon_1^+}{\epsilon_l^- - \epsilon_2 + iJ_2} \prod_{l'} \frac{\epsilon_{l'}^+ - \epsilon_2^-}{\epsilon_{l'}^+ - \epsilon_1 - iJ_1} \frac{iJ_2}{\epsilon_2^- - \epsilon_1^+} \frac{-iJ_1}{\epsilon_1^+ - \epsilon_2^-} e^{iS[\hat{\Lambda}]} \\ &= -\frac{J_1 J_2}{(\epsilon_1 - \epsilon_2)^2} e^{2\pi i \nu (\epsilon_1 - \epsilon_2)} = -\frac{J_1 J_2}{\omega^2} e^{2\pi i \omega / \delta} \end{aligned} \quad (15.13)$$

The ϵ_l -product in the first line runs over all advanced positions, safe for ϵ_2 and corrects for (i) the fact that one should not have included terms $(\epsilon_l^- - \epsilon_1^+)^{-1}$ in Z_0 , since the retarded

ϵ_1 position has now a -1 sign and (ii) instead one needs to include $(\epsilon_l^- - \epsilon_2 + iJ_2)^{-1}$ terms, since the advanced ϵ_2 position has now a +1 sign. We have also taken into account the source, $-iJ_2$, which shifts the ϵ_2 energy, see Eq. (15.9). Similarly, the ϵ_l -product runs over all retarded positions and achieves similar corrections. In the second line in Eq. (15.13) we took into account that $Z_0 = 1$ and completed the two products by one term each, to make them unrestricted. In the third line, we again used the fact that the unrestricted product may be written as $\prod_l \dots = \exp \{ \sum_{\epsilon} \dots \} = 1$, see Eq. (15.11), due to the energy integration of purely retarded or advanced functions.

We now employ the fact that the corresponding contribution to the correlation function is given by $R = -(2\pi^2)^{-1} \text{Re} \delta^2 \tilde{Z}[\hat{J}] / \delta J_1 \delta J_2$ to find that the two stationary points $\hat{\Lambda}$ and $\hat{\tilde{\Lambda}}$ lead exactly to the RMT Wigner-Dyson correlation function (15.8). Notice that $\tilde{Z}[\hat{J}] \propto J_1 J_2$, where J_1 and J_2 are sources at the two energies where the signs of the stationary point matrix were flipped. The first observation is that the nonclassical saddle point $\hat{\tilde{\Lambda}}$ indeed does not contribute to the partition function $\tilde{Z}[0] = 0$. Another observation is that, if one flips any other sign, save the ϵ_1 and ϵ_2 positions, the corresponding contribution to the generating function is bound to be zero. Indeed, the source was chosen to be nonzero only for those two energies. In other words, it is the structure of the observable (and thus the source field) that selects a nonclassical stationary point that matters. As a corollary: different observables call for different nonclassical stationary configurations to be included.

The stationary point calculation requires a large action, which in our case means $\omega/\delta \gg 1$. Therefore, our method is only applicable for the energy window $\delta < \omega < E_{\text{Th}}$. The fact that we were able to obtain the exact result (15.8), valid down to zero energy, is a peculiarity of the unitary symmetry class. The exact results down to zero energy may be obtained with the supersymmetry [290] and, in some cases, with the replica [287] technique. It is still an open problem to achieve this with the Keldysh technique. Another open question is a manifestation of the nonclassical stationary points in electron-electron interaction effects.

13.3.3 15.3 Universal Conductance Fluctuations

One of the most spectacular manifestations of mesoscopic fluctuations is sample to sample variations of electric conductance [305, 322]. In practice small changes of some external parameter, such as magnetic field, carrier density, impurity concentration, and others play the role of switching between the samples. They lead thus to random, but completely reproducible, fluctuations of the conductance around its mean value $g_D = e^2 \nu D / L$, where the DOS ν is understood as being integrated over the cross-section of the sample and L is its length along the current carrying direction. Our goal is to calculate the variance of such fluctuations, $\delta g = \sqrt{\langle (g - g_D)^2 \rangle_{\text{dis}}}$. The remarkable observation, first made by Altshuler [323], and Lee and Stone [324], is that at low enough temperature the variance is universal, $^4 \delta g \propto e^2 / \hbar$, where the proportionality coefficient weakly depends on geometry, but is independent of the average conductance g_D and other microscopic details. The effect is known as universal conductance fluctuations (UCF).

Here we follow the approach of Larkin and Khmel'nitskii [326], who calculated the second moment of the current $K(V_1, V_2) = \langle J(V_1) J(V_2) \rangle_{\text{dis}}$ at two arbitrary voltages. The conductance variance is obtained as the small voltage limit $K = (\delta g)^2 V_1 V_2$. To perform this calculation it is convenient to introduce two replicas of the system which have the same realization as the disorder potential, but may have different external fields, such as, for example, applied voltage or vector potential. The generating function depends thus on two sets of the applied fields $Z[V_s, \mathbf{A}_s]$, where $s = 1, 2$ is the replica index. We use it to generate the current correlator by differentiation over the quantum components $\mathbf{A}_1^q$ and $\mathbf{A}_2^q$; see Eq. (14.55). Since both replicas

have the same realization of the disorder, the averaging procedure of Section 14.2 mixes between them and the

$\check{Q}$ -matrix acquires non-diagonal structure in replica space. Yet the stationary point is replica-diagonal, $\check{\Lambda} = \text{diag} \{ \hat{\Lambda}_1, \hat{\Lambda}_2 \}$. In particular, its Keldysh block is diagonal, $2\hat{F} = \text{diag} \{ 2F(V_1), 2F(V_2) \}$, where $F(V_s)$ is the non-equilibrium distribution function (14.11), which solves the stationary point diffusion equation with the proper boundary conditions.

To account for UCF one needs to take into account replica-off-diagonal fluctuations of the $\check{Q}$ -matrix around such a steady-state non-equilibrium stationary point. First we define the current-current correlation function as

$$K(V_1, V_2) = - \frac{e^2}{4} \frac{\delta^2 Z[V_s, \mathbf{A}_s]}{\delta \mathbf{A}_1^q \delta \mathbf{A}_2^q} \Big|_{\mathbf{A}_s^q=0} = - \frac{e^2}{4} \pi \nu D \langle \text{Tr} \{ \hat{\gamma}^q \check{Q}^{12} \hat{\gamma}^q \check{Q}^{21} \} \rangle_Q \\ + \frac{e^2}{4} (\pi \nu D)^2 \langle \text{Tr} \{ (\check{Q} \nabla_{\mathbf{r}} \check{Q})^{11} \hat{\gamma}^q \} \text{Tr} \{ (\check{Q} \nabla_{\mathbf{r}} \check{Q})^{22} \hat{\gamma}^q \} \rangle_Q \quad (15.14)$$

where the superscripts are replica indices and traces run over the energy and Keldysh spaces. Here we have used Eqs. (14.52) and (14.54) to differentiate the action. We expand now each of the traces on the right-hand side to second order in the diffuson generators $\hat{d}^{\text{cl}}$ and $\hat{d}^q$, Eqs. (14.38) and (14.39), which are now 2×2 matrices in replica space.⁵ Keeping only the terms that do not cancel (but rather double) between the diffuson and Cooperon channels, one finds

$$\text{Tr} \{ (\check{Q} \nabla_{\mathbf{r}} \check{Q})^{ss} \hat{\gamma}^q \} \cong \sum_{\epsilon, \epsilon'} (\nabla_{\mathbf{r}} F_{\epsilon}^s) \left[(d_{\epsilon\epsilon'}^{\text{cl}})^{ss'} (d_{\epsilon'\epsilon}^q)^{s's} + (d_{\epsilon\epsilon'}^q)^{ss'} (d_{\epsilon'\epsilon}^{\text{cl}})^{s's} \right] \\ \text{Tr} \{ \hat{\gamma}^q \check{Q}^{12} \hat{\gamma}^q \check{Q}^{21} \} \cong \sum_{\epsilon, \epsilon'} 2 (d_{\epsilon\epsilon'}^{\text{cl}})^{12} (d_{\epsilon'\epsilon}^{\text{cl}})^{21}$$

where we have omitted the $d^q d^q$ terms, since they vanish upon $\check{Q}$ -integration. We now substitute these expressions into Eq. (15.14) and perform averaging over the fluctuating diffuson modes $d^{\text{cl}(q)}$ according to Eqs. (14.43) and (14.46). In doing so, we employ that the gradient of the stationary non-equilibrium distribution (14.11) is a constant in space. Integrating then twice over the length of the wire L , the result may be written in the Fourier representation

$$L^2 K(V_1, V_2) = (2eD)^2 \sum_{\epsilon, \epsilon'; \mathbf{q}} \left[|\mathcal{D}^{\text{R}}(\mathbf{q}, \omega)|^2 + \frac{1}{2} \text{Re} (\mathcal{D}^{\text{R}}(\mathbf{q}, \omega))^2 \right] (\nabla_{\mathbf{r}} F_{\epsilon}^1) (\nabla_{\mathbf{r}} F_{\epsilon'}^2), \quad (15.15)$$

where $\omega = \epsilon - \epsilon'$ and $\nabla_{\mathbf{r}} F_{\epsilon}^s = (F_{\epsilon - eV_s}^{\text{eq}} - F_{\epsilon}^{\text{eq}}) / L$ and we took into account the factor of two, due to the Cooperon modes.

⁰⁴ The higher moments and, more generally, the conductance distribution function also exhibit a certain degree of universality [325].

⁰⁵ Since we calculate directly the dc current (unlike the linear response diagrammatics [323, 324], which deals with the low-frequency ac response), we should be careful not to include thermodynamic persistent currents. The latter, though almost zero in average, have mesoscopic fluctuations comparable to that of the dissipative currents [327] we are after. One way to exclude them is to work consistently in the time-reversal symmetric (orthogonal) ensemble, where the thermodynamic currents are absent. Then the Cooperon contributions are similar to the diffuson ones. One may show that the diffuson and Cooperon terms mutually cancel each other if one expands each of the two $\check{Q}$ -matrices in $\text{Tr} \{ (\check{Q} \nabla_{\mathbf{r}} \check{Q})^{ss} \hat{\gamma}^q \}$ to first order in $\check{W}$, but that they double the result if one expands one of the $\check{Q}$ -matrices to second order in $\check{W}$, while putting the other one to be $\check{\Lambda}$. For the $\text{Tr} \{ \hat{\gamma}^q \check{Q}^{12} \hat{\gamma}^q \check{Q}^{21} \}$ term the situation is exactly opposite, i.e. only the term with each of the $\check{Q}$ -matrices expanded to first order survives.

Let us first analyze this result in the linear response regime, where the distribution function may be approximated as $\nabla_{\mathbf{r}} F_{\epsilon}^s \approx -\partial_{\epsilon} F_{\epsilon}^{\text{eq}} e V_S / L$; see Eq. (14.11). Since the conductance is given by $g = J/V$, one finds for the conductance variance

$$\langle (\delta g)^2 \rangle_{\text{dis}} = K(V_1, V_2) / V_1 V_2 = g_1^2 + \frac{1}{2} g_2^2 \quad (15.16)$$

where

$$g_1^2 = \left(\frac{2e^2 D}{\pi \hbar L^2} \right)^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2T} \mathcal{F}\left(\frac{\omega}{2T}\right) \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{(Dq^2)^2 + \omega^2} \quad (15.17a)$$

$$g_2^2 = \left(\frac{2e^2 D}{\pi \hbar L^2} \right)^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2T} \mathcal{F}\left(\frac{\omega}{2T}\right) \text{Re} \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{(Dq^2 - i\omega)^2} \quad (15.17b)$$

and $\mathcal{F}(x) = [x \coth(x) - 1] / \sinh^2(x) = \frac{1}{4} \int dy \partial_y \tanh\left(y + \frac{x}{2}\right) \partial_y \tanh\left(y - \frac{x}{2}\right)$. Notice that $\int dx \mathcal{F}(x) = 1$ and thus at a low temperature $T \ll E_{\text{Th}} = D/L^2$ the $\mathcal{F}(x)$ function may be regarded as a delta-function. As a result, at low temperature

$$g_1^2 = g_2^2 = \left(\frac{2e^2}{\pi \hbar} \right)^2 \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{(Lq)^4} \quad (15.18)$$

The $\mathbf{q}$ -summation should be understood as a sum over eigenvalues of the diffusion operator within the metal, with zero boundary conditions at the metallic contacts (no diffuson fluctuations) and zero current boundary conditions at the contacts with an insulator. For example, for a quasi-one-dimensional wire of length L with metallic leads the quantization condition is $qL = \pi n$, where $n = 1, 2, \dots$ and thus $\sum_{\mathbf{q}} (Lq)^{-4} = 1/90$. Therefore we found that the conductance variance $\langle (\delta g)^2 \rangle_{\text{dis}} = c_d (e^2/2\pi\hbar)^2$, where c_d is a dimensionality- and geometry-dependent coefficient, for example, $c_1 = 4/15$ (notice that we deal here with the spinless carriers). The fact that this coefficient is insensitive to the strength of disorder constitutes the essence of universality of conductance fluctuations.

At a higher temperature $T \gg E_{\text{Th}}$, one may put $\mathcal{F}(x) \approx \mathcal{F}(0) = 1/3$ and find

$$g_1^2 \approx \left(\frac{2e^2}{\pi \hbar} \right)^2 \frac{E_{\text{Th}}}{T} \frac{\pi}{6} \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{(Lq)^2 + (L/l_{\phi})^2} \quad (15.19)$$

while $g_2^2 \ll g_1^2$. Here we have introduced the dephasing length $l_{\phi}(T)$ as a longdistance cutoff, which exists, for example, due to electron-electron interactions [329,330]. Therefore the conductance variance decreases with temperature as $(E_{\text{Th}}/T) \min \left\{ 1, (E_{\text{Th}}\tau_{\phi})^{1-d/2} \right\}$, where $\tau_{\phi} = l_{\phi}^2/D$, in $d \leq 2$. In the case $2 < d < 4$ the conductance variance scales as $(E_{\text{Th}}/T)^{2-d/2}$. This is a reflection of the fact that the spectral statistics partially loses its rigidity at energies larger than the Thouless energy, Section 15.1.

For $V_s > E_{\text{Th}}$ and $T = 0$ the energy integrals in Eq. (15.15) are restricted to the intervals $0 < \epsilon < eV_s$ due to the factors $\nabla_{\mathbf{r}} F_{\epsilon}^s = (F_{\epsilon-eV_s}^{\text{eq}} - F_{\epsilon}^{\text{eq}}) / L$. One can then define the correlation function of the differential conductances as $K_g = \partial_{V_1} \partial_{V_2} K(V_1, V_2)$ [326]. Since the voltages enter only as the upper limits of integrations over ϵ and ϵ' , the differentiation simply removes the energy integrals. As a result one finds for, for example, the $|\mathcal{D}^{\text{R}}(\mathbf{q}, \omega)|^2$ part of the correlation function

$$K_g = \left(\frac{2e^2}{\pi \hbar} \right)^2 \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{(Lq)^4 + \frac{e^2(V_1 - V_2)^2}{E_{\text{Th}}^2}} \propto \left(\frac{e^2}{\hbar} \right)^2 \left(\frac{E_{\text{Th}}}{e|V_1 - V_2|} \right)^{2-d/2} \quad (15.20)$$

where in the last approximate equality we assumed $e|V_1 - V_2| > E_{\text{Th}}$ and substituted the eigenvalue summation by integration. The variance of the random part of the current-voltage characteristic is given by $\langle (\delta J(V))^2 \rangle_{\text{dis}} = \iint_0^V dV_1 dV_2 K_g(V_1, V_2) \approx (e^2/\hbar)^2 [V(E_{\text{Th}}/e) + V^{d/2}(E_{\text{Th}}/e)^{2-d/2}]$, where the first term on the right-hand side comes from the diagonal $e|V_1 - V_2| \lesssim E_{\text{Th}}$, and the second one comes from the off-diagonal long-range correlations. For $eV \gg E_{\text{Th}}$, the diagonal part dominates in dimensions $d < 2$, leading to $|\delta J(V)| \propto (e^2/\hbar) \sqrt{VE_{\text{Th}}/e}$. This means that the current-voltage characteristics executes a random walk with the voltage "step" E_{Th}/e and the corresponding current "step" $eE_{\text{Th}}/\hbar$ in a random direction. (There is, of course, a linear, nonrandom part of the current-voltage curve, $\langle J(V) \rangle_{\text{dis}} = g_D V$.) For dimensions $d > 2$ the long-range part dominates the correlator and one finds $|\delta J(V)| \propto (e^2/\hbar) V^{d/4} (E_{\text{Th}}/e)^{1-d/4}$. Therefore, the random part is much more profound and the deviations from the linear current-voltage characteristic scale as $|\delta J(V)| \propto V^{3/4}$ in $d = 3$.

13.3.4 15.4 Full Counting Statistics in a Disordered Wire

In this section we discuss the statistics of quantum fluctuations of the current through a disordered mesoscopic wire. We have already encountered this problem in Section 13.3, where we dealt with the full counting statistics of a single quantum channel characterized by the tunneling probability $|t|^2$. We arrived at the conclusion that the transmitted charge exhibits a binomial distribution, with the generating function $Z(\eta)$ given by Eq. (13.35). A disordered quasi-one-dimensional wire may be considered as a collection of quantum channels with transmission probabilities being randomly distributed, reflecting the randomness of the quenched disorder potential in the wire. Our goal here is to calculate the generating function of the current cumulants, which leads to shot noise, third moment, and so on. We shall find that it may be obtained from the single channel result (13.35) by averaging it over a certain distribution of transmissions $\mathcal{P}(|t|^2)$, known as the Dorokhov distribution [331]. Both the distribution function itself and the way it emerges from the nonlinear sigma-model [332] are rather educating.

Consider two leads with the chemical potentials shifted by an externally applied voltage eV and connected to each other by a diffusive quasi-one-dimensional wire of length L . The wire conductance is $g_D = \sigma_D/L$. Electron transport along the wire is fully described by the disorder-averaged generating function $Z[\eta] = \int \mathbf{D}[\hat{Q}] \exp(iS[\hat{Q}, A_\eta])$. The action is given by (14.48), while the auxiliary vector potential $\hat{A}_\eta$ enters the problem through the covariant derivative (14.49). We choose $\hat{A}_\eta$ to be purely quantum, that is, without the classical component, as

$$\hat{A}_\eta(t) = \frac{\hat{\gamma}^q}{2L} \begin{cases} \eta, & 0 < t < t_0, \\ 0, & \text{otherwise.} \end{cases} \quad (15.21)$$

Here the quantum Keldysh matrix $\hat{\gamma}^q$ is given by (10.40) and η is the already familiar, see Section 13.3, counting field. The action $S[\hat{Q}, A_\eta]$ is accompanied by the boundary conditions on the $\hat{Q}(x)$ -matrix at the two ends of the wire:

$$\hat{Q}(0) = \begin{pmatrix} 1 & 2F_\epsilon \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \hat{Q}(L) = \begin{pmatrix} 1 & 2F_{\epsilon-eV} \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (15.22)$$

Knowing $Z[\eta]$, one can find then any moment $\langle q^n \rangle$ of the charge transferred between reservoirs during the time of measurement t_0 via differentiation of $Z[\eta]$ with respect to the counting field η . The irreducible cumulants are defined as $\mathcal{C}_1 = \langle q \rangle = q_0$ and $\mathcal{C}_n = \langle (q - q_0)^n \rangle$ with $n = 2, 3, \dots$, where $q = \int_0^{t_0} J(t)dt$ and $q_0 = t_0 g_D V = t_0 \langle J \rangle$, where g_D is the average diffusive

conductance. They may be found through the expansion of the logarithm of $Z[\eta]$ in powers of the counting field:

$$\ln Z[\eta] = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(i\eta)^n}{n!} \mathcal{C}_n. \quad (15.23)$$

We calculate $Z[\eta]$ in the stationary path approximation. The latter disregards both the localization effects and mesoscopic fluctuations of the counting statistics. That is, $\mathcal{C}_n$, which we are after, are disorder-averaged moments of the quantum fluctuations. To this end we look for a stationary configuration $\hat{Q}$, which extremizes the action $S[\hat{Q}, A_\eta]$, with the boundary conditions (15.22). The difficulty is that the action $S[\hat{Q}, A_\eta]$ depends explicitly on the quantum vector potential A_η and the solution of the corresponding stationary point equation is not known for an arbitrary A_η . This obstacle can be overcome by realizing that the spatially uniform vector potential (15.21) is a pure gauge and it can be gauged away from the action $S[\hat{Q}, A_\eta] \rightarrow S[\hat{Q}_\eta]$ by the gauge transformation

$$\hat{Q}(x; t, t') = e^{ix\hat{A}_\eta(t)} \hat{Q}_\eta(x; t, t') e^{-ix\hat{A}_\eta(t')}. \quad (15.24)$$

It comes with a price, though: the boundary conditions (15.22) change accordingly,

$$\hat{Q}_\eta(0) = \hat{Q}(0), \quad \hat{Q}_\eta(L) = e^{-i\eta\hat{\gamma}^q/2} \hat{Q}(L) e^{i\eta\hat{\gamma}^q/2} \quad (15.25)$$

The advantage of this transformation is that the stationary path equation for $\hat{Q}_\eta$, which is nothing else but the Usadel equation (14.34)

$$D \frac{\partial}{\partial x} \left(\hat{Q}_\eta \frac{\partial \hat{Q}_\eta}{\partial x} \right) = 0 \quad (15.26)$$

can be solved explicitly now. To this end notice that, according to Eq. (15.26), $\hat{Q}_\eta \partial_x \hat{Q}_\eta = -\partial_x \hat{Q}_\eta \hat{Q}_\eta = \hat{J}$ is a constant, that is, x -independent, matrix. Since $\hat{Q}_\eta^2 = \hat{1}$, $\hat{J}$ anti-commutes with $\hat{Q}_\eta$, that is, $\hat{Q}_\eta \hat{J} + \hat{J} \hat{Q}_\eta = 0$. As a result, one finds $\hat{Q}_\eta(x) = \hat{Q}_\eta(0) \exp(\hat{J}x)$. Putting $x = L$ and multiplying by $\hat{Q}_\eta(0)$ from the left, one expresses the yet unknown matrix $\hat{J}$ through the boundary conditions (15.25): $\hat{J} = L^{-1} \ln [\hat{Q}_\eta(0) \hat{Q}_\eta(L)]$.

Having determined the stationary configuration of the $\hat{Q}_\eta$ matrix, for a nonzero counting field η , one substitutes it back into the action $S[\hat{Q}_\eta]$ to find the generating function:

$$\ln Z[\eta] = iS[\hat{Q}_\eta] = -\frac{\pi v D}{4} \text{Tr} \left\{ (\partial_x \hat{Q}_\eta)^2 \right\} = \frac{\pi v D}{4} \text{Tr} \left\{ \hat{J}^2 \right\},$$

where we used that $\partial_x \hat{Q}_\eta = -\hat{J} \hat{Q}_\eta = \hat{Q}_\eta \hat{J}$ and $\hat{Q}_\eta^2 = \hat{1}$. Calculating the time integrals, one goes to the Wigner transform $\iint dt dt' \rightarrow t_0 \int \frac{d\epsilon}{2\pi}$, where t_0 emerges from the integral over the central time, and finds

$$\ln Z[\eta] = \frac{\pi g_D t_0}{4} \int \frac{d\epsilon}{2\pi} \text{Tr} \ln^2 \left[\hat{Q}(0) e^{-i\eta\hat{\gamma}^q/2} \hat{Q}(L) e^{i\eta\hat{\gamma}^q/2} \right]. \quad (15.27)$$

We analyze Eq. (15.27) in the zero-temperature limit, $T = 0$, where the distribution function $F_\epsilon = \tanh(\epsilon/2T) \rightarrow \text{sign}(\epsilon)$. The algebra can be simplified by performing the rotation $\hat{Q} = \hat{O}^{-1} \hat{Q} \hat{O}$ with the help of the matrix

$$\hat{O} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}. \quad (15.28)$$

One should note also that $\hat{O}^{-1} \exp(\pm i\eta \hat{\gamma}^q/2) \hat{O} = \exp(\pm i\eta \hat{\sigma}_3/2)$. It is not difficult to show that for $T = 0$ the only energy interval that contributes to the trace in Eq. (15.27) is $0 < \epsilon < eV$. Furthermore, in this interval the rotated $\hat{Q}$ -matrices are energy independent and given by

$$\hat{Q}(0) = \begin{pmatrix} -1 & -2 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \hat{Q}(L) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -2 & -1 \end{pmatrix}. \quad (15.29)$$

As a result, the ϵ -integration in Eq. (15.27) gives a factor of eV and, inserting $\hat{Q}$ into $\ln Z[\eta]$, the latter reduces to

$$\ln Z[\eta] = \frac{g_D eV t_0}{8} \text{Tr} \ln^2 \begin{pmatrix} -1 + 4e^{i\eta} & 2 \\ -2e^{i\eta} & -1 \end{pmatrix}. \quad (15.30)$$

Since the trace is invariant with respect to the choice of basis, it is convenient to evaluate it in the basis where the matrix under the logarithm in Eq. (15.30) is diagonal. Solving the eigenvalue problem and calculating the trace, one finds

$$\ln Z[\eta] = g_D eV t_0 \ln^2 \left[\sqrt{e^{i\eta}} + \sqrt{e^{i\eta} - 1} \right] \quad (15.31)$$

Knowing $\ln Z[\eta]$, one can extract the cumulants by expanding it in powers of η and employing Eq. (15.23). For example, $\mathcal{C}_1 = q_0$, $\mathcal{C}_2 = q_0/3$, while $\mathcal{C}_3 = q_0/15$, and so on. Notice that to derive the full generating function, we had to consider the nonclassical stationary configuration of the $\hat{Q}$ -matrix field. This configuration was selected by a quantum source A_η , which is necessary to generate the proper observable. The situation is thus rather similar to the one we encountered in calculation of the Wigner-Dyson statistics in Section 15.2.

The generating function (15.31) of the counting statistics in the disordered wire may be obtained from the single channel result $\ln Z[\eta, |\mathbf{t}|^2]$, Eq. (13.35), by averaging the latter over the distribution function of channel transparencies:

$$\ln Z[\eta] = \int_0^1 d|\mathbf{t}|^2 \mathcal{P}(|\mathbf{t}|^2) \ln Z[\eta, |\mathbf{t}|^2] \quad (15.32)$$

To find the distribution function $\mathcal{P}(|\mathbf{t}|^2)$ it is convenient to define $z = e^{i\eta} - 1$ and change the integration variable to $r = \sqrt{1 - |\mathbf{t}|^2}$. Then one finds for the z -derivative of Eq. (15.32)

$$g_D eV t_0 \frac{\ln(\sqrt{z+1} + \sqrt{z})}{\sqrt{z}\sqrt{z+1}} = \frac{eV t_0}{2\pi} \int_0^1 2r \, dr \mathcal{P}(r) \frac{1 - r^2}{1 + z - zr^2}$$

It is now a simple matter to check that the only way this relation may be satisfied for any z is if $\mathcal{P}(r) = \pi g_D / (1 - r^2) r$. As a result, one finds the celebrated Dorokhov [331] distribution of the transmission probabilities of individual quantum channels in a disordered wire:

$$\mathcal{P}(|\mathbf{t}|^2) = \frac{\pi g_D}{|\mathbf{t}|^2 \sqrt{1 - |\mathbf{t}|^2}} \quad (15.33)$$

The surprising feature of this distribution is that it is bimodal, that is, it exhibits two peaks: a strong one near $|\mathbf{t}|^2 = 0$ and a weaker one near $|\mathbf{t}|^2 = 1$. This means that, while most of the channels are blocked by the disorder potential, there is always a fraction of them that are almost completely transparent. Notice that to make the distribution normalizable, one needs to modify it at exponentially small transmission probabilities. Such a modification, however, is inconsequential for calculation of any moment of $|\mathbf{t}|^2$, and thus for any reasonable observable. One may view, therefore, the normalization of the Dorokhov distribution (15.33) as a fitting parameter to reproduce correctly the average Landauer conductance of the diffusive wire, $g_D = \langle |\mathbf{t}|^2 \rangle / (2\pi)$, where the angular brackets imply integration with the measure (15.33).

Once the normalization is fixed, one may calculate other observables. For example, the average shot noise, according to Eq. (13.19), is given by [334, 262]

$$\langle \mathcal{S}(V) \rangle_{\text{dis}} = \frac{|2eV|}{2\pi} \langle |\mathbf{t}|^2 (1 - |\mathbf{t}|^2) \rangle = \frac{|2eV|g_D}{2} \int_0^1 d|\mathbf{t}|^2 \sqrt{1 - |\mathbf{t}|^2} = \frac{|2eV|g_D}{3}, \quad (15.34)$$

which is one-third of the Schottky value $|2eV|g_D = 2eJ$ (in agreement with the second cumulant quoted after Eq. (15.31)). We found that the binomial nature of the charge transport, along with the Dorokhov distribution of the transmissions, results in the shot noise suppression by the so-called Fano factor of $1/3$.⁶

13.3.5 15.5 Tunneling Action

Consider two disordered metallic leads separated by a tunneling barrier. The setup is described by the so-called tunneling action, which we already employed in Section 13.6:

$$S_T = \int_C dt \int_{\mathbf{r} \in L} d\mathbf{r} \int_{\mathbf{r}' \in R} d\mathbf{r}' [W_{\mathbf{r}\mathbf{r}'} \bar{\psi}_L(\mathbf{r}) \psi_R(\mathbf{r}') + W_{\mathbf{r}'\mathbf{r}}^* \bar{\psi}_R(\mathbf{r}') \psi_L(\mathbf{r})] \quad (15.35)$$

⁶ An alternative way [335] to obtain the Fano factor of $1/3$ is to look for the noise power in the form

$$\langle \mathcal{S}(V) \rangle_{\text{dis}} = -\frac{e^2}{2} \frac{\delta^2 Z[\mathbf{A}]}{\delta (\mathbf{A}^q)^2} = -\frac{e^2 \pi v D}{2} \text{Tr} \{ \hat{\gamma}^q \hat{Q} \hat{\gamma}^q \hat{Q} - \hat{1} \} = g_D \int_0^L \frac{dx}{L} \int d\epsilon [1 - F_\epsilon^2(x)]$$

where we used Eq. (14.54) in the stationary point approximation $\hat{Q} = \hat{\Lambda}$. We now substitute the two-step zero temperature distribution function $F_\epsilon(x) = (1 - x/L) \text{sign}(\epsilon) + (x/L) \text{sign}(\epsilon - eV)$, Eq. (14.11), and perform the energy and coordinate integrations. This way, we find the same result as in Eq. (15.34), where $\psi_{L(R)}$ and $\bar{\psi}_{L(R)}$ are fermionic fields describing annihilation and creation of electrons to the left (right) of the tunneling barrier. The $W_{\mathbf{r}\mathbf{r}'}$ is a tunneling matrix restricted to the vicinity of the junction, since the overlap of electron wavefunctions decay exponentially away from it. Consider, for example, a pointlike (pinhole) tunneling, where $W_{\mathbf{r}\mathbf{r}'} = W \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$. To find a relation between the matrix element W and the tunneling probability $|\mathbf{t}|^2$ through the pinhole one needs to sum over all partial amplitudes. For example, an electron may go directly from the left lead to the right lead with an amplitude $\propto W$. Alternatively it may go to the right lead, then back to the left and then finally back to the right one. The corresponding amplitude is $\propto W(i\pi\nu)^2 |W|^2$, where the two factors $(i\pi\nu)$ appear due to summation of the perturbation theory energy denominators over intermediate virtual states $\sum_k (\epsilon - \xi_k)^{-1}$ (for simplicity we assume the same DOS in the left and right leads, $\nu_R = \nu_L = \nu$). Collecting all such "excursions" of going back and forth between the leads and summing the corresponding geometric series, one finds for the tunneling probability

$$|\mathbf{t}|^2 = (2\pi\nu)^2 \left| \frac{W}{1 + (\pi\nu)^2 |W|^2} \right|^2. \quad (15.36)$$

For a more detailed derivation of this relation see appendix C of [336].

Since the tunneling action (15.35) is quadratic in fermion fields, the Gaussian integration over them is straightforward, leading to the disorder-averaged action of the form

$$\langle Z \rangle_{\text{dis}} = \int \mathbf{D} [\hat{Q}_L, \hat{Q}_R] \exp \left(iS [\hat{Q}_L, \hat{Q}_R] \right),$$

$$iS = -\frac{\pi v}{4\tau_{\text{el}}} \sum_{a=L,R} \text{Tr} \left\{ \hat{Q}_a^2 \right\} + \text{Tr} \ln \begin{pmatrix} \hat{G}_L^{-1} + \frac{i}{2\tau_{\text{el}}} \hat{Q}_L & \hat{W} \\ \hat{W}^\dagger & \hat{G}_R^{-1} + \frac{i}{2\tau_{\text{el}}} \hat{Q}_R \end{pmatrix}. \quad (15.37)$$

Deriving Eq. (15.37), one has to introduce two $\hat{Q}$ -matrices to decouple the disorder mediated four-fermion terms, Eq. (14.19), in each of the two leads independently. It was assumed for simplicity that both leads are characterized by equal elastic mean free times and electronic densities of states. Equation (15.37) exhibits the 2×2 matrix structure in the space of left-right leads. Note also that the tunneling matrix elements $\hat{W}$ form a unit matrix in the Keldysh subspace.

Introducing the notation $\hat{\mathbf{G}}_a^{-1} = \hat{G}_a^{-1} + \frac{i}{2\tau_{\text{el}}} \hat{Q}_a$, one identically rewrites the last term of the action $iS [\hat{Q}_L, \hat{Q}_R]$ in Eq. (15.37) as

$$\text{Tr} \ln \begin{pmatrix} \hat{\mathbf{G}}_L^{-1} & \hat{W} \\ \hat{W}^\dagger & \hat{\mathbf{G}}_R^{-1} \end{pmatrix} = \text{Tr} \ln \begin{pmatrix} \hat{\mathbf{G}}_L^{-1} & 0 \\ 0 & \hat{\mathbf{G}}_R^{-1} \end{pmatrix} + \text{Tr} \ln \left[\hat{1} + \begin{pmatrix} 0 & \hat{\mathbf{G}}_L \hat{W} \\ \hat{\mathbf{G}}_R \hat{W}^\dagger & 0 \end{pmatrix} \right].$$

Expanding now $\text{Tr} \ln \hat{\mathbf{G}}_a^{-1}$ in gradients of the $\hat{Q}_a$ matrix around the saddle point $\hat{\Lambda}_a$, one obtains the sigma-model action (14.33) for each of the two leads independently. The coupling between them is provided by the second term on the right-hand side, which defines the tunneling action $iS_T [\hat{Q}_L, \hat{Q}_R]$. To proceed, let us expand the logarithm in powers of $\hat{W}$ and employ the local nature of the tunneling matrix elements, which allows us to substitute $\hat{\mathbf{G}}_a \rightarrow \hat{\mathbf{G}}_a(\mathbf{r}, \mathbf{r}) = -i\pi\nu\hat{Q}_a$, see Eq. (14.22). This way one finds for the tunneling part of the action

$$iS_T [\hat{Q}_L, \hat{Q}_R] = -\sum_{l=1}^{\infty} \frac{(i\pi\nu)^{2l}}{l} \text{Tr} \left(\hat{Q}_L \hat{W} \hat{Q}_R \hat{W}^\dagger \right)^l = \text{Tr} \ln \left[\hat{1} + \pi^2 v^2 |W|^2 \hat{Q}_L \hat{Q}_R \right]$$

Employing the commutativity under the trace operation, the last logarithm may be written as $\ln \left[\hat{1} + \pi^2 v^2 |W|^2 \hat{Q}_R \hat{Q}_L \right]$. It is convenient to take the half sum of the two: $\frac{1}{2} \text{Tr} \ln \left[1 + (\pi v |W|)^4 + (\pi v |W|)^2 (\hat{Q}_L \hat{Q}_R + \hat{Q}_R \hat{Q}_L) \right]$, where we used that $\hat{Q}_a^2 = \hat{1}$. Since, due to causality, $\text{Tr} \left\{ \hat{Q}_a^2 \right\} = 0$, see the discussion after Eq. (14.26), $iS_T [\hat{Q}_L, \hat{Q}_R] = 0$, if $\hat{Q}_L = \hat{Q}_R$. To explicitly implement this constraint it is convenient to subtract a $\hat{Q}_a$ -matrix-independent constant $\frac{1}{2} \text{Tr} \ln [1 + (\pi v |W|)^2]^2$. Employing the relation (15.36) between the $\hat{W}$ matrix and channel transmissions, one obtains for the tunneling action [337, 338, 339]

$$iS_T [\hat{Q}_L, \hat{Q}_R] = \frac{1}{2} \sum_n \text{Tr} \ln \left[\hat{1} - \frac{|\mathbf{t}_n|^2}{4} (\hat{Q}_L - \hat{Q}_R)^2 \right] \quad (15.38)$$

where we used the channel basis, where the $\hat{W}$ matrix is diagonal. If all transmissions are small, $|\mathbf{t}_n|^2 \ll 1$, one may expand Eq. (15.38) to the leading order and find

$$iS_T [\hat{Q}_L, \hat{Q}_R] = -\frac{\pi g_T}{4} \text{Tr} \left\{ (\hat{Q}_L - \hat{Q}_R)^2 \right\} \quad (15.39)$$

where $g_T = \sum_n |\mathbf{t}_n|^2 / (2\pi)$ is the Landauer tunneling conductance (13.10) in units of $e^2/\hbar$. This expression appears to be a direct generalization of the gradient term in the sigma-model action (14.33), with the substitution $g_D = \hbar\nu D \rightarrow g_T$. Equation (15.38) goes beyond the weak tunneling limit and allows us to treat the mesoscopic transport in an arbitrary two-terminal

geometry. Its generalization for the multiterminal case was developed by Nazarov et al. [337, 340, 341].

As the first application of Eq. (15.38) we obtain the Levitov formula for the full counting statistics, Section 13.3. As was explained previously, Eq. (15.25), the counting field η introduces the twisted boundary conditions, which in our present case read as

$$\hat{Q}_L = \hat{\Lambda}_L, \quad \hat{Q}_R = e^{-i\eta\hat{\gamma}^q/2} \hat{\Lambda}_R e^{i\eta\hat{\gamma}^q/2} \quad (15.40)$$

where we used that the $\hat{Q}_a$ -matrices of the two metallic leads may be fixed to their stationary configurations $\hat{\Lambda}_a$. To evaluate the trace logarithm in Eq. (15.38) it is convenient to perform the rotation (15.28), which leads to

$$\hat{Q}_L - \hat{Q}_R = 2 \begin{pmatrix} F_L - F_R & (1 - F_R)e^{-i\eta} - (1 - F_L) \\ (1 + F_R)e^{i\eta} - (1 + F_L) & F_R - F_L \end{pmatrix}_K,$$

The square of this matrix is proportional to the 2×2 unit matrix with the proportionality coefficient $(1 + F_R)(1 - F_L)(1 - e^{i\eta}) + (1 - F_R)(1 + F_L)(1 - e^{-i\eta})$. As a result, the generating function

$$Z[\eta] = e^{iS_T[\hat{Q}_L, \hat{Q}_R]} = e^{\sum_{n,\epsilon} \ln[1 + |\mathbf{t}_n|^2 n_L(1 - n_R)(e^{i\eta} - 1) + |\mathbf{t}_n|^2 n_R(1 - n_L)(e^{-i\eta} - 1)]} \quad (15.41)$$

coincides with Eq. (13.31), which was derived in Section 13.3 assuming ballistic one-dimensional leads. We have used the fact here that $F_{L(R)} = 1 - 2n_{L(R)}$, where $n_L = n_F(\epsilon)$ and $n_R = n_F(\epsilon - eV)$ are the Fermi occupation functions. Our present derivation shows that as long as the leads are good metals, their nature does not affect the counting statistics of a mesoscopic device.

13.3.6 15.6 Chaotic Cavity

As another example, we consider a 0d metallic grain or cavity connected to the left and right metallic leads by ideal reflectionless (i.e. $|\mathbf{t}_n|^2 = 1$) contacts having N_L and N_R open channels, respectively. The zero dimensional nature of the cavity is ensured by the condition $eV, T \ll E_{Th}$ and manifests itself in the fact that the cavity $\hat{Q}_C$ -matrix may be taken as a constant in space. Moreover, if $T \ll eV$ the $\hat{Q}_C$ -matrix is energy independent in the entire energy interval $0 < \epsilon < eV$, where V is the voltage applied between the left and right leads. The tunneling action of the cavity is given by $iS_C[\eta, \hat{Q}_C] = iS_T[\hat{Q}_L, \hat{Q}_C] + iS_T[\hat{Q}_C, \hat{Q}_R]$, where the $\hat{Q}_{L(R)}$ -matrices of the two leads are the same as in Eq. (15.40). The 0 d $\hat{Q}_C$ -matrix of the cavity may be parametrized as $\hat{Q}_C = e^{-i\eta_C \hat{\gamma}^q/2} \hat{\Lambda}_C e^{i\eta_C \hat{\gamma}^q/2}$, with yet unspecified quantum counting field η_C and classical distribution function $F_C = 1 - 2n_C$. Employing Eqs. (15.38) and (15.41) and putting $n_L = 0$ and $n_R = 1$, which is the case for $0 < \epsilon < eV$, while n_C is an energy-independent constant, one finds

$$iS_C = \frac{eVt_0}{2\pi} \left\{ N_L \ln[1 + (1 - n_C)(e^{i\eta_C} - 1)] + N_R \ln[1 + n_C(e^{i(\eta - \eta_C)} - 1)] \right\}. \quad (15.42)$$

Since the $\hat{Q}_C$ -matrix is free to adjust to the external conditions, the generating function is given by $Z_C[\eta] = \int \mathbf{D}\hat{Q}_C e^{iS_C}$. If $eVt_0 N_{L(R)} \gg 1$ the corresponding integration may be performed in the stationary point approximation. This implies that one has to look for stationary values of η_C and n_C that satisfy the equations of motion $\partial S_C / \partial \eta_C = 0$ and $\partial S_C / \partial n_C = 0$ and substitute them back into the action (15.42). This way, one finds $\ln Z_C[\eta] = iS_C[\eta]$. In general, the equations of motion are transcendental and their solution can't be found in an analytic form. The exception is the symmetric case $N_L = N_R = N$, where the equations of motion may be

easily solved, leading to $\eta_C = \eta/2$ and $n_C = 1/2$. The corresponding generating function is [342]

$$\ln Z_C[\eta] = \frac{eVt_0}{2\pi} 2N \ln \left[1 + \frac{1}{2} (e^{i\eta/2} - 1) \right] \quad (15.43)$$

which is rather different from the 1d diffusive wire result (15.31). Indeed, employing Eqs. (13.35) and (15.32), one may check that the proper distribution function of transmission probabilities takes the form

$$\mathcal{P}(|\mathbf{t}|^2) = \frac{N}{\pi} \frac{1}{\sqrt{|\mathbf{t}|^2(1-|\mathbf{t}|^2)}} \quad (15.44)$$

Similarly to the Dorokhov distribution (15.33), the cavity distribution is bimodal. On the other hand, it is not so heavily tilted toward closed channels and is normalized as $\int_0^1 d|\mathbf{t}|^2 \mathcal{P}(|\mathbf{t}|^2) = N$. One can extract now the transmitted charge cumulants by expanding in powers of $i\eta$, Eq. (15.23). The average transmitted charge is $\mathcal{C}_1 = t_0 V e^2 N / (4\pi\hbar) = q_0$, which means that the average conductance of the system is $(N/2)(e^2/2\pi\hbar)$. This is natural since we have two ideal contacts in series, each having the Landauer conductance $N(e^2/2\pi\hbar)$.⁷ The second cumulant is given by $\mathcal{C}_2 = q_0/4$, leading to the Fano factor of $1/4$. Thus, the shot noise suppression in a symmetric 0d chaotic cavity is rather different from that in a quasi-1d diffusive wire. (In the latter case the Fano factor is $1/3$.)

Finally, the tunneling action allows us to describe not only the statistics of a stationary current flow, but also transient processes and dynamic correlation functions. To this end one has to include the dynamic action for $\hat{Q}$ -matrices of metallic nodes. For the 0 d cavity the corresponding dynamic action (14.33) is $iS[\hat{Q}_C] = \pi\nu \text{Tr} \{ \partial_t \hat{Q}_C \}$. For $T = 0$ and energy interval $0 < \epsilon < eV$ the $\hat{Q}_C$ matrix may be parametrized by an energy-independent quantum component η_C and classical occupation number n_C . In a dynamic setting they both may be slow functions of time. The dynamic action acquires the form⁷ Expanding the action (15.42) to first order in η and η_C , one finds

$$iS_C \approx (eVt_0/2\pi) [N_L(1-n_C)i\eta_C + N_R n_C i(\eta - \eta_C)]$$

Optimizing it with respect to η_C and n_C results in the occupation $n_C = N_L/(N_L + N_R)$ and the counting field $\eta_C = N_R\eta/(N_L + N_R)$. Substituting it back to the action leads to $iS_C[\eta] = i\eta(eVt_0/2\pi) N_L N_R / (N_L + N_R)$. This is the series conductance of two contacts with conductances $N_L(e^2/2\pi\hbar)$ and $N_R(e^2/2\pi\hbar)$, as it should be. Expanding the action to higher orders in η and η_C , one may extract few higher cumulants for arbitrary N_L and N_R [342].

$$iS = \frac{\pi v e V}{2\pi} \int dt \text{Tr} \left\{ \left(\partial_t e^{-i\eta_C \hat{\gamma}^q/2} \right) \hat{\Lambda}_C e^{i\eta_C \hat{\gamma}^q/2} \right\} = -i v e V \int dt \eta_C \dot{n}_C \quad (15.45)$$

where after the time differentiation acting on the leftmost function, we found for the trace $-i(\dot{\eta}_C/2) \text{Tr} \{ \hat{\gamma}^q \hat{\Lambda}_C \} = -i\dot{\eta}_C F_C$. Putting then $F_C = 1 - 2n_C$ and integrating by parts, one obtains Eq. (15.45). One can now define the "momentum" $p = i\eta_C$ and "coordinate" $n = eV\nu n_C$, where the latter has the meaning of the number of electrons brought to the cavity by an external voltage and the former is the corresponding quantum field. The total action, including dynamic and tunneling parts, then takes the form

$$iS[p, n] = - \int dt [p\dot{n} - H(p, n)] \quad (15.46)$$

Compare Eqs. (4.20) and (4.79), where the (reaction) Hamiltonian is specified by the tunneling part of the action (15.42) and takes the form (e.g. for $\eta = 0$)

$$H(p, n) = \frac{eV}{2\pi} \left\{ N_L \ln \left[1 + \left(1 - \frac{n}{eV\nu} \right) (e^p - 1) \right] + N_R \ln \left[1 + \frac{n}{eV\nu} (e^{-p} - 1) \right] \right\} \quad (15.47)$$

One notices that this formulation is virtually identical to the treatment of reaction models of Section 4.11. This implies that the problem may be reformulated in terms of a certain Master equation for the probability distribution function $\mathcal{P}(n, t)$. For example, expanding the logarithms to first order in $e^{\pm p} - 1$ and comparing with Eq. (4.78), one concludes that the reaction rate for moving one particle from the left lead to the cavity is $(N_L/2\pi\nu)(eV\nu - n)$, while the rate of moving one particle from the cavity to the right lead is $(N_R/2\pi\nu)n$. The higher orders of expansion provide the rates of multi-particle processes. One can now employ the machinery of classical stochastic systems and reaction models, Chapter 4, to describe the dynamics of the charge transport through the chaotic cavity. For more details see [268, 343].

13.3.7 15.7 Problems

15.7.1 Aharonov-Bohm Conductance Oscillations

Consider a quasi-1d mesoscopic ring of length L with an Aharonov-Bohm magnetic flux Φ through it. Calculate dc conductivity of the ring, $\sigma(\Phi)$. To this end, consider the weak-localization correction (14.72), which exhibits sensitivity to the flux through the Cooperon propagator, $\delta\sigma(\Phi) = -(2e^2 D/\pi) \sum_{\mathbf{q}} \mathcal{C}(\mathbf{q}; \Phi)$. In the presence of the magnetic field, the latter is governed by the action (14.91) with $\Phi = \oint dx A_x$. In the ring geometry the Aharonov-Bohm flux dictates quantization condition of the Cooperon momenta $q_n^x = 2\pi(n - 2\varphi)/L$, where $\varphi = \Phi/\Phi_0$ with $\Phi_0 = 2\pi\hbar/e$ is the flux quantum, and n is an integer. Show that

$$\delta\sigma(\Phi) = -\frac{2e^2 D}{\pi L} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{E_{\text{Th}}(2\pi)^2(n - 2\varphi)^2 + \frac{1}{\tau_\phi}} = -\frac{e^2 l_\phi}{\pi^2} \sum_{m=1}^{\infty} e^{-mL/l_\phi} \cos(4\pi m\varphi),$$

where $E_{\text{Th}} = D/L^2$ is the Thouless energy and $l_\phi = \sqrt{D\tau_\phi}$ is the phase coherence length. Perform the last summation to find a closed expression for $\delta\sigma(\Phi)$.

One finds the periodic oscillations of the conductivity with the period $\Phi_0/2$. Indeed, only even harmonics are present in the sum. The odd harmonics, while allowed by symmetries, are absent. This is a result of the disorder averaging. Indeed, one may quite generally write $\delta\sigma(\varphi) = \sum_m \sigma_m \cos(2\pi m\varphi)$. We found that $\langle \sigma_{2m+1} \rangle = 0$, while $\langle \sigma_{2m} \rangle \propto l_\phi e^{-mL/l_\phi}$, where $\langle \dots \rangle$ denotes ensemble averaging. However, in any specific realization of the ring the odd harmonics may appear as well. To estimate them one may look for, for example, $\langle \sigma_1^2 \rangle$. To this end, one needs to evaluate the $\cos(2\pi(\varphi \pm \varphi'))$ harmonics of $\langle \delta\sigma(\varphi)\delta\sigma(\varphi') \rangle$. This may be done following Section 15.3, where in addition to the diffuson propagators (which are subject to the flux $\varphi - \varphi'$), one uses Cooperons (which are subject to the flux $\varphi + \varphi'$). Employ Eqs. (15.16)-(15.18) with the flux-shifted momentum quantization, as earlier, to calculate $\sqrt{\langle \sigma_1^2 \rangle}$. Compare it with $\langle \sigma_2 \rangle$, calculated previously.

Calculate flux-dependent conductivity of a 2d cylinder with the Aharonov-Bohm flux through it. To this end, perform 2d momentum summation of the Cooperon propagator as $\sum_{\mathbf{q}} \mathcal{C}(\mathbf{q}; \Phi) = L^{-1} \sum_{q_n^x} \int dq^z / (2\pi) \mathcal{C}(q_n^x, q^z; \Phi)$ with the quantization condition for q_n^x explained earlier. The $\Phi_0/2$ periodic conductance oscillations in the cylinder were predicted by Altshuler, Aronov, and Spivak [345] and soon after observed by Sharvin and Sharvin [346]. If the length of the cylinder is longer than the dephasing length, $L_z \gg l_\phi$, it results in an effective ensemble averaging, $\langle \delta\sigma(\varphi) \rangle$. In this case, there is no need to evaluate mesoscopic fluctuations.

13.4 Electron-Electron Interactions in Disordered Metals

We discuss singlet channel electron-electron interactions in disordered systems with broken time-reversal symmetry. In particular we derive the zero-bias anomaly, Altshuler-Aronov corrections to the conductivity, the kinetic equation, and the energy relaxation rate.

13.4.1 16.1 K-Gauge

In Section 14.6 we obtained the diffusive density response as a result of Gaussian fluctuations of the $\hat{Q}$ -matrix around its stationary value $\hat{\Lambda}$. These Gaussian fluctuations are induced by linear coupling between, say, scalar potentials V^α and the diffuson modes specified by Eqs. (14.58). While there is nothing wrong with these tactics, one can substantially simplify the theory by fine-tuning the stationary $\hat{Q}$ -matrix configuration. To this end one needs to acknowledge that the scalar V and vector $\mathbf{A}$ potentials can distort the stationary matrix $\hat{\Lambda}$ and deflect it to another point on the soft manifold $\hat{Q}^2 = \hat{1}$. The way to approach this latter true saddle point is to request that the linear coupling, mentioned previously, vanishes.

To implement this program one may use the gauge invariance of the nonlinear sigma-model. It implies that the gauge transformation of the $\hat{Q}$ -matrix

$$\hat{Q}_K(\mathbf{r}; t, t') = e^{-i\hat{K}(\mathbf{r}, t)} \hat{Q}_{tt'}(\mathbf{r}) e^{i\hat{K}(\mathbf{r}, t')}, \quad (16.1)$$

along with the gauge transformation of the electromagnetic potentials

$$\hat{V}_K(\mathbf{r}, t) = \hat{V}(\mathbf{r}, t) + \partial_t \hat{K}(\mathbf{r}, t); \quad \hat{\mathbf{A}}_K(\mathbf{r}, t) = \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, t) + \nabla_{\mathbf{r}} \hat{K}(\mathbf{r}, t) \quad (16.2)$$

preserves the form of the sigma-model action (14.48). That is, the action may be written¹ with $\hat{Q}, \mathbf{A}, V \rightarrow \hat{Q}_K, \mathbf{A}_K, V_K$. Notice also that the observables, such as, for

example, current (14.55) are invariant under the transformations (16.1) and (16.2).

The matrix $\hat{K}(\mathbf{r}, t) = K^\alpha(\mathbf{r}, t) \hat{\gamma}^\alpha$ is defined through two scalar fields $K^\alpha(\mathbf{r}, t)$ with $\alpha = (\text{cl}, \text{q})$, which are specified in what follows. One may use now the freedom of choosing K^α to make the stationary configuration of the gauged transformed $\hat{Q}_K$ -matrix to be maximally close to $\hat{\Lambda}$, Eq. (14.25), in the presence of electromagnetic potentials. To this end we substitute $\hat{Q}_K = \hat{\Lambda} - [\hat{\mathcal{W}}, \hat{\Lambda}]/2$ (cf. derivation of the Usadel equation (14.34)) in the gauge-transformed action (14.48) and demand that there are no terms linear in the rotation generators $\hat{\mathcal{W}}_{\epsilon_1 \epsilon_2}(\mathbf{r})$ times the first power of the electromagnetic potentials $\mathbf{A}_K, V_K$. Notice that, since $\hat{\Lambda}_\epsilon$ is the proper stationary point in the absence of electromagnetic potentials, there are no linear terms in the deviations $\hat{\mathcal{W}}$ themselves. This leads to the following condition:

$$\left(\hat{\Lambda}_{\epsilon_+} \hat{\gamma}^\alpha - \hat{\gamma}^\alpha \hat{\Lambda}_{\epsilon_-} \right) V_K^\alpha(\mathbf{r}, \omega) - \left(\hat{\gamma}^\alpha - \hat{\Lambda}_{\epsilon_+} \hat{\gamma}^\alpha \hat{\Lambda}_{\epsilon_-} \right) D \operatorname{div} \mathbf{A}_K^\alpha(\mathbf{r}, \omega) = 0, \quad (16.3)$$

where $\epsilon_\pm = \epsilon \pm \omega/2$. It is in general impossible to satisfy this matrix condition for any ϵ and ω by a choice of two fields $K^\alpha(\mathbf{r}, \omega)$. In thermal equilibrium, however, there is a "magic" fact that

$$\frac{1 - F_{\epsilon_+}^{\text{eq}} F_{\epsilon_-}^{\text{eq}}}{F_{\epsilon_+}^{\text{eq}} - F_{\epsilon_-}^{\text{eq}}} = \coth \frac{\omega}{2T} \equiv B_\omega \quad (16.4)$$

which depends on ω only, but not on ϵ . This allows for the condition (16.3) to be satisfied for all ϵ 's, if the following relation holds between the gauge transformed potentials (16.2):

$$\vec{V}_K(\mathbf{r}, \omega) = \begin{pmatrix} 1 & 2B_\omega \\ 0 & -1 \end{pmatrix} D \operatorname{div} \vec{\mathbf{A}}_K(\mathbf{r}, \omega), \quad (16.5)$$

¹ One needs a bit more extra care with the first term on the right-hand side of Eq. (14.48). To show its invariance one goes back to Eq. (14.47) and performs the gauge transformations (16.1), (16.2) under the $\operatorname{Tr} \ln$ sign, [297, 24].

where we employed vector notations for, for example, $\vec{V}_{\mathcal{K}} = (V_{\mathcal{K}}^{\text{cl}}, V_{\mathcal{K}}^{\text{q}})^{\text{T}}$. This equation specifies the special gauge, which we call the $\mathcal{K}$ -gauge for both classical and quantum components of the electromagnetic potentials.

The advantage of the $\mathcal{K}$ -gauge is that the action does not contain terms linear in the deviations of the $\hat{Q}_{\mathcal{K}}$ matrix from its stationary point $\hat{\Lambda}$ and linear in the electromagnetic potentials. Note that there are still terms that are linear in $\hat{\mathcal{W}}$ and quadratic in the electromagnetic potentials. This means that, strictly speaking, $\hat{\Lambda}$ is not the exact stationary point on the $\hat{Q}_{\mathcal{K}}$ manifold for any realization of the electromagnetic potentials.² However, since the deviations from the true saddle point are pushed to second order in potentials, the $\mathcal{K}$ -gauge substantially simplifies the structure of the perturbation theory. Moreover, this state of affairs holds

only in equilibrium. For out-of-equilibrium situations condition (16.3) cannot be identically satisfied. Therefore terms linear in $\hat{\mathcal{W}}$ and electromagnetic fields unavoidably appear in the action. As we shall explain, it is precisely these terms that are responsible for the collision integral in the kinetic equation.

With the help of Eq. (16.2) the definition of the $\mathcal{K}$ -gauge, Eq. (16.5), may be viewed as an explicit relation determining the gauge fields $\mathcal{K}^{\alpha}$ through the electromagnetic potentials V^{α} and $\mathbf{A}^{\alpha}$. Taking $\hat{\mathbf{A}} = 0$ for simplicity, one finds for the classical and quantum components of the gauge field

$$(D\nabla_{\mathbf{r}}^2 + i\omega) \mathcal{K}^{\text{cl}}(\mathbf{r}, \omega) + 2B_{\omega} D\nabla_{\mathbf{r}}^2 \mathcal{K}^{\text{q}}(\mathbf{r}, \omega) = V^{\text{cl}}(\mathbf{r}, \omega); \quad (16.6a)$$

$$(D\nabla_{\mathbf{r}}^2 - i\omega) \mathcal{K}^{\text{q}}(\mathbf{r}, \omega) = -V^{\text{q}}(\mathbf{r}, \omega). \quad (16.6b)$$

By going to Fourier space, one may resolve these equations and write the result in the vector form

$$\vec{\mathcal{K}}(\mathbf{q}, \omega) = -\hat{\mathcal{D}}(\mathbf{q}, \omega) \hat{\mathcal{B}}_{\omega}^{-1} \vec{V}(\mathbf{q}, \omega), \quad (16.7)$$

where we have introduced bosonic matrices in Keldysh space

$$\hat{\mathcal{D}}(\mathbf{q}, \omega) = \begin{pmatrix} \mathcal{D}^{\text{K}}(\mathbf{q}, \omega) & \mathcal{D}^{\text{R}}(\mathbf{q}, \omega) \\ \mathcal{D}^{\text{A}}(\mathbf{q}, \omega) & 0 \end{pmatrix}; \quad \hat{\mathcal{B}}_{\omega} = \begin{pmatrix} 2B_{\omega} & 1_{\omega}^{\text{R}} \\ -1_{\omega}^{\text{A}} & 0 \end{pmatrix}, \quad (16.8)$$

with the components (cf. Eq. (14.44))

$$\mathcal{D}^{\text{R(A)}}(\mathbf{q}, \omega) = (Dq^2 \mp i\omega)^{-1}, \quad \mathcal{D}^{\text{K}}(\mathbf{q}, \omega) = B_{\omega} [\mathcal{D}^{\text{R}}(\mathbf{q}, \omega) - \mathcal{D}^{\text{A}}(\mathbf{q}, \omega)]. \quad (16.9)$$

Equation (16.7) provides an explicit linear relation between the scalar potential and the gauge fields $\mathcal{K}^{\alpha}$. It thus defines the $\hat{Q}_{\mathcal{K}}$ -matrix in the $\mathcal{K}$ -gauge according to Eq. (16.1). As was explained, the latter possesses a stationary configuration which is close to the metallic stationary point $\hat{\Lambda}$ (with deviations being quadratic in electromagnetic potentials).

Let us evaluate now the generating function $\langle Z[V] \rangle_{\text{dis}}$ (we put $\mathbf{A} = 0$ for simplicity) in the stationary point approximation for the $\hat{Q}_{\mathcal{K}}$ -matrix in the $\mathcal{K}$ -gauge, that is, we put $\hat{Q}_{\mathcal{K}} = \hat{\Lambda}$. It is given by $\langle Z[V] \rangle_{\text{dis}} = e^{iS[\hat{\Lambda}, V_{\mathcal{K}}]}$, with the action given by Eq. (14.48),

$$iS[\hat{\Lambda}, V_{\mathcal{K}}] = \frac{iv}{2} \text{Tr} \{ \hat{V}_{\mathcal{K}} \hat{\sigma}_1 \hat{V}_{\mathcal{K}} \} + \frac{\pi\nu D}{4} \text{Tr} \{ [\nabla_{\mathbf{r}} \hat{\mathcal{K}}, \hat{\Lambda}]^2 \}. \quad (16.10)$$

Notice that, while we disregarded the bare vector potential, there is still the gauge vector potential $\hat{\mathbf{A}}_{\mathcal{K}} = \nabla_{\mathbf{r}} \hat{\mathcal{K}}$, Eq. (16.2). We use now the explicit relation between the scalar potential

² Notice that the root of all complications is an attempt to accommodate the quantum components of the electromagnetic potentials into the "deflected" stationary point. If only classical components are present, one may look for the stationary solution having the causality structure (14.25). The problem is then reduced to the solution of the diffusion equation (14.36) in the presence of external (classical) potentials.

V^α and the gauge potentials $\mathcal{K}^\alpha$, Eq. (16.7), to express the action (16.10) in terms of the former. The straightforward algebra yields ³

$$iS[\hat{\Lambda}, V] = i \sum_{\mathbf{q}, \omega} \vec{V}^T(-\mathbf{q}, -\omega) \hat{\Pi}(\mathbf{q}, \omega) \vec{V}(\mathbf{q}, \omega) \quad (16.13)$$

where, in agreement with the general definition (10.49), the polarization matrix has the typical causality structure of a quadratic bosonic matrix action in Keldysh space,

$$\hat{\Pi}(\mathbf{q}, \omega) = \begin{pmatrix} 0 & \Pi^A(\mathbf{q}, \omega) \\ \Pi^R(\mathbf{q}, \omega) & \Pi^K(\mathbf{q}, \omega) \end{pmatrix}, \quad (16.14)$$

with the components

$$\Pi^{R(A)}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{vDq^2}{Dq^2 \mp i\omega}, \quad \Pi^K(\mathbf{q}, \omega) = B_\omega [\Pi^R(\mathbf{q}, \omega) - \Pi^A(\mathbf{q}, \omega)] \quad (16.15)$$

as expected from our discussion in Section 14.6; see Eq. (14.60). We have thus rederived the diffusive form of the density response. Notice, however, that this time we did not employ Gaussian fluctuations of the $\hat{Q}$ -matrix around its stationary point. Instead the gauge-transformed $\hat{Q}_\mathcal{K}$ matrix was fixed right at its stationary point $\hat{\Lambda}$. The diffusive propagators (16.9) came from the choice of the gauge and not from the diffuson propagators of the $\hat{Q}$ -matrix fluctuations. The choice of the $\mathcal{K}$ -gauge substantially simplifies the theory of interacting electrons in the presence of the disorder potential.

13.4.2 16.2 Nonlinear Sigma-Model for Interacting Systems

We turn now to the discussion of electron-electron interactions in disordered systems. In this chapter we limit ourselves to the effects of the singlet channel interactions only; see Eq. (10.64). The Cooper channel interactions are considered in Chapter 17. The singlet part of the interaction action takes the form (Eq. (10.64))

$$S_{S-\text{int}} = -\frac{1}{2} \int_C dt \iint d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \rho(\mathbf{r}, t) U_s(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \rho(\mathbf{r}', t) \quad (16.16)$$

³ To evaluate the last trace in Eq. (16.10), it is useful to employ the following relation:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon \text{Tr} \left\{ \hat{\gamma}^\alpha \hat{\gamma}^\beta - \hat{\gamma}^\alpha \hat{\Lambda}_{\epsilon_+} \hat{\gamma}^\beta \hat{\Lambda}_{\epsilon_-} \right\} = 4\omega \left(\hat{\mathcal{B}}_\omega^{-1} \right)^{\alpha\beta} \quad (16.11)$$

where $\epsilon_\pm = \epsilon \pm \omega/2$, and the matrix $\hat{\mathcal{B}}$ is defined by Eq. (16.8). Equation (16.11) is a consequence of the following integral relations between bosonic and fermionic distribution functions:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon (F_{\epsilon_+} - F_{\epsilon_-}) = 2\omega, \quad \int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon (1 - F_{\epsilon_+} F_{\epsilon_-}) = 2\omega B_\omega \quad (16.12)$$

where electron density $\rho(\mathbf{r}, t)$ is defined by Eq. (10.63) and the singlet interaction potential is given by $U_s(\mathbf{q}) = U(\mathbf{q}) - U_t$, where $U(\mathbf{q})$ is the bare (e.g. Coulomb) interaction and U_t is the triplet interaction constant. We decouple now the singlet interaction action with the help of the real bosonic Hubbard-Stratonovich field $\varphi(\mathbf{r}, t)$, exactly as we did in Eq. (10.65). We then split the bosonic field φ into forward and backward branches and perform a Keldysh rotation, as in Eq. (10.66). As a result of this procedure we arrive at non-interacting disordered electrons subject to a vector of dynamic fluctuating fields $\vec{\varphi} = (\varphi^{\text{cl}}, \varphi^{\text{q}})^T$. The Hubbard-Stratonovich weight of the vector bosonic field is $\vec{\varphi}^T U_s^{-1}(\mathbf{q}) \hat{\sigma}_1 \vec{\varphi}$ (cf. Eq. (10.66)).

The fluctuating auxiliary field $\vec{\varphi}$ plays exactly the same role as the source scalar potential $\vec{V}$ in the nonlinear sigma-model action (14.48). It is convenient to perform the gauge transformation to the $\mathcal{K}$ -gauge, with $\vec{\mathcal{K}} = -\hat{\mathcal{D}}\hat{\mathcal{B}}^{-1}\vec{\varphi}$ (cf. Eq. (16.7)). We then obtain the disorder-averaged partition function in the following form:

$$\langle Z \rangle_{\text{dis}} = \int \mathbf{D}[\varphi] e^{i \text{Tr} \{ \vec{\varphi}^T \hat{U}_{\text{RPA}}^{-1} \vec{\varphi} \}} \int \mathbf{D}[\hat{Q}_{\mathcal{K}}] e^{i S_0[\hat{Q}_{\mathcal{K}}] + i S_1[\hat{Q}_{\mathcal{K}}, \nabla_{\mathbf{r}} \mathcal{K}] + i S_2[\hat{Q}_{\mathcal{K}}, \nabla_{\mathbf{r}} \mathcal{K}]}, \quad (16.17)$$

where S_l with $l = 0, 1, 2$ contain the l th power of the electromagnetic potentials and are given by

$$i S_0[\hat{Q}_{\mathcal{K}}] = -\frac{\pi v}{4} \text{Tr} \left\{ D \left(\nabla_{\mathbf{r}} \hat{Q}_{\mathcal{K}} \right)^2 - 4 \partial_t \hat{Q}_{\mathcal{K}} \right\}, \quad (16.18a)$$

$$i S_1[\hat{Q}_{\mathcal{K}}, \nabla_{\mathbf{r}} \mathcal{K}] = i \pi v \text{Tr} \left\{ \hat{\varphi}_{\mathcal{K}} \hat{Q}_{\mathcal{K}} - D \left(\nabla_{\mathbf{r}} \hat{\mathcal{K}} \right) \hat{Q}_{\mathcal{K}} \left(\nabla_{\mathbf{r}} \hat{Q}_{\mathcal{K}} \right) \right\}, \quad (16.18b)$$

$$i S_2[\hat{Q}_{\mathcal{K}}, \nabla_{\mathbf{r}} \mathcal{K}] = \frac{\pi v D}{4} \text{Tr} \left\{ \left[\nabla_{\mathbf{r}} \hat{\mathcal{K}}, \hat{Q}_{\mathcal{K}} \right]^2 - \left[\nabla_{\mathbf{r}} \hat{\mathcal{K}}, \hat{\Lambda} \right]^2 \right\}; \quad (16.18c)$$

see also Eqs. (14.52) and (14.54). In the last term $i S_2$ we have added and subtracted the contribution of the stationary point $\hat{Q}_{\mathcal{K}} = \hat{\Lambda}$. The latter contributes to the part of the action quadratic in $\vec{\varphi}$ fields and is given by Eqs. (16.10) and (16.13) (where we put $\vec{V} \rightarrow \vec{\varphi}$). Together with the bare Hubbard-Stratonovich term $\vec{\varphi}^T U_s^{-1}(\mathbf{q}) \hat{\sigma}_1 \vec{\varphi}$ it goes into the definition of the random phase approximation (RPA) inverse interaction matrix

$$\hat{U}_{\text{RPA}}^{-1}(\mathbf{q}, \omega) = U_s^{-1}(\mathbf{q}) \hat{\sigma}_1 + \hat{\Pi}(\mathbf{q}, \omega), \quad (16.19)$$

where the diffusive polarization matrix is given by Eqs. (16.14) and (16.15).

Equations (16.17)-(16.19) constitute an effective nonlinear sigma-model for an interacting disordered Fermi liquid. The model consists of two interacting fields: the matrix field $\hat{Q}_{\mathcal{K}}$, obeying the nonlinear constraint $\hat{Q}_{\mathcal{K}}^2 = \hat{1}$, and the bosonic longitudinal field $\nabla_{\mathbf{r}} \hat{\mathcal{K}}$ (or equivalently $\hat{\varphi}$). As will be apparent later, the $\hat{Q}_{\mathcal{K}}$ -field describes fluctuations of the quasiparticle distribution function, whereas $\hat{\varphi}$ (or $\hat{\mathcal{K}}$) represents propagation of electromagnetic modes through the media.

Since the fields $\vec{\varphi}$ and $\vec{\mathcal{K}}$ are linearly related through $\vec{\mathcal{K}} = -\hat{\mathcal{D}}\hat{\mathcal{B}}^{-1}\vec{\varphi}$, Eq. (16.7), one can change the φ -integration in Eq. (16.17) to a $\mathcal{K}$ -integration. To this end we need to evaluate the following correlation function:

$$\mathcal{V}^{\alpha\beta}(x - x') \equiv -2i \langle \mathcal{K}^{\alpha}(x) \mathcal{K}^{\beta}(x') \rangle = -2i \int \mathbf{D}[\hat{\varphi}] \mathcal{K}^{\alpha}(x) \mathcal{K}^{\beta}(x') e^{i \text{Tr} \{ \vec{\varphi}^T \hat{U}_{\text{RPA}}^{-1} \vec{\varphi} \}}, \quad (16.20)$$

where $x = \mathbf{r}, t$ and the factor $-2i$ is used for convenience. Employing the linear relation between $\hat{\varphi}$ and $\hat{\mathcal{K}}$ along with the fact that $\langle \varphi^{\alpha} \varphi^{\beta} \rangle = (i/2) U_{\text{RPA}}^{\alpha\beta}$, one finds for the gauge field correlation function

$$\hat{\mathcal{V}}(\mathbf{q}, \omega) = \hat{\mathcal{D}}(\mathbf{q}, \omega) \hat{\mathcal{B}}_{\omega}^{-1} \hat{U}_{\text{RPA}}(\mathbf{q}, \omega) \left(\hat{\mathcal{B}}_{-\omega}^{-1} \right)^T \hat{\mathcal{D}}^T(-\mathbf{q}, -\omega). \quad (16.21)$$

Employing the explicit form of the $\hat{\mathcal{D}}$ and $\hat{\mathcal{B}}$ matrices, Eq. (16.8), one finds that the bosonic correlation matrix $\hat{\mathcal{V}}(\mathbf{q}, \omega)$ has the standard Keldysh structure

$$\hat{\mathcal{V}}(\mathbf{q}, \omega) = \begin{pmatrix} \mathcal{V}^{\text{K}}(\mathbf{q}, \omega) & \mathcal{V}^{\text{R}}(\mathbf{q}, \omega) \\ \mathcal{V}^{\text{A}}(\mathbf{q}, \omega) & 0 \end{pmatrix}, \quad (16.22)$$

with the elements

$$\mathcal{V}^{\text{R(A)}}(\mathbf{q}, \omega) = -\frac{1}{(Dq^2 \mp i\omega)^2} \left(U_s^{-1}(\mathbf{q}) + \frac{\nu Dq^2}{Dq^2 \mp i\omega} \right)^{-1} \quad (16.23a)$$

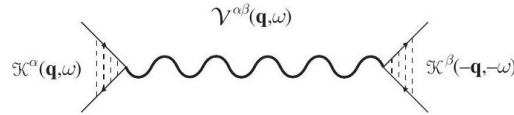
$$\mathcal{V}^{\text{K}}(\mathbf{q}, \omega) = B_\omega [\mathcal{V}^{\text{R}}(\mathbf{q}, \omega) - \mathcal{V}^{\text{A}}(\mathbf{q}, \omega)] . \quad (16.23b)$$

This propagator corresponds to the RPA screened dynamic Coulomb interaction, dressed by the two diffusons at the vertices, Fig. 16.1(a). Therefore, the role of the gauge field $\mathcal{K}$ is to automatically take into account both the RPA screening of the interactions, Fig. 16.1(b), and its vertex renormalization by the diffusons. Owing to the linear dependence between $\hat{\varphi}$ and $\hat{\mathcal{K}}$, we use integration over the $\hat{\varphi}$ or $\hat{\mathcal{K}}$ fields interchangeably. The essence is that the correlation function of the two $\hat{\mathcal{K}}^\alpha$ fields is given by Eqs. (16.20)-(16.23).

13.4.3 16.3 Zero Bias Anomaly

We discuss now modifications of the single-particle density of states (DOS) $\nu(\epsilon)$ of the disordered electron gas due to Coulomb interactions. As was briefly mentioned in Section 14.8, the disorder potential itself does not alter the average DOS. This is not the case any more when interactions are present. As we shall see, interactions lead to an energy-dependent DOS, singularly suppressed at the Fermi energy. The effect is known as the zero bias anomaly and is directly measurable in tunneling experiments.

(a)



(b)

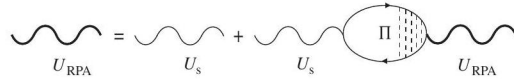


Figure 16.1 (a) Diagrammatic representation of the gauge field propagator $\hat{\mathcal{V}}(\mathbf{q}, \omega)$: the wave line represents the Coulomb interaction. Vertices dressed by the diffusons are shown by the ladders of dashed lines. (b) Screened Coulomb interaction in RPA, $\hat{U}_{\text{RPA}}(\mathbf{q}, \omega)$. Bold and thin wavy lines represent screened and bare interactions, respectively, and the loop represents the diffusive polarization matrix $\hat{\Pi}$, Eq. (16.14).

We are interested in the disorder-averaged single-particle Green function at coinciding spatial points, defined as

$$\mathcal{G}^{ab}(t - t') = -i \langle \langle \psi_a(\mathbf{r}, t) \bar{\psi}_b(\mathbf{r}, t') \rangle \rangle = \left\langle \left[\hat{G}^{-1} + \frac{i}{2\tau_{\text{el}}} \hat{Q} - \hat{\varphi} \right]_{\mathbf{r}\mathbf{r}; tt'; ab}^{-1} \right\rangle_{\varphi, \hat{Q}_{\mathcal{K}}}, \quad (16.24)$$

where $a, b = 1, 2$ and $\langle \langle \dots \rangle \rangle$ denotes both quantum and disorder averaging. To obtain the second equality one introduces a source term, directly coupled to the bilinear combination of Grassmann fields, into the fermionic action. Following the same algebra as in Section 14.5, performing Keldysh rotation and disorder averaging, one finds that the source term enters the trace logarithm in Eq. (14.21). Differentiating the latter with respect to the source and putting it to zero, one obtains Eq. (16.24), where $\langle \dots \rangle_{\varphi, \hat{Q}_{\mathcal{K}}}$ denotes averaging with the weight given by Eqs. (16.17) and (16.18). It is important to mention that the Green function $\hat{\mathcal{G}}(t - t')$ is not gauge-invariant and is evaluated in a particular gauge, the one where the chemical potential is set to be at $\epsilon = 0$. It is fixed by the setup of the tunneling experiment. It is thus the bare $\hat{Q}$ -matrix and not the gauged-transformed one, $\hat{Q}_{\mathcal{K}}$, which appears in the last equality in Eq. (16.24).

We evaluate the integral over the $\hat{Q}_K$ -matrix in Eq. (16.24) in the stationary point approximation, neglecting both the massive and massless fluctuations around the stationary point. According to the stationary point condition (14.22), $[\hat{G}^{-1} + (i/2\tau_{\text{el}}) \hat{Q} - \hat{\varphi}]_{\mathbf{r}\mathbf{r}';tt'}^{-1} = -i\pi\nu \hat{Q}_{tt'}(\mathbf{r})$. Moreover, according to Eq. (16.1), $\hat{Q}_{tt'}(\mathbf{r}) = e^{i\hat{K}(\mathbf{r},t)} \hat{\Lambda}_{t-t'} e^{-i\hat{K}(\mathbf{r},t')}$, where we adopt that in the stationary point approximation $\hat{Q}_K(\mathbf{r};t,t') = \hat{\Lambda}_{t-t'}$. Since $S_l[\hat{\Lambda}, \mathcal{K}] = 0$ for $l = 0, 1, 2$, Eq. (16.18), we find for the Green function

$$\hat{\mathcal{G}}(t-t') = -i\pi\nu \int \mathbf{D}[\varphi] e^{i\text{Tr}(\hat{\varphi}^T \hat{U}_{\text{RPA}}^{-1} \hat{\varphi})} e^{i\hat{K}(\mathbf{r},t)} \hat{\Lambda}_{t-t'} e^{-i\hat{K}(\mathbf{r},t')} \quad (16.25)$$

Since $\hat{K}$ is the linear functional of $\hat{\varphi}$, given by Eq. (16.6) (with $\hat{V} \rightarrow \hat{\varphi}$), the remaining functional integral is Gaussian. To calculate the latter, one rewrites the phase factors of the gauge field as ⁴

$$e^{\pm i\mathcal{K}^\alpha \hat{\gamma}^\alpha} = \frac{\hat{\gamma}^{\text{cl}}}{2} \left[e^{\pm i(\mathcal{K}^{\text{cl}} + \mathcal{K}^{\text{q}})} + e^{\pm i(\mathcal{K}^{\text{cl}} - \mathcal{K}^{\text{q}})} \right] + \frac{\hat{\gamma}^{\text{q}}}{2} \left[e^{\pm i(\mathcal{K}^{\text{cl}} + \mathcal{K}^{\text{q}})} - e^{\pm i(\mathcal{K}^{\text{cl}} - \mathcal{K}^{\text{q}})} \right]$$

Then, for example,

$$\left\langle e^{i[\mathcal{K}_t^{\text{cl}} + \mathcal{K}_t^{\text{q}} - \mathcal{K}_{t'}^{\text{cl}} + \mathcal{K}_{t'}^{\text{q}}]} \right\rangle_\varphi = \left\langle e^{i \int dt_1 \mathcal{K}_{t_1}^\alpha J_{t_1}^\alpha} \right\rangle_\varphi = e^{-(i/4) \int dt_1 \int dt_2 J_{t_1}^\alpha \mathcal{V}_{t_1-t_2}^{\alpha\beta} J_{t_2}^\beta}$$

where $J_{t_1}^{\text{cl}} = \delta(t_1 - t) - \delta(t_1 - t')$, $J_{t_1}^{\text{q}} = \delta(t_1 - t) + \delta(t_1 - t')$, and the correlator, $\langle \mathcal{K}_{t_1}^\alpha \mathcal{K}_{t_2}^\beta \rangle_\varphi = (i/2) \mathcal{V}_{t_1-t_2}^{\alpha\beta}$; see Eq. (16.20). Employing the causality structure of $\mathcal{V}^{\alpha\beta}$, Eq. (16.22), along with $\mathcal{V}_{-t}^{\text{K}} = \mathcal{V}_t^{\text{K}}$ and $\mathcal{V}_{-t}^{\text{R}} = \mathcal{V}_t^{\text{A}}$, we find for this particular contribution $\exp\{(i/2) [\mathcal{V}_{t-t'}^{\text{K}} - \mathcal{V}_0^{\text{K}} - \mathcal{V}_{t-t'}^{\text{R}} + \mathcal{V}_{t-t'}^{\text{A}}]\}$. Collecting all contributions and employing that $\mathcal{V}_0^{\text{R}} + \mathcal{V}_0^{\text{A}} = 0$ and $\mathcal{V}_{t-t'}^{\text{R}} = 0$ for $t < t'$, while $\mathcal{V}_{t-t'}^{\text{A}} = 0$ for $t > t'$, one finds for the Green function

$$\hat{\mathcal{G}}(t) = -i\pi\nu \sum_{\alpha\beta} \left(\hat{\gamma}^\alpha \hat{\Lambda}_t \hat{\gamma}^\beta \right) \mathbb{B}^{\alpha\beta}(t) \quad (16.26)$$

where the auxiliary propagator $\mathbb{B}^{\alpha\beta}(t)$ has the standard bosonic structure, as, for example, in Eq. (16.22), with

$$\mathbb{B}^{\text{R}(\text{A})}(t) = i \exp(i [\mathcal{V}^{\text{K}}(t) - \mathcal{V}^{\text{K}}(0)]/2) \sin(\mathcal{V}^{\text{R}(\text{A})}(t)/2) \quad (16.27a)$$

$$\mathbb{B}^{\text{K}}(t) = \exp(i [\mathcal{V}^{\text{K}}(t) - \mathcal{V}^{\text{K}}(0)]/2) \cos([\mathcal{V}^{\text{R}}(t) - \mathcal{V}^{\text{A}}(t)]/2) \quad (16.27b)$$

The gauge field propagator, $\hat{\mathcal{V}}(\mathbf{r}, t)$, defined by Eqs. (16.22) and (16.23), enters Eq. (16.27) at the coinciding spatial points

$$\hat{\mathcal{V}}(t) = \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} \sum_{\mathbf{q}} \hat{\mathcal{V}}(\mathbf{q}, \omega) \quad (16.28)$$

Before proceeding with the calculations of the DOS, it is instructive to check that the stationary point approximation employed to derive Eq. (16.26) respects the

fermionic FDT. For this purpose it is convenient to rewrite identically Eq. (16.26) in the following form (cf. Eqs. (2.41)):

⁴ This equation is based on the following property: consider an arbitrary function of a linear superposition of Pauli matrices $f(a + \mathbf{b}\hat{\sigma})$, where a is a number and $\mathbf{b}$ is a vector. The observation is that $f(a + \mathbf{b}\hat{\sigma}) = A + \mathbf{B}\hat{\sigma}$, where A is some new number and $\mathbf{B}$ a new vector. To see this, let us choose the z -axis along the direction of the $\mathbf{b}$ vector. Then the eigenvalues of the operator $a + \mathbf{b}\hat{\sigma}$ are $a \pm b$, and the corresponding eigenvalues of the operator $f(a + \mathbf{b}\hat{\sigma})$ are $f(a \pm b)$. Thus, one concludes that $A = \frac{1}{2}[f(a+b) + f(a-b)]$ and $\mathbf{B} = \frac{\mathbf{b}}{2b}[f(a+b) - f(a-b)]$.

$$\mathcal{G}^{>(<)}(t) = -i\pi v \Lambda_t^{>(<)} \mathbb{B}^{>(<)}(t), \quad (16.29)$$

where

$$\mathbb{B}^R(t) - \mathbb{B}^A(t) = \mathbb{B}^>(t) - \mathbb{B}^<(t); \quad \mathbb{B}^K(t) = \mathbb{B}^>(t) + \mathbb{B}^<(t) \quad (16.30)$$

and the same relations hold for the components of the fermionic Green functions $\hat{\Lambda}$ and $\hat{\mathcal{G}}$. Employing Eqs. (16.27) along with the bosonic FDT relation for the components of $\hat{\mathcal{V}}(\mathbf{q}, \omega)$, one obtains

$$\begin{aligned} \mathbb{B}^{>(<)}(t) &= \frac{e^{-\frac{i}{2}\mathcal{V}^K(0)}}{2} \exp \left\{ \frac{i}{2} \sum_{\mathbf{q}, \omega} e^{-i\omega t} (\mathcal{V}^R(\mathbf{q}, \omega) - \mathcal{V}^A(\mathbf{q}, \omega)) \left(\coth \frac{\omega}{2T} \pm 1 \right) \right\} \\ &= \frac{1}{2} \exp \left\{ \int \frac{d\omega}{2\pi} \text{Im} \sum_{\mathbf{q}} \mathcal{V}^R(\mathbf{q}, \omega) \left[\coth \frac{\omega}{2T} (1 - \cos \omega t) \pm i \sin \omega t \right] \right\}. \end{aligned} \quad (16.31)$$

According to FDT the equilibrium bosonic and fermionic Green functions in the frequency representation must satisfy the following relations:

$$\mathbb{B}^>(\omega) = e^{\omega/T} \mathbb{B}^<(\omega); \quad \mathcal{G}^>(\epsilon) = -e^{\epsilon/T} \mathcal{G}^<(\epsilon). \quad (16.32)$$

Since $\coth(\omega/2T) + 1 = e^{\omega/T}(\coth(\omega/2T) - 1)$, the exponent in Eq. (16.31) satisfies the bosonic FDT. It is then not difficult to see that Eqs. (16.32) indeed hold.⁵

Having found the Green function, Eq. (16.26), we obtain the single-particle (or tunneling) DOS according to the standard definition,

$$\nu(\epsilon) \equiv \frac{i}{2\pi} [\mathcal{G}^R(\epsilon) - \mathcal{G}^A(\epsilon)] = \frac{v}{\tanh(\epsilon/2T)} \int dt e^{i\epsilon t} F_t [\mathbb{B}^>(t) + \mathbb{B}^<(t)], \quad (16.33)$$

where in the last equality we made use of the fermionic and bosonic FDT relations (16.30) and (16.32) and the fact that $\Lambda_t^K = 2F_t$, Eq. (14.25). We restrict ourselves to the analysis of this result only at zero temperature. Noting that for $T = 0$ the Fourier

5 If a pair of bosonic functions $b^>(t)$ and $b^<(t)$ (being transformed to the frequency representation) satisfies Eq. (16.32), then for any analytic function $f(z)$ the pair $f^>(t) \equiv f(b^>(t))$ and $f^<(t) \equiv f(b^<(t))$ also satisfies it. Indeed,

$$f^{>(<)}(\omega) = \int dt e^{i\omega t} f \left(\int \frac{d\omega'}{2\pi} b^{>(<)}(\omega') e^{-i\omega' t} \right).$$

Expanding f on the right-hand side in a Taylor series and performing the t integration, we see that in each order of the expansion $f^>(\omega) = \exp(\omega/T) f^<(\omega)$. Taking $b^{>(<)}(t)$ to be the exponent in Eq. (16.31) and f to be the exponential function proves that $\mathbb{B}^>$ and $\mathbb{B}^<$ are related through FDT. It is then a simple matter to check that if the fermionic $\Lambda^{>(<)}$ and bosonic $\mathbb{B}^{>(<)}$ satisfy FDT, Eq. (16.32), then so do the fermionic functions $\mathcal{G}^{>(<)}$ given by Eq. (16.29), transform of the equilibrium fermionic distribution function is $F_t = (i\pi t)^{-1}$, one obtains

$$\begin{aligned} \nu(\epsilon) &= \frac{\nu}{\pi} \int dt \frac{\sin |\epsilon|t}{t} \exp \left\{ \int_0^\infty \frac{d\omega}{\pi} \text{Im} \sum_{\mathbf{q}} \mathcal{V}^R(\mathbf{q}, \omega) (1 - \cos \omega t) \right\} \\ &\times \cos \left\{ \int_0^\infty \frac{d\omega}{\pi} \text{Im} \sum_{\mathbf{q}} \mathcal{V}^R(\mathbf{q}, \omega) \sin \omega t \right\} \end{aligned} \quad (16.34)$$

Let us focus on the two-dimensional case, where the bare Coulomb interaction is given by $U(\mathbf{q}) = 2\pi e^2/q$, with $\mathbf{q}$ being the 2 d wavenumber. Employing Eq. (16.23a) with such interactions and performing 2d momentum as well as energy integrations leads to

$$\int_0^{+\infty} \frac{d\omega}{\pi} \sum_{\mathbf{q}} \text{Im} [\mathcal{V}^R(\mathbf{q}, \omega)] \begin{pmatrix} \cos \omega t - 1 \\ \sin \omega t \end{pmatrix} = \frac{1}{8\pi^2 g} \begin{cases} \ln \frac{t}{\tau_{\text{el}}} \ln(t\tau_{\text{el}}\omega_0^2) + 2\mathbb{C} \ln(t\omega_0) \\ -\pi \ln(t\omega_0) \end{cases} \quad (16.35)$$

where $g = \hbar\nu D$ is the dimensionless conductance per square, $\omega_0 = D\kappa^{-2}$, $\kappa = (2\pi e^2\nu)^{-1}$ is the Thomas-Fermi 2 d screening radius and $\mathbb{C} = 0.577\dots$ is the Euler constant. The remaining time integral in Eq. (16.34) may be performed in the saddle-point approximation, resulting in

$$\nu(\epsilon) = \nu \exp \left\{ -\frac{1}{8\pi^2 g} \ln(|\epsilon|\tau_{\text{el}})^{-1} \ln(\tau_{\text{el}}\omega_0^2/|\epsilon|) \right\} \quad (16.36)$$

for $|\epsilon| \ll 1/\tau_{\text{el}}$ and $\nu(\epsilon) \rightarrow \nu$ in the opposite limit. We see thus that the interactions suppress the single-particle DOS near the Fermi energy (i.e. $\epsilon = 0$) in a singular way. This effect, observed frequently in tunneling experiments, is known as the zero bias anomaly. Its physics may be traced back to the fluctuating phase (i.e. gauge factor) of the Green function; see Eq. (16.25). Upon averaging over the fluctuating scalar potential $\tilde{\varphi}$ this phase produces the "Debye-Waller factor," which exponentially suppresses the tunneling amplitude.

Does the DOS really go to zero at $\epsilon = 0$, as Eq. (16.36) suggests? We can not answer this question. Indeed, we have adopted a stationary point approximation for the $\hat{Q}_{\mathcal{K}}$ -integral, disregarding diffusion fluctuations. Being taken into account, the latter give rise to perturbative corrections $\sim g^{-1} \ln(|\epsilon|\tau_{\text{el}})$; see Section 16.4. Therefore one can trust Eq. (16.36) only if $|\ln(|\epsilon|\tau_{\text{el}})| \lesssim g$. Notice, however, that since the exponent in Eq. (16.36) contains an additional large logarithm $\ln(\tau_{\text{el}}\omega_0^2/|\epsilon|) > 1$, it may be large (justifying keeping the result in the exponential form, as opposed to expanding it to the lowest nontrivial order). In other words, the averaging of the fluctuating phase factors sums up the leading terms in powers of g^{-1} times the logarithm square, while the omitted diffusion fluctuations bring only subleading terms with powers of g^{-1} times the logarithm. The perturbative result for the zero bias anomaly (most relevant for experiment) was first derived by Altshuler and Aronov [347, 348] and Altshuler, Aronov and Lee [349]. The exponentiated version, Eq. (16.36), was derived in a number of ways [282, 350, 351, 352, 353]. Here we followed the sigma-model calculation of [297].

13.4.4 16.4 Altshuler-Aronov Effect

The zero-bias anomaly is entirely a consequence of the fluctuating phase factors $e^{\pm i\tilde{\mathcal{K}}}$, Eq. (16.25). In other words it is essentially due to the non-gauge-invariance of the single-particle Green function. On the other hand, observables such as the current, Eq. (14.55), are gauge invariant. This statement manifests itself in the identical cancelation of the phase factors under the trace sign in Eq. (14.55). Still, there are interaction corrections to the current, known as the Altshuler-Aronov effect [348].

Since the current is gauge-invariant, one may evaluate it in any gauge and the $\mathcal{K}$ -gauge is by far the most convenient. Focusing on the part of the dc ($\omega = 0$) current (14.55) that is due to the presence of the fluctuating vector potential in the covariant derivative operator $\hat{\partial}_{\mathbf{r}}$, one finds

$$\delta \mathbf{J}_{\text{dc}} = \frac{e\pi\nu D}{2} i \left\langle \sum_{\epsilon, \epsilon', \epsilon''} \text{Tr} \left\{ \hat{\gamma}^q \hat{Q}_{\mathcal{K}; \epsilon \epsilon'} \hat{\gamma}^\alpha \mathbf{A}_{\mathcal{K}; \epsilon' - \epsilon''}^\alpha \hat{Q}_{\mathcal{K}; \epsilon'' \epsilon} \right\} \right\rangle_{\varphi, \hat{Q}_{\mathcal{K}}}, \quad (16.37)$$

where we wrote the trace in the energy representation. In the absence of an external classical vector potential, $\mathbf{A}_\kappa^\alpha$ is a pure gauge field, Eq. (16.2), $\mathbf{A}_\kappa^\alpha = \nabla_{\mathbf{r}} \mathcal{K}^\alpha$, having both classical and quantum components. We now parametrize the $\hat{Q}_\kappa$ -matrices as in Eqs. (14.38) and (14.39) and expand to first order in the fluctuating diffuson fields d^α . This way, we obtain for the first-order fluctuation correction to the dc current

$$\delta \mathbf{J}_{\text{dc}} = e\pi\nu D i \left\langle \sum_{\epsilon, \epsilon'} (F_\epsilon + F_{\epsilon'}) \left[-d_{\epsilon\epsilon'}^{\text{cl}} \mathbf{A}_{\kappa; \epsilon' - \epsilon}^{\text{q}} + d_{\epsilon\epsilon'}^{\text{q}} \left(\mathbf{A}_{\kappa; \epsilon' - \epsilon}^{\text{cl}} (F_{\epsilon'} - F_\epsilon) + \mathbf{A}_{\kappa; \epsilon' - \epsilon}^{\text{q}} (1 - F_{\epsilon'} F_\epsilon) \right) \right] \right\rangle_{\varphi, \hat{Q}_\kappa}. \quad (16.38)$$

At a first glance the averaging over the $\hat{Q}_\kappa$ -matrix fluctuations (i.e. over $d_{\epsilon\epsilon'}^\alpha$ fields) of this expression vanishes. Indeed, the $\mathcal{K}$ -gauge was constructed in such a way as to eliminate the terms linear in d^α and $\mathbf{A}_\kappa^\alpha$ in the action. If so, the products $d^\alpha \mathbf{A}_\kappa^\beta$ in Eq. (16.38) should average out to zero. This is indeed the case in equilibrium: no current is flowing. However, we are interested in a non-equilibrium situation, where an external bias is applied across the system. Neglecting for a moment collision processes (which are certainly present in the interacting system), one may think of the distribution function F_ϵ as of the two-step function given by Eq. (14.11), Fig. 14.2(b). Since this is a non-equilibrium function, the procedure of Section 16.1 can't completely eliminate the term $\propto d^\alpha \mathbf{A}_\kappa^\beta$ in the action. It is this term, remaining due to the non-equilibrium character of the distribution function, that makes the average fluctuating current $\delta \mathbf{J}_{\text{dc}}$ nonzero.

In particular we focus on the $iS_1 = -i\pi\nu D \text{Tr} \{ \hat{\mathbf{A}}_\kappa \hat{Q}_\kappa \nabla_{\mathbf{r}} \hat{Q}_\kappa \}$ part of the action, Eq. (16.18b), where the gradient operator acts on the stationary distribution function $F_\epsilon(\mathbf{r})$, rather than on the diffuson fields $d_{\epsilon\epsilon'}^\alpha(\mathbf{r})$ (the latter was exactly the strategy that led us to Eq. (16.3) and eventually to the definition of the $\mathcal{K}$ -gauge; the former option is absent in equilibrium). Once again, employing the parametrizations of the $\hat{Q}_\kappa$ -matrices through Eqs. (14.38) and (14.39), expanding to first order in the fluctuating diffuson fields d^α and focusing only on the terms with $\nabla_{\mathbf{r}} F$, we find for the corresponding part of S_1 action

$$\delta S_1 = -2\pi\nu D \sum_{\epsilon, \epsilon'} d_{\epsilon'\epsilon}^{\text{q}} \left[\mathbf{A}_{\kappa; \epsilon - \epsilon'}^{\text{cl}} \nabla_{\mathbf{r}} (F_\epsilon - F_{\epsilon'}) - \mathbf{A}_{\kappa; \epsilon - \epsilon'}^{\text{q}} \nabla_{\mathbf{r}} (1 - F_\epsilon F_{\epsilon'}) \right] \quad (16.39)$$

We expand now $e^{i\delta S_1}$ to first order and perform the functional averaging of $\langle \delta \mathbf{J}_{\text{dc}} i\delta S_1 \rangle_{\varphi, \hat{Q}_\kappa}$ with the action, which includes the $\vec{\varphi}^T U_{\text{RPA}}^{-1} \vec{\varphi}$ part of the fluctuating scalar potential, Eq. (16.17), along with the Gaussian diffuson action (14.42). In doing so we must understand that $\mathbf{A}_\kappa^\alpha = \nabla_{\mathbf{r}} \mathcal{K}^\alpha$ is a pure gauge field. Since $\langle d^{\text{q}} d^{\text{q}} \rangle = 0$, only the first term on the right-hand side of Eq. (16.38) contributes. Moreover, since $\langle \mathbf{A}_\kappa^{\text{q}} \mathbf{A}_\kappa^{\text{q}} \rangle = 0$, only the first term on the right-hand side of Eq. (16.39) remains. Finally, employing that $\langle \mathcal{K}_{\epsilon - \epsilon'}^{\text{cl}}(\mathbf{r}') \mathcal{K}_{\epsilon' - \epsilon}^{\text{q}}(\mathbf{r}) \rangle = (i/2) \mathcal{V}^{\text{R}}(\mathbf{r}' - \mathbf{r}, \epsilon - \epsilon')$, Eq. (16.20), while the propagator of the diffusons is given by $\langle d_{\epsilon\epsilon'}^{\text{cl}}(\mathbf{r}) d_{\epsilon'\epsilon}^{\text{q}}(\mathbf{r}') \rangle = -2\mathcal{D}^{\text{R}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}', \epsilon - \epsilon') / \pi\nu$, Eq. (14.43), we find for the interaction correction to the dc current

$$\begin{aligned} \delta \mathbf{J}_{\text{dc}} = & 2\pi i e \nu D^2 \int d\mathbf{r}' \sum_{\epsilon, \epsilon'} \mathcal{D}^{\text{R}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}', \epsilon - \epsilon') \nabla_{\mathbf{r}} \nabla_{\mathbf{r}'} \mathcal{V}^{\text{R}}(\mathbf{r}' - \mathbf{r}, \epsilon - \epsilon') \\ & \times (F_\epsilon(\mathbf{r}) + F_{\epsilon'}(\mathbf{r})) (\nabla_{\mathbf{r}'} F_{\epsilon'}(\mathbf{r}') - \nabla_{\mathbf{r}'} F_\epsilon(\mathbf{r}')) \end{aligned} \quad (16.40)$$

We shall restrict ourselves to the analysis of this expression in the linear response regime only. Then $\nabla_{\mathbf{r}'} F_\epsilon = (F_{\epsilon - eV} - F_\epsilon) / L = -\partial_\epsilon F_\epsilon eV / L$ (cf. Eq. (14.11)), where V/L is the electric

field across the sample and all distribution functions are now understood as the equilibrium ones. We can now change integration variables as $(\epsilon + \epsilon')/2 \rightarrow \epsilon$ and $\epsilon - \epsilon' \rightarrow \omega$ and perform the explicit integration over ϵ . We then find for the Altshuler-Aronov [348] correction to the dc conductivity, given by $\delta\sigma_{AA} = \delta\mathbf{J}_{dc}L/V$,

$$\begin{aligned}\delta\sigma_{AA} &= -i\frac{2\sigma_D}{\pi d} \int d\omega \frac{\partial}{\partial\omega} \left[\omega \coth \frac{\omega}{2T} \right] \sum_{\mathbf{q}} \mathcal{D}^R(\mathbf{q}, \omega) D\mathbf{q}^2 \mathcal{V}^R(\mathbf{q}, \omega) \\ &\approx i\frac{2e^2 D}{\pi d} \int d\omega \frac{\partial}{\partial\omega} \left[\omega \coth \frac{\omega}{2T} \right] \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{(Dq^2 - i\omega)^2}\end{aligned}\quad (16.41)$$

where $\sigma_D = e^2\nu D$. In the second line here we employed the limit of strong Coulomb interactions, $U_s^{-1}(\mathbf{q}) \ll \Pi^R$, and thus made the approximation that $D\mathbf{q}^2 \mathcal{V}^R(\mathbf{q}, \omega) \approx -[\nu(D\mathbf{q}^2 - i\omega)]^{-1}$; see Eqs. (16.23a). Focusing on $d = 2$ and performing momentum integration, one finds

$$\delta\sigma_{AA} = -\frac{e^2}{2\pi^2} \ln(T\tau_{el})^{-1} \quad (16.42)$$

where the elastic scattering rate τ_{el}^{-1} enters as the upper cutoff in the logarithmic integral over the frequency ω . We found thus a negative singular correction with the relative value $\delta\sigma_{AA}/\sigma_D \propto g^{-1} \ln(1/T\tau_{el})$, where $g = \hbar\nu D$ is the dimensionless conductance per square. Notice that the correction is smaller (in the large logarithm) than the non-gauge-invariant zero bias effect considered in Section 16.3. Such a relative smallness of the $\hat{Q}_K$ -fluctuation corrections justifies the non-perturbative approach to the zero bias anomaly, which treats $\hat{Q}_K$ in the stationary point approximation. One may trust the conductivity correction as long as $T \gg \tau_{el}^{-1}e^{-g}$. To go beyond this limit the RG treatment of the interacting sigma-model was developed in [282, 283, 354]. Reviews of the perturbative interaction corrections in disordered conductors can be found in [348, 356, 357].⁶ In $d = 1, 3$ one also finds the singular suppression of the conductivity at a low temperature, which scales as $\delta\sigma_{AA} \sim (d-2)T^{d/2-1}$.

13.4.5 16.5 Kinetic Equation

The aim of this section is to show how the kinetic equation for the distribution function $F_\epsilon(\mathbf{r}, t)$ appears in the framework of the Keldysh formulation. In Section 14.4 it was demonstrated that the diffusive kinetic equation for noninteracting fermions is nothing but the stationary point equation for the effective action of the $\hat{Q}$ -matrix. In the case of interacting electrons it is obtained from the action $S[\hat{Q}_K, \nabla_{\mathbf{r}}\mathcal{K}]$, Eqs. (16.18), by first integrating out the fast degrees of freedom: both diffuson fluctuations, d^α , and electromagnetic fields, $\mathcal{K}^\alpha$ (or equivalently φ^α).

Let us outline the logic of the procedure, which leads from the partition function (16.17) to the kinetic equation. As the first step we separate slow and fast

degrees of freedom in the action, $S_l[\hat{Q}_K, \partial_{\mathbf{r}}\mathcal{K}]$, where $l = 0, 1, 2$ (see Eqs. (16.18)). The former are encoded in the distribution function $F_{t'}(\mathbf{r})$, which after a Wigner transformation acquires the form $F_\epsilon(\mathbf{r}, t)$. The fast degrees of freedom are represented by the diffuson modes $d_{t'}^\alpha(\mathbf{r})$ and the electromagnetic modes $\mathcal{K}^\alpha(\mathbf{r}, t)$. This separation is achieved by an appropriate

⁶To appreciate the simplifications offered by the sigma-model treatment, one may notice that the original derivation includes consideration of eight diagrams, five of which cancel each other. The calculation of the remaining three involves an elaborated analytical continuation procedure.

parametrization of the $\hat{Q}_K$ -matrix. A convenient choice is $\hat{Q}_K = \hat{U}_s^{-1} \circ \hat{Q}_{\text{fast}} \circ \hat{U}_s$ (cf. Eq. (14.75)), where the slow rotation matrices are

$$\hat{U}_s = e^{\hat{\sigma}-Z} \circ e^{\hat{\sigma}+F} = \begin{pmatrix} 1 & F \\ Z & 1 + Z \circ F \end{pmatrix}, \quad \hat{U}_s^{-1} = e^{-\hat{\sigma}+F} \circ e^{-\hat{\sigma}-Z} \quad (16.43)$$

and the fast part of the $\hat{Q}_K$ -matrix is parametrized by the fluctuating diffuson fields $\hat{Q}_{\text{fast}} = \exp\{-\hat{\mathcal{W}}_f/2\} \circ \hat{\sigma}_3 \circ \exp\{\hat{\mathcal{W}}_f/2\}$ (compare this parametrization with that given by Eq. (14.38)). In the last equation $Z_{tt'}(\mathbf{r})$ (not to be confused with the partition function) may be thought of as the quantum component of the distribution function $F_{tt'}(\mathbf{r})$. It is very similar in spirit to the fields $\delta_{\tilde{G}}$ and $\delta_{\tilde{Z}}$, used in Eq. (12.45). Although $Z_{tt'}(\mathbf{r})$ is put to zero at the end of the calculations, it was emphasized in [357, 358] that $Z_{tt'}(\mathbf{r})$ must be kept explicitly in the $\hat{Q}$ -matrix parametrization to obtain the proper form of the collision integral in the kinetic equation.

As the second step, one performs integrations over φ^α (or equivalently $\mathcal{K}^\alpha$, since the relation between them is fixed by Eq. (16.7)), and over the $\hat{\mathcal{W}}_f$ fields in the partition function (16.17), to arrive at the effective action

$$e^{iS^{\text{eff}}[F,Z]} = \int \mathbf{D} [\hat{\mathcal{W}}_f, \varphi] e^{iS[F,Z,\hat{\mathcal{W}}_f,\nabla_r \mathcal{K}]} \quad (16.44)$$

The resulting effective action S^{eff} depends on F and its quantum component Z , and possibly the classical external fields, such as, for example, scalar or vector potentials. One then looks for the stationary point equation for the distribution function F as

$$\left. \frac{\delta S^{\text{eff}}[F,Z]}{\delta Z} \right|_{Z=0} = 0, \quad (16.45)$$

which is the sought kinetic equation.

Proceeding along these lines, one expands the action (16.18) up to second order in the fast fields $\hat{\mathcal{W}}_f$, $\hat{\varphi}$ and $\hat{\mathcal{K}}$ and up to first order in the auxiliary slow field Z .⁷ The dependence on the slow distribution function F is to be kept exact. For the slow part of the S_0 action (16.18a) one finds after standard Wigner transformation that $iS_0^{\text{eff}} = 2\pi\nu \text{Tr} \{ [D\nabla_{\mathbf{r}}^2 F_\epsilon(\mathbf{r}, t) - \partial_t F_\epsilon(\mathbf{r}, t)] Z_\epsilon(\mathbf{r}, t) \}$. Upon variation, Eq. (16.45),

with respect to Z , one recovers the noninteracting kinetic equation (14.36). The fast part of S_0 is, of course, the diffuson action (14.40).

Turning to the S_1 part of the action, Eq. (16.18b), one notices that, since it is linear in the fast field $\mathcal{K}$, one needs to keep only the terms linear in the fast diffuson modes $\hat{\mathcal{W}}_f$. In equilibrium such terms were eliminated by the choice of the $\mathcal{K}$ -gauge, which dictated the relation (16.7) between $\vec{\mathcal{K}}$ and $\vec{\varphi} \leftrightarrow \vec{V}$. Away from equilibrium, it is still convenient to keep the relation (16.7) intact, where the bosonic distribution function B_ω is understood as

$$B_\omega(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2\omega} \int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon' [1 - F_{\epsilon'}(\mathbf{r}, t) F_{\epsilon'-\omega}(\mathbf{r}, t)] \quad (16.46)$$

Notice that if $F_\epsilon = \tanh(\epsilon/2T)$, then $B_\omega = \coth(\omega/2T)$; compare Eq. (16.4). After some algebra one finds the term $\sim \mathcal{I}[F] \nabla_{\mathbf{r}}^2 \mathcal{K}^{\text{cl}} d^a$ in the S_1 action, where the functional

$$\mathcal{I}[F] \equiv 1 - F_{\epsilon-\omega}(\mathbf{r}, t) F_\epsilon(\mathbf{r}, t) - B_\omega(\mathbf{r}, t) [F_\epsilon(\mathbf{r}, t) - F_{\epsilon-\omega}(\mathbf{r}, t)] \quad (16.47)$$

⁰⁷ By keeping terms quadratic in Z and splitting them subsequently with a Hubbard-Stratonovich field, one arrives at the stochastic Boltzmann-Langevin terms [235, 236] in the kinetic equation, as explained in Section 12.4. Such terms allow us to find the shot noise and higher cumulants in the framework of the kinetic equation, see also [359, 360, 361].

is obviously zero in equilibrium.⁸ There is also a term linear in the auxiliary field Z of the form $\sim Z \nabla_{\mathbf{r}}^2 \mathcal{K}^q d^{\text{cl}}$. Expanding e^{iS_1} to second order and focusing on the product of these two terms, one finds after Gaussian integration over $\mathcal{K}^\alpha$ and d^α (see Eq. (8.43) and see [24] for details)

$$iS_1^{\text{eff}} = -4i\pi\nu \text{Tr} \left\{ (Dq^2)^2 [\mathcal{D}^A(\mathbf{q}, \omega) \mathcal{V}^R(\mathbf{q}, \omega) - \mathcal{D}^R(\mathbf{q}, \omega) \mathcal{V}^A(\mathbf{q}, \omega)] \mathcal{I}[F]Z \right\}. \quad (16.48)$$

The remaining S_2 part of the action (16.18c) is already quadratic in the fast fields $\hat{\mathcal{K}}$ and therefore may be taken at $\hat{\mathcal{W}}_f = 0$. Typical terms linear in Z have the structure of $\text{Tr} \{ (\partial_{\mathbf{r}} \mathcal{K}^q) F (\partial_{\mathbf{r}} \mathcal{K}^{\text{cl}}) F Z \}$ and $\text{Tr} \{ (\partial_{\mathbf{r}} \mathcal{K}^{\text{cl}}) (\partial_{\mathbf{r}} \mathcal{K}^{\text{cl}}) F Z \}$. Keeping all of them and performing Gaussian integrations over $\mathcal{K}^\alpha$ [24], one finds

$$iS_2^{\text{eff}} = 2i\pi\nu \text{Tr} \left\{ Dq^2 [\mathcal{V}^R(\mathbf{q}, \omega) - \mathcal{V}^A(\mathbf{q}, \omega)] \mathcal{I}[F]Z \right\}, \quad (16.49)$$

where we took into account that according to Eqs. (16.7) and (16.21) there is an FDT-like relation $\mathcal{V}^K(\mathbf{r}, \mathbf{r}, t) = B_\omega(\mathbf{r}, t) \sum_{\mathbf{q}} [\mathcal{V}^R(\mathbf{q}, \omega) - \mathcal{V}^A(\mathbf{q}, \omega)]$ for the Keldysh component of the propagator at the coinciding spatial arguments, which includes the effective bosonic distribution (16.46).

Finally, combining $S_0^{\text{eff}}[F, Z]$ together with $S_{1,2}^{\text{eff}}[F, Z]$, Eqs. (16.48) and (16.49), and employing Eq. (16.45), one arrives at the kinetic equation

$$\partial_t F_\epsilon(\mathbf{r}, t) - D \partial_{\mathbf{r}}^2 F_\epsilon(\mathbf{r}, t) = I^{\text{coll}}[F] \quad (16.50)$$

where the collision integral is given by

$$I^{\text{coll}}[F] = \sum_{\mathbf{q}, \omega} \mathcal{M}(\mathbf{q}, \omega) [1 - F_{\epsilon-\omega}(\mathbf{r}, t) F_\epsilon(\mathbf{r}, t) - B_\omega(\mathbf{r}, t) [F_\epsilon(\mathbf{r}, t) - F_{\epsilon-\omega}(\mathbf{r}, t)]]. \quad (16.51)$$

The interaction kernel here stands for

$$\begin{aligned} \mathcal{M}(\mathbf{q}, \omega) &= -iDq^2 \{ 2Dq^2 [\mathcal{D}^A \mathcal{V}^R - \mathcal{D}^R \mathcal{V}^A] - [\mathcal{V}^R - \mathcal{V}^A] \} \\ &= -2 \text{Re} [\mathcal{D}^R(\mathbf{q}, \omega)] \text{Im} [U_{\text{RPA}}^R(\mathbf{q}, \omega)], \end{aligned} \quad (16.52)$$

where in the last line we used $\mathcal{V}^{R(A)}(\mathbf{q}, \omega) = -[\mathcal{D}^{R(A)}(\mathbf{q}, \omega)]^2 U_{\text{RPA}}^{R(A)}(\mathbf{q}, \omega)$, which is a direct consequence of Eq. (16.19a), along with $2Dq^2 = (\mathcal{D}^R)^{-1} + (\mathcal{D}^A)^{-1}$. This collision integral is to be compared with the one, Eq. (11.11), for the clean systems. They both contain the same combination of the distribution functions, which renders cancelation of the collision integral by the equilibrium Fermi-Dirac distribution. The difference is that in the clean case the distribution function depends on the momentum $\mathbf{k}$. In the disordered case the elastic impurity scattering quickly equilibrates over the momenta directions, while the relatively slow inelastic electron-electron scattering provides the energy equilibration. Thus in the latter case the distribution function depends only on the energy $\epsilon = \xi_{\mathbf{k}}$. The main difference, however, is the singular scattering kernel $\sum_{\mathbf{q}} \mathcal{M}(\mathbf{q}, \omega)$. The physical reason for such an enhanced scattering cross-section is the absence of momentum conservation in the disordered system and thus a larger phase space available for the scattering.

⁸ Here we disregarded terms with $\nabla_{\mathbf{r}} F$, which are crucial to derive, for example, the Altshuler-Aronov correction; see Eq. (16.39). In the context of the kinetic equation they lead to Altshuler-Aronov renormalization of the diffusion constant in the kinetic term. On the other hand, terms $\sim \mathcal{I}[F]$ lead to the collision integral.

Recalling the connection between the fermion distribution function and the occupation number $n_\epsilon(\mathbf{r}, t) = (1 - F_\epsilon(\mathbf{r}, t))/2$ and employing Eqs. (16.12) and (16.46), one identically rewrites the right-hand side of Eq. (16.50) as [362, 363]

$$I^{\text{coll}} = \sum_{\mathbf{q}, \omega, \epsilon'} \frac{8\pi \mathcal{M}(\mathbf{q}, \omega)}{\omega} \times [n_\epsilon n_{\epsilon' - \omega} (1 - n_{\epsilon'}) (1 - n_{\epsilon - \omega}) - n_{\epsilon'} n_{\epsilon - \omega} (1 - n_\epsilon) (1 - n_{\epsilon' - \omega})]. \quad (16.53)$$

This form clearly shows the "out" minus "in" structure of the collision integral (the seemingly wrong sign is associated with the fact that the left-hand side of Eq. (16.50) acts on $F_\epsilon = 1 - 2n_\epsilon$). The present discussion can be generalized to include the spin triplet interaction channel. The corresponding kinetic equation and the collision integral were discussed in [364, 365].

Following the strategy of Section 11.1 we focus now on the "out" relaxation rate [363, 348, 366] for an electron of energy ϵ . It enters the spatially uniform kinetic equation $\partial_t n_\epsilon = -n_\epsilon/\tau_{ee}(\epsilon)$ and is given by

$$\frac{1}{\tau_{ee}(\epsilon)} = \int d\omega d\epsilon' \frac{\sum_{\mathbf{q}} \mathcal{M}(\mathbf{q}, \omega)}{\pi\omega} n_F(\epsilon' - \omega) [1 - n_F(\epsilon')] [1 - n_F(\epsilon - \omega)] \quad (16.54)$$

where all occupation numbers were substituted by the Fermi functions. This is appropriate if one is interested in small (linear) deviations of n_ϵ from its equilibrium value $n_F(\epsilon)$. Equation (16.54) simplifies considerably at zero temperature, $T = 0$. Indeed, the Fermi functions limit the energy integrations to the range $0 < \omega < \epsilon$, while $0 < \epsilon' < \omega$, where the product of all occupation numbers is unity. Integration over ϵ' brings in the factor of ω . In the universal limit of strong interactions, $U_s^{-1} \ll \Pi^R$, the kernel $\mathcal{M}(\mathbf{q}, \omega)$ acquires a simple form and one finds for the "out" relaxation rate

$$\frac{1}{\tau_{ee}(\epsilon)} = \frac{2}{\pi v} \int_0^\epsilon d\omega \omega \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{(Dq^2)^2 + \omega^2} = \frac{|\epsilon|}{4\pi g} \quad (16.55)$$

where the last equality is given for $d = 2$, with $g = \hbar v D \gg 1$ being the dimensionless conductance per square. For $d = 1, 3$ the "out" relaxation rate scales with the energy as $\tau_{ee}^{-1}(\epsilon) \propto (1/v_d) (|\epsilon|/D)^{d/2}$, here $|\epsilon| \lesssim 1/\tau_{el}$, see [348] for further details. One notices that in all cases the small energy electron-electron relaxation rate appears to be much faster than in the case of clean systems, Eq. (11.12). This is a consequence of the aforementioned increase in the number of available states, due to the absence of the integral of motion (momentum) in the disordered case. Still $\tau_{ee}^{-1} \ll |\epsilon|$, justifying the quasiparticle picture employed to write the kinetic equation. Since $\omega \sim \epsilon$, this fact also justifies the division into the slow and fast degrees of freedom adopted to derive Eqs. (16.48) and (16.49). Indeed, the slow ones have characteristic frequencies of order $1/\tau_{ee}$, while the fast ones are of order ω .

13.4.6 16.6 Problems

16.6.1 Semiclassical Treatment of the Zero Bias Anomaly

Here we discuss a complimentary view on the zero bias anomaly of Section 16.3 developed by Levitov and Shytov [315]. It treats the zero bias suppression of the density of states as an under-barrier tunneling phenomenon. Since corresponding classical trajectories (i.e. solutions of the classical equations of motion) are forbidden, one looks for imaginary time trajectories. The barrier for an incoming electron is created by the Coulomb repulsion from electrons in the

metal. The tunneling is associated with rearrangements of electron density and current. There is an imaginary time action for such a process, which suppresses its amplitude.

The imaginary time action for the current and density fluctuations in noninteracting metal is given by Eq. (14.90). Coulomb interaction, $U(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$, adds an extra term:

$$S_N[\mathbf{j}, \rho] = \frac{1}{2} \iint d^{d+1}x d^{d+1}x' \left[\frac{1}{\sigma_D} \mathbf{g}(x) \mathcal{D}(x - x') \mathbf{g}(x') + \rho(x) U(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(\tau - \tau') \rho(x') \right],$$

where $x = (\mathbf{r}, \tau)$, $\mathbf{g}(x) = \mathbf{j}(x) + D \nabla_{\mathbf{r}} \rho(x)$, and $\mathcal{D}(\mathbf{q}, \omega) = (Dq^2 + |\omega|)^{-1}$ is the imaginary time diffuson. The current and density fluctuations are restricted by the (imaginary time) continuity equation $\nabla_{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}, \omega) + |\omega| \rho(\mathbf{r}, \omega) = \mathcal{J}(\mathbf{r}, \omega)$, where the source term $\mathcal{J}(x)$ is specified in what follows. The restriction enters the action through the Lagrange multiplier, $\lambda(x)$, as

$$S[\mathbf{j}, \rho, \lambda] = S_N[\mathbf{j}, \rho] + \int d^{d+1}x \lambda(x) [\nabla_{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{j}(x) + |\omega| \rho(x) - \mathcal{J}(x)] \quad (16.57)$$

Perform variations of this action with respect to $\mathbf{j}(x)$, $\rho(x)$, and $\lambda(x)$. Show that, in addition to the continuity relation, upon elimination of $\lambda(x)$ it leads to the following equations of motion:

$$\mathbf{j} + D \nabla_{\mathbf{r}} \rho = \sigma_D \mathbf{E}; \quad \mathbf{E}(\mathbf{r}, \tau) = -\nabla_{\mathbf{r}} \int d\mathbf{r}' U(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \rho(\mathbf{r}', \tau) \quad (16.58)$$

Solve these equations to show that $\rho_{\mathbf{q}, \omega} = \mathcal{J}_{\mathbf{q}, \omega} / (Dq^2 + |\omega| + \sigma_D q^2 U_{\mathbf{q}})$ and $\mathbf{g}_{\mathbf{q}, \omega} = (-i\mathbf{q}) \sigma_D U_{\mathbf{q}} \rho_{\mathbf{q}, \omega}$. Substitute it into the action (16.56) and show that

$$S_N = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}, \omega} \frac{U_{\mathbf{q}} |\mathcal{J}_{\mathbf{q}, \omega}|^2}{(Dq^2 + |\omega|) (Dq^2 + |\omega| + \sigma_D q^2 U_{\mathbf{q}})} \quad (16.59)$$

Notice that the action is proportional to the interaction potential $U_{\mathbf{q}}$.

An electron insertion and extraction after the imaginary time $2\tau_0$ in a certain location may be described by the source $\mathcal{J}(x) = e\delta(\mathbf{r}) (\delta(\tau + \tau_0) - \delta(\tau - \tau_0))$ and therefore $\mathcal{J}_{\mathbf{q}, \omega} = 2ie \sin \omega \tau_0$. In 2d the Coulomb potential is $U_{\mathbf{q}} = 2\pi/q$. Calculate the action (16.59) and show that

$$S_N(\tau_0) = \frac{e^2}{8\pi^2 \sigma_D} \log \frac{\tau_0}{\tau_{\text{el}}} \log(\tau_0 \tau_{\text{el}} \omega_0^2) \quad (16.60)$$

where $\omega_0 = (2\pi\sigma_D)^2 / D$. Finally the density of states is $\nu(\epsilon) = \nu \int d\tau_0 e^{-S_N(\tau_0) + 2\tau_0 \epsilon}$. Perform the integral in the stationary point approximation and compare your result with Eq. (16.36).

16.6.2 Near-Field Heat Transfer in Disordered Metals

The near-field heat transfer in clean systems is considered in Problem 12.6.2. Using kinetic equation in the disordered limit (16.51), show that the expression (12.72) still holds [367, 368] with the polarization operators given by Eq. (14.60). Perform the frequency and wavenumber integrals and find the near-field heat flux $J_h^{\text{NF}}(T)$ in the disordered limit. Compare your result with the radiative Stefan-Boltzmann result and the clean limit of the near-field mechanism, Problem 12.6.2.

Consider the linear response regime, where $\delta T = T_1 - T_2 \ll T_2$, then $J_h = \partial_T J_h^{\text{NF}}(T) \delta T$. On the other hand, $J_h = dE_e/dt = (dE_e/dT) (dT/dt) = -C(T) d\delta T/dt$, where E_e is the energy of the electron gas in one layer and $C(T) \propto \nu T$ is the heat capacity of the electron gas. From here one finds $d\delta T/dt = -\delta T/\tau_T$, where the relaxation rate is $1/\tau_T = \partial_T J_h^{\text{NF}}(T)/C(T)$. Show that $1/\tau_T \propto T/g$, which is very different from the Fermi liquid relaxation rate $\propto T^2/\epsilon_F$, (11.12), but is consistent with the relaxation rate (16.55) in the disordered limit.

13.5 Dynamics of Disordered Superconductors

(note on SC is the main note for it)

We generalize the nonlinear sigma-model to include interactions in the Cooper channel. As its stationary point approximation we derive coupled Usadel, self-consistency and Poisson equations. We use them to derive the Josephson current of an SNS junction, as well as the dispersion of the collective Carlson-Goldman mode of the superconductors. In the gapless case one may explicitly integrate out fermionic degrees of freedom, obtaining the time-dependent Ginzburg-Landau action. The latter is used to derive the Aslamazov-Larkin fluctuation correction to the normal state conductivity.

13.5.1 17.1 Cooper Channel Interactions

So far we have been mostly discussing the effects of singlet channel electron-electron interactions. We turn now to the Cooper channel interactions; see Eqs. (10.62)-(10.64). As was realized by Bardeen, Cooper, and Schrieffer (BCS) [369], exchange of virtual phonons with large wavenumbers $q \sim k_F$ mediates effective attractive interactions in the Cooper channel. The latter lead to formation of two-electron bound states - Cooper pairs, which form a condensate below a certain critical temperature T_c . The superfluid current of such a condensate is charged and results in a phenomenon known as superconductivity. In this chapter we restrict ourselves to the theory of disordered superconductors, that is, those where $T_c \ll \hbar/\tau_{el}$. This condition is indeed fulfilled for many conventional superconductors (but not for cold atom realizations). It actually considerably simplifies the theory by ensuring the spatially local character of the correlation functions.¹

We write the local Cooper channel interaction action with attractive interactions as (cf. Eq. (10.64))

$$S_{\text{BCS}} = \frac{\lambda}{v} \int_c dt \int d\mathbf{r} \bar{\Phi}(\mathbf{r}, t) \Phi(\mathbf{r}, t) \quad (17.1)$$

where the time integral runs along the closed time contour, and the complex Cooper pair density is given by $\Phi(\mathbf{r}, t) = \psi_\downarrow(\mathbf{r}, t)\psi_\uparrow(\mathbf{r}, t)$, while its conjugate is $\bar{\Phi}(\mathbf{r}, t) = \bar{\psi}_\uparrow(\mathbf{r}, t)\bar{\psi}_\downarrow(\mathbf{r}, t)$. Notice the opposite sign with respect to Eq. (10.64), which stresses the attractive nature of the interactions, $\lambda > 0$. Actually the phonon-mediated interactions should be described by a time-nonlocal kernel $\lambda(t - t')$, or its Fourier image $\lambda(\omega)$. Following BCS, we approximate it as being a constant $\lambda(\omega) \approx \lambda$ for energy transfer below the Debye frequency, $|\omega| < \omega_D$, and zero otherwise. This is justified by the fact that observables depend on the cutoff ω_D only logarithmically (see the following discussion).

This four-fermion interaction term may be decoupled via the Hubbard-Stratonovich transformation by introducing an auxiliary complex bosonic field $\Delta(\mathbf{r}, t)$:

$$\begin{aligned} e^{iS_{\text{BCS}}} &= \int \mathbf{D}[\Delta] e^{i \int dx \left[-\frac{\lambda}{v} |\Delta(x)|^2 + \Delta(x) \bar{\Phi}(x) + \Delta^*(x) \Phi(x) \right]} \\ &= \int \mathbf{D}[\Delta] e^{i \int dx \left[-\frac{\lambda}{v} |\Delta(x)|^2 + \Delta(x) \bar{\psi}_\uparrow(x) \bar{\psi}_\downarrow(x) + \Delta^*(x) \psi_\downarrow(x) \psi_\uparrow(x) \right]} \end{aligned} \quad (17.2)$$

here $x = (\mathbf{r}, t)$ and $\int dx = \int_c dt \int d\mathbf{r}$. After the Hubbard-Stratonovich transformation (17.2) the fermionic action becomes quadratic in Grassmann fields and may be written in the matrix form

¹ Indeed, the characteristic length scale, the coherence length, $\xi_0 = \sqrt{D/T_c}$, appears to be much larger than the mean free path $l_{el} \propto \sqrt{D\tau_{el}}$, which is the scale where the nonlocal correlations decay.

$$S = \frac{1}{2} \int dx (\bar{\psi}_\uparrow, -\psi_\downarrow) \begin{pmatrix} i\partial_t + \frac{(\nabla_{\mathbf{r}} + i\mathbf{A})^2}{2m} + V_{\text{dis}} & \Delta \\ -\Delta^* & -i\partial_t + \frac{(\nabla_{\mathbf{r}} - i\mathbf{A})^2}{2m} + V_{\text{dis}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_\uparrow \\ \bar{\psi}_\downarrow \end{pmatrix}, \quad (17.3)$$

along with the identical (in the absence of the Zeeman term) action for the $(\psi_\downarrow, -\bar{\psi}_\uparrow)^T$ spinor. To make further notation compact, it is convenient to introduce fermionic bispinors

$$\bar{\Psi} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\bar{\psi}_\uparrow, -\psi_\downarrow, \bar{\psi}_\downarrow, \psi_\uparrow); \quad \Psi = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_\uparrow, \bar{\psi}_\downarrow, \psi_\downarrow, -\bar{\psi}_\uparrow)^T, \quad (17.4)$$

defined in the four-dimensional space Ω , which can be viewed as the direct product $N \otimes S$ of the Gor'kov-Nambu [370,371] (N) $(\psi_\uparrow, \bar{\psi}_\downarrow)$ and spin (S) spaces $(\psi_\uparrow, \psi_\downarrow)$. In principle, the choice of the bispinors is not unique. One can rearrange components of the bispinors in a different manner, separating explicitly the time-reversal (TR) $(\psi, \bar{\psi})$ and spin spaces. Finally, one may equally think of Ψ as representing the direct product of the Nambu and time-reversal subspaces. These representations are equivalent, that is, $\Omega = N \otimes S \propto S \otimes \text{TR} \propto N \otimes \text{TR}$, and the choice between them is dictated by convenience in calculations for a particular problem at hand. We shall use the $N \otimes S$ choice and omit the S part, since the theory is diagonal in the latter subspace,² as illustrated by Eq. (17.3). The vectors $\bar{\Psi}$ and Ψ are not independent and are related to each other, $\bar{\Psi} = (\check{C}\Psi)^T$, by the chargeconjugation matrix $\check{C} \equiv i\hat{\tau}_2 \otimes \hat{s}_1$, where $\hat{\tau}_i$ and $\hat{s}_i$, for $i = 0, 1, 2, 3$, are Pauli matrices acting in the Nambu and spin subspaces, respectively; the $\hat{\sigma}_i$ matrices, as before, act in the bosonic Keldysh subspace, while $\hat{\gamma}^{\text{cl}(\text{q})}$ act in the fermionic Keldysh subspace. To avoid confusion, we shall specify, where appropriate, Keldysh and Nambu subspaces by subscripts K and N, respectively.

We now employ the same strategy as outlined in Chapters 10-16. First we split the fermionic fields into forward and backward branches and perform the Keldysh-Larkin-Ovchinnikov rotation; see Section 10.3. This way, an additional Keldysh (K) subspace is introduced. We then perform disorder averaging of the partition function and then split the emerging four-fermion term with the matrix field $\check{Q}_{tt'}(\mathbf{r})$, which acts in the $\Omega \otimes K \otimes \text{time}$ space; see Chapter 14. At this point the action is quadratic in fermionic spinors and they may be integrated out, resulting in the following disorder-averaged partition function:

$$\langle Z \rangle_{\text{dis}} = \int \mathbf{D}[\varphi, \Delta] e^{\frac{i}{2} \text{Tr} \{ \check{\varphi} U_s^{-1} \check{\Sigma}_1 \check{\varphi} \} - \frac{i\mu}{2\lambda} \text{Tr} \{ \check{\Delta}^\dagger \check{\Sigma}_1 \check{\Delta} \}} \int \mathbf{D}[\check{Q}] e^{iS[\check{Q}, \Delta, \mathbf{A}, \varphi]} \\ iS[\check{Q}, \Delta, \mathbf{A}, \varphi] = -\frac{\pi\nu}{8\tau_{\text{el}}} \text{Tr} \{ \check{Q}^2 \} + \text{Tr} \ln \left[\check{G}^{-1} + \frac{i}{2\tau_{\text{el}}} \check{Q} - \check{\varphi} - \mathbf{v}_F \check{\mathbf{A}} + \check{\Delta} \right] \quad (17.5)$$

which generalizes Eq. (14.47). We have also included the scalar potential φ , originating from the singlet (i.e. Coulomb) interaction potential $U_s(\mathbf{q})$, Eq. (10.65). Hereafter, we use the check symbol to denote 4×4 matrices acting in the $K \otimes N$ space and the hat symbol for the 2×2 matrices acting in either Nambu or Keldysh subspaces. The bare inverse Green function in $K \otimes N$ space is given by $\check{G}^{-1} = i\check{\tau}_3 \partial_t + \nabla_{\mathbf{r}}^2/2m + \mu$, where $\check{\tau}_3 = \hat{\gamma}^{\text{cl}} \otimes \hat{\tau}_3$. Equation (17.5) also contains the matrix $\check{\Sigma}_1 = \hat{\sigma}_1 \otimes \hat{\tau}_0$ along with the bosonic matrix fields, defined as

$$\check{\varphi}(\mathbf{r}, t) = \varphi^\alpha(\mathbf{r}, t) \hat{\gamma}^\alpha \otimes \hat{\tau}_0, \quad \check{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}^\alpha(\mathbf{r}, t) \hat{\gamma}^\alpha \otimes \hat{\tau}_3, \\ \check{\Delta}(\mathbf{r}, t) = \Delta^\alpha(\mathbf{r}, t) \hat{\gamma}^\alpha \otimes \hat{\tau}_+ - \Delta^{*\alpha}(\mathbf{r}, t) \hat{\gamma}^\alpha \otimes \hat{\tau}_-, \quad (17.6)$$

with $\hat{\tau}_\pm = (\hat{\tau}_1 \pm i\hat{\tau}_2)/2$. The $\check{Q}$ -matrix also has a 4×4 structure in Keldysh and Nambu spaces along with the matrix structure in the time domain.

We use now the fact that the elastic scattering rate $1/\tau_{\text{el}}$ is the largest energy scale in the problem (indeed we focus on disordered superconductors with $T_c\tau_{\text{el}} \ll 1$).

Following the discussion of Section 14.3, it allows one to separate soft modes in $\check{Q}$ -matrix space. The latter obey the nonlinear constraint $\check{Q} \circ \check{Q} = \check{1}$. Focusing on this soft-mode manifold, one may expand the logarithm under the trace operation in Eq. (17.5) in spatial and temporal gradients of the $\check{Q}$ -matrix as well as in the relatively weak fluctuating bosonic fields φ and Δ (similar to the calculations presented in Section 14.5). As a result, one obtains the action of disordered superconductors in the following form (cf. Eq. (14.65)):

$$iS[\check{Q}, \Delta, \mathbf{A}, \varphi] = \frac{iv}{4} \text{Tr} \{ \check{\varphi} \check{\Sigma}_1 \check{\varphi} \} - \frac{\pi v}{8} \text{Tr} \left\{ D \left(\hat{\partial}_{\mathbf{r}} \check{Q} \right)^2 - 4\check{\tau}_3 \partial_t \check{Q} - 4i\check{\varphi} \check{Q} + 4i\check{\Delta} \check{Q} \right\}. \quad (17.7)$$

The first (anomalous) term on the right-hand side is the static polarizability of the electronic band, as explained in Eq. (14.54). The last term is the Keldysh nonlinear sigma-model action, generalized for disordered superconductors, first obtained by Feigel'man, Larkin, and Skvortsov [372, 373] (for the replica version see, for example, [374]). The covariant derivative $\hat{\partial}_{\mathbf{r}}$ is defined as in Eq. (14.49):

$$\hat{\partial}_{\mathbf{r}} \check{Q} = \nabla_{\mathbf{r}} \check{Q} + i [\mathbf{A} \check{\tau}_3, \check{Q}]. \quad (17.8)$$

Notice the $\hat{\tau}_3$ Nambu matrix in the definition of the matrix vector potential (17.6), which signifies the pair-breaking nature of the magnetic field. Also notice that $v = v_{\uparrow} + v_{\downarrow}$ stands for the density of states for two spin components.

13.5.2 17.2 Usadel Equation

Averaging over the strong quenched disorder and taking care of the large energy scale $1/\tau_{\text{el}}$ results in the nonlinear sigma-model action (17.7), supplemented by the nonlinear constraint $\check{Q}^2 = \check{1}$. We focus now on this soft-mode manifold and incorporate smaller energy scales associated with the superconducting correlations (and with the screened Coulomb interactions). To this end we look for a stationary matrix $\underline{\check{Q}}_{\equiv t_1 t_2}(\mathbf{r})$ on the soft-mode Goldstone manifold defined by the nonlinear constraint $\check{Q}^2 = \check{1}$. This is achieved with the help of parametrizations $\check{Q} = \exp(-\check{\mathcal{W}}/2) \circ \underline{\check{Q}} \circ \exp(\check{\mathcal{W}}/2)$ and expansion to first order in the rotation generators $\check{\mathcal{W}}$ as $\check{Q} \approx \underline{\check{Q}} - [\check{\mathcal{W}}, \underline{\check{Q}}]/2$. Substituting this form into the action (17.7) and demanding that the first order in $\check{\mathcal{W}}$ vanishes, one finds the stationary point condition

$$\hat{\partial}_{\mathbf{r}} \left(D \underline{\check{Q}} \hat{\partial}_{\mathbf{r}} \underline{\check{Q}} \right) - \{ \check{\tau}_3 \partial_t, \underline{\check{Q}} \}_+ + i[\check{\Delta} - \check{\varphi}, \underline{\check{Q}}] = 0, \quad (17.9)$$

which is known as the Usadel equation [299] (cf. the normal state Eq. (14.34)).

We shall look for solutions of this equation in the subspace of classical configurations, which exhibit the causality structure and thus have the form

$$\check{Q} = \begin{pmatrix} \hat{Q}^{\text{R}} & \hat{Q}^{\text{K}} \\ 0 & \hat{Q}^{\text{A}} \end{pmatrix}_{\text{K}}, \quad (17.10)$$

with retarded, advanced, and Keldysh components being matrices in the Nambu subspace. Hereafter, we omit underlining the stationary configuration of the sigma-model action. In the

⁰² The omission of this subspace excludes rotations in, e.g. the $(\psi_{\uparrow}, \bar{\psi}_{\uparrow})$ time-reversal subspace. These rotations are exactly the soft modes "normal Cooperons" which are responsible for the weak localization effects; see Section 14.7. We also miss the triplet diffuson soft modes associated with the rotations in $(\psi_{\uparrow}, \psi_{\downarrow})$ subspace. As long as localization and spin-scattering effects are not considered, such an omission is indeed justified. I am indebted to M. Skvortsov for discussing this issue.

subspace of classical configurations the nonlinear constraint $\check{Q}^2 = \hat{1}$ is resolved by the following conditions:

$$\hat{Q}^R \hat{Q}^R = \hat{Q}^A \hat{Q}^A = \hat{1}, \quad \hat{Q}^R \hat{Q}^K + \hat{Q}^K \hat{Q}^A = 0. \quad (17.11)$$

Substituting the classical ansatz (17.10) into the Usadel equation (17.9), and assuming that the fields $\Delta(\mathbf{r}, t)$ and $\varphi(\mathbf{r}, t)$ are pure classical, one finds a closed equation for the retarded (advanced) component of the stationary $\check{Q}$ -matrix:

$$\partial_{\mathbf{r}} \left(D \hat{Q}^{R(A)} \partial_{\mathbf{r}} \hat{Q}^{R(A)} \right) + i \left[\epsilon \hat{\tau}_3, \hat{Q}^{R(A)} \right] + i \left[\hat{\Delta} - \hat{\varphi}, \hat{Q}^{R(A)} \right] = 0, \quad (17.12)$$

where we employed a Fourier representation for the operator ∂_t . As we shall see, this equation describes the quasiparticle spectrum of the superconductor.

First we look for a spatially uniform and time translationally invariant solution $\hat{\Lambda}_\epsilon^{R(A)}$ that satisfies

$$i\epsilon \left[\hat{\tau}_3, \hat{\Lambda}_\epsilon^{R(A)} \right] + i \left[\hat{\Delta}, \hat{\Lambda}_\epsilon^{R(A)} \right] = 0. \quad (17.13)$$

While writing this equation, we have assumed that the order parameter field $\Delta(\mathbf{r}, t)$ has developed a nonzero expectation value (condensate) Δ , which is time- and space-independent.³ Its value will be determined below from the self-consistency condition. Without loss of generality we assume that Δ is real, thus $\hat{\Delta} = i\Delta \hat{\tau}_2$, see Eq. (17.6). Taking into account that $(\hat{Q}^{R(A)})^2 = \hat{1}$, one finds the solution of Eq. (17.13) as

$$\hat{\Lambda}_\epsilon^R = \frac{\text{sign } \epsilon}{\sqrt{(\epsilon + i0)^2 - \Delta^2}} \begin{pmatrix} \epsilon & \Delta \\ -\Delta & -\epsilon \end{pmatrix}_N = \hat{\tau}_3 u_\epsilon + i\hat{\tau}_2 v_\epsilon, \quad (17.14)$$

where

$$u_\epsilon = \frac{\epsilon \text{sign } \epsilon}{\sqrt{(\epsilon + i0)^2 - \Delta^2}}, \quad v_\epsilon = \frac{\Delta \text{sign } \epsilon}{\sqrt{(\epsilon + i0)^2 - \Delta^2}}, \quad u_\epsilon^2 - v_\epsilon^2 = 1 \quad (17.15)$$

and $\hat{\Lambda}_\epsilon^A = -\hat{\tau}_3 u_\epsilon^* - i\hat{\tau}_2 v_\epsilon^*$. The infinitesimal imaginary increments are chosen to have the retarded (advanced) component analytic in the entire upper (lower) halfplane of the complex energy ϵ . The sign ϵ factor ensures that $\hat{\Lambda}_\epsilon^{R(A)} \rightarrow \pm \hat{\tau}_3$ for

$|\epsilon| \gg \Delta$, as expected for a normal metal; see Eq. (14.25). Notice also that u_ϵ and v_ϵ are real for $|\epsilon| > \Delta$ and pure imaginary for $|\epsilon| < \Delta$. In the latter case the sign ϵ factor also ensures continuity of these functions at $\epsilon = 0$.

We turn now to the determination of the order parameter Δ . Varying the action (17.5) and (17.7) with respect to the quantum component $\Delta^{*q}(\mathbf{r}, t)$ of the order parameter field, one finds the stationary point equation for $\Delta^{\text{cl}}(\mathbf{r}, t)$:

$$\Delta^{\text{cl}}(\mathbf{r}, t) = \frac{\pi\lambda}{2} \text{Tr} \{ (\hat{\gamma}^q \otimes \hat{\tau}_-) \check{Q} \} = \frac{\pi\lambda}{2} \text{Tr} \{ \hat{\tau}_- \hat{Q}^K \}, \quad (17.16)$$

where in the last equality we restricted ourselves to the classical ansatz (17.10). Variation with respect to $\Delta^q(\mathbf{r}, t)$ leads to the complex conjugate equation for $\Delta^{*\text{cl}}$. These equations provide the self-consistency conditions for the complex order parameter Δ . Looking for a constant real solution of the form $\Delta^{\text{cl}}(\mathbf{r}, t) = \Delta$, one obtains $\Delta = (\pi\lambda/2) \int (d\epsilon/2\pi) (\hat{\Lambda}_\epsilon^K)_{12}$. According to FDT, $\hat{\Lambda}^K = \tanh(\epsilon/2T) \times (\hat{\Lambda}_\epsilon^R - \hat{\Lambda}_\epsilon^A)$, and thus $\hat{\Lambda}_\epsilon^K = 0$ for $|\epsilon| < \Delta$. As a result, one finds the self-consistency condition for $\Delta = \Delta(T)$:⁴

³ Since the scalar potential φ does not have a finite expectation value, we drop it from the equation for the equilibrium matrix $\hat{\Lambda}_\epsilon^R$.

$$\Delta = \lambda \Delta \int_{|\Delta|}^{\omega_D} d\epsilon \frac{\tanh \epsilon/2T}{\sqrt{\epsilon^2 - |\Delta|^2}} \quad (17.17)$$

This equation admits a nonzero solution for $T < T_c$, where the critical temperature is determined from the condition $1 = \lambda \int_0^{\omega_D} (d\epsilon/\epsilon) \tanh \epsilon/2T_c$. On the other hand, at $T = 0$ the order parameter $\Delta(0)$ is given by the solution of $1 = \lambda \int_{\Delta(0)}^{\omega_D} d\epsilon/\sqrt{\epsilon^2 - \Delta^2(0)}$. This leads to the simple relation between the two [375] $\Delta(0) = 1.76T_c$, which is reasonably well satisfied for many conventional superconductors.

Having determined $\hat{\Lambda}_\epsilon^R$ and the order parameter $\Delta(T)$, one may discuss the single-particle density of states. The latter is defined as $\nu(\epsilon) = -\text{Im} \mathcal{G}^R(\epsilon)/\pi$, where $\mathcal{G}^R$ is the retarded single-particle Green function (traced over the spin indices) discussed in Section 16.3. Following the same root (cf. Eq. (16.25)), one may show that in the stationary point approximation the density of states is given by

$$\nu(\epsilon) = \frac{v}{2} \text{Re Tr} \left\{ \hat{\tau}_3 \hat{\Lambda}_\epsilon^R \right\} = v \theta(|\epsilon| - \Delta) \frac{|\epsilon|}{\sqrt{\epsilon^2 - \Delta^2}} \quad (17.18)$$

We find thus that the quasiparticle spectrum has a gap, that is, $\nu(\epsilon) = 0$ for $|\epsilon| < \Delta(T)$, as long as $T < T_c$. Immediately outside the gap the density of states exhibits an integrable square root singularity, which has profound consequences for quasiparticle dynamics; see Section 17.5. It is instructive to check that $\int d\epsilon (\nu(\epsilon) - \nu) = 0$. This observation implies that the total number of single-particle

states is not altered by the gap opening. Instead, the states are "pushed" from the gap interval into above-the-gap peaks.

Let us now focus on the Keldysh component of the Usadel equation (17.9), given by the (1,2) element in K space. It provides another equation, which takes the form

$$\hat{\partial}_r \left(D \hat{Q}^R \hat{\partial}_r \hat{Q}^K + D \hat{Q}^K \hat{\partial}_r \hat{Q}^A \right) + i \left[\epsilon \hat{\tau}_3, \hat{Q}^K \right] + i \left[\hat{\Delta} - \hat{\varphi}, \hat{Q}^K \right] = 0. \quad (17.19)$$

The last of the conditions (17.11) may be explicitly resolved by the standard parametrization of the Keldysh component as

$$\hat{Q}^K = \hat{Q}^R \circ \hat{F} - \hat{F} \circ \hat{Q}^A, \quad (17.20)$$

where $\hat{F}$ is a 2×2 matrix in Nambu space (provided $(\hat{Q}^R)^2 = (\hat{Q}^A)^2 = \hat{1}$), which may be thought of as a matrix distribution function. Using the fact that the $\tilde{Q}_{t,t'}(\mathbf{r})$ matrix has the symmetries of the $\Psi(t, \mathbf{r}) \bar{\Psi}(t', \mathbf{r})$ bilinear combination, one may show [376] that among the four components of $\hat{F}_{t,t'}(\mathbf{r})$ only two are linearly independent. Following Schmid-Schön [377] and Larkin-Ovchinnikov [28], we choose them as

$$\hat{F} = \begin{pmatrix} F_L + F_T & 0 \\ 0 & F_L - F_T \end{pmatrix}_N = F_{L;tt'}(\mathbf{r}) \hat{\tau}_0 + F_{T;tt'}(\mathbf{r}) \hat{\tau}_3 \quad (17.21)$$

where the subscripts L and T refer to the longitudinal and transversal components of the distribution function. The meaning of this notation will be clarified at the end of Section 17.5. The fact that $\tilde{Q}_{t,t'}(\mathbf{r})$ has the symmetries of $\Psi(t, \mathbf{r}) \bar{\Psi}(t', \mathbf{r})$ translates into the statement that $F_{L;tt'}$ is odd while $F_{T;tt'}$ is even under the interchange of $t \leftrightarrow t'$. Correspondingly their Wigner transforms $F_L(\epsilon, \mathbf{r}, t)$ and $F_T(\epsilon, \mathbf{r}, t)$ are odd and even functions of energy ϵ , respectively. Notice that there are not two different quasiparticle distribution functions. Instead, the odd and even

⁰⁴ To bring it to textbook form, e.g. [375], one changes variables as $\xi = \sqrt{\epsilon^2 - |\Delta|^2}$ to write $\epsilon = \sqrt{|\Delta|^2 + \xi^2}$, and finds $1 = \lambda \int_0^{\omega_D} (d\xi/\sqrt{|\Delta|^2 + \xi^2}) \tanh \sqrt{|\Delta|^2 + \xi^2}/2T$.

components of the one and only quasiparticle distribution function appear in the $\hat{F}$ -matrix with the $\hat{\tau}_0$ and $\hat{\tau}_3$ Nambu matrices. In equilibrium $F_L(\epsilon) = \tanh \epsilon/2T$ and $F_T(\epsilon) = 0$. Being even, $F_T(\epsilon)$ is responsible for the charge current and density, while the odd $F_L(\epsilon)$ provides the energy current and density.

It is sometimes useful to subtract from the Keldysh Usadel equation (17.19) the retarded one (17.12) convoluted with $\hat{F}$ and add $\hat{F}$ convoluted with the advanced equation (17.12), schematically $K - R \circ F + F \circ A$. As a result, one obtains the equation for the distribution matrix $\hat{F}$:

$$\begin{aligned} D \left(\hat{\partial}_{\mathbf{r}}^2 \hat{F} - \hat{\partial}_{\mathbf{r}} \left(\hat{Q}^R \hat{\partial}_{\mathbf{r}} \hat{F} \hat{Q}^A \right) + \hat{Q}^R \hat{\partial}_{\mathbf{r}} \hat{Q}^R \hat{\partial}_{\mathbf{r}} \hat{F} - \hat{\partial}_{\mathbf{r}} \hat{F} \hat{Q}^A \hat{\partial}_{\mathbf{r}} \hat{Q}^A \right) \\ + i \hat{Q}^R [\epsilon \hat{\tau}_3, \hat{F}] - i [\epsilon \hat{\tau}_3, \hat{F}] \hat{Q}^A + i \hat{Q}^R [\hat{\Delta} - \hat{\varphi}, \hat{F}] - i [\hat{\Delta} - \hat{\varphi}, \hat{F}] \hat{Q}^A = 0 \end{aligned} \quad (17.22)$$

As mentioned previously, only two components of this equation are independent. One can thus (i) take the Nambu trace of this equation and (ii) multiply it by $\hat{\tau}_3$ and then take the Nambu trace. This way, one finds two scalar equations for the two unknown functions F_L and F_T . Being written in the Wigner transformed representation, they are known as Larkin-Ovchinnikov equations [28]. As we shall see in Section 17.5, the Wigner transformation may be dangerous due to the singularities in the density of states. If this is the issue, it is more convenient to work directly with Eq. (17.19) written in the energy representation than with Eq. (17.22).

Finally, varying the action (17.5) and (17.7) with respect to the quantum component of the scalar potential $\varphi^q(\mathbf{r}, t)$ and adopting the classical ansatz (17.10), one obtains the Poisson equation for the scalar potential $\varphi^{\text{cl}} = \varphi$:

$$\nabla_{\mathbf{r}}^2 \varphi = 4\pi e^2 \left[v\varphi + \frac{\pi v}{4} \text{Tr} \left\{ \hat{\tau}_0 \left(\hat{Q}^K - \hat{\Lambda}^K \right) \right\} \right], \quad (17.23)$$

where the first term on the right-hand side originates from the variation of the first (anomalous) term in the action (17.7), which represents the static polarizability of the electronic band. In the last term we have subtracted the equilibrium matrix $\hat{\Lambda}^K$, which is supposed to carry the same charge as the positive background. The Poisson equation together with the self-consistency condition (17.16) and the Usadel equations for the spectrum (17.12) and the distribution function (17.22) (or equivalently (17.19)) constitute the closed system of equations governing the dynamics of the superconductor. In the following section we consider some applications of these equations.

13.5.3 17.3 Stationary Superconductivity

In the presence of boundaries or proximity to a normal metal one faces the problem of spatially nonuniform superconductivity. In this case, both Δ and $\hat{Q}^{R(A)}$ acquire a coordinate dependence, and one should look for solutions of Eqs. (17.9) and (17.16). In doing so, we will assume that $\check{Q}_{tt'}$ is static, that is, independent of the central time. As a result, $\mathcal{Q}_{\epsilon}$ is diagonal in the energy representation. The nonlinear constraints $\left(\hat{Q}^{R(A)} \right)^2 = \hat{1}$, Eq. (17.11), may be explicitly resolved by the angular parametrization [378] for the retarded and advanced blocks of the $\hat{Q}$ -matrix:

$$\hat{Q}^R(\mathbf{r}, \epsilon) = \begin{pmatrix} \cosh \vartheta & \sinh \vartheta \exp(i\chi) \\ -\sinh \vartheta \exp(-i\chi) & -\cosh \vartheta \end{pmatrix}_{\mathbf{N}} \quad (17.24a)$$

$$\hat{Q}^A(\mathbf{r}, \epsilon) = -\hat{\tau}_3 \left[\hat{Q}^R \right]^{\dagger} \hat{\tau}_3 = \begin{pmatrix} -\cosh \vartheta^* & -\sinh \vartheta^* \exp(i\chi^*) \\ \sinh \vartheta^* \exp(-i\chi^*) & \cosh \vartheta^* \end{pmatrix}_{\mathbf{N}}, \quad (17.24b)$$

where $\vartheta(\mathbf{r}, \epsilon)$ and $\chi(\mathbf{r}, \epsilon)$ are complex coordinate- and energy-dependent angles. Substituting $\hat{Q}^R$ in the form of (17.24) into Eq. (17.12), one finds from the diagonal elements of the corresponding matrix equation

$$D\hat{\partial}_{\mathbf{r}} \left(\sinh^2 \vartheta \hat{\partial}_{\mathbf{r}} \chi \right) = 2i|\Delta| \sinh \vartheta \sin(\theta - \chi), \quad (17.25)$$

where the order parameter is parametrized as $\Delta(\mathbf{r}) = |\Delta(\mathbf{r})| \exp\{i\theta(\mathbf{r})\}$. From the off-diagonal block of the matrix equation (17.12), using Eq. (17.25), one obtains

$$D\hat{\partial}_{\mathbf{r}}^2 \vartheta + 2i\epsilon \sinh \vartheta - 2i|\Delta| \cosh \vartheta \cos(\theta - \chi) = \frac{D}{2} \left(\hat{\partial}_{\mathbf{r}} \chi \right)^2 \sinh 2\vartheta. \quad (17.26)$$

We proceed with Eq. (17.22) for the distribution matrix $\hat{F}$, parametrized as in Eq. (17.21). (i) Taking the Nambu trace of the matrix equation (17.22) and (ii) multiplying it by $\hat{\tau}_3$ and then taking the trace, one finds two coupled kinetic equations for the stationary non-equilibrium distribution functions $F_{L(T)}(\mathbf{r}, \epsilon)$, which can be written in the following form [379]:

$$\hat{\partial}_{\mathbf{r}} \left(\mathcal{D}_L \hat{\partial}_{\mathbf{r}} F_L - D\mathcal{Y} \hat{\partial}_{\mathbf{r}} F_T \right) + D\mathcal{J}_S \hat{\partial}_{\mathbf{r}} F_T = \mathcal{I}^a, \quad (17.27a)$$

$$\hat{\partial}_{\mathbf{r}} \left(\mathcal{D}_T \hat{\partial}_{\mathbf{r}} F_T + D\mathcal{Y} \hat{\partial}_{\mathbf{r}} F_L \right) + D\mathcal{J}_S \hat{\partial}_{\mathbf{r}} F_L = \mathcal{I}^b. \quad (17.27b)$$

Here we have introduced energy- and coordinate-dependent diffusion coefficients

$$\mathcal{D}_L = \frac{D}{4} \text{Tr} \left\{ \hat{\tau}_0 - \hat{Q}^R \hat{Q}^A \right\} = \frac{D}{2} \left[1 + |\cosh \vartheta|^2 - |\sinh \vartheta|^2 \cosh(2 \text{Im}[\chi]) \right], \quad (17.28a)$$

$$\mathcal{D}_T = \frac{D}{4} \text{Tr} \left\{ \hat{\tau}_0 - \hat{\tau}_3 \hat{Q}^R \hat{\tau}_3 \hat{Q}^A \right\} = \frac{D}{2} \left[1 + |\cosh \vartheta|^2 + |\sinh \vartheta|^2 \cosh(2 \text{Im}[\chi]) \right], \quad (17.28b)$$

as well as the density of the supercurrent carrying states $\mathcal{J}_S(\mathbf{r}, \epsilon)$ and the spectral density $\mathcal{Y}(\mathbf{r}, \epsilon)$, defined as

$$\mathcal{J}_S = \frac{1}{4} \text{Tr} \left\{ \hat{\tau}_3 \left(\hat{Q}^R \hat{\partial}_{\mathbf{r}} \hat{Q}^R - \hat{Q}^A \hat{\partial}_{\mathbf{r}} \hat{Q}^A \right) \right\} = -\text{Im} \left(\sinh^2 \vartheta \hat{\partial}_{\mathbf{r}} \chi \right), \quad (17.29)$$

$$\mathcal{Y} = \frac{1}{4} \text{Tr} \left\{ \hat{Q}^R \hat{\tau}_3 \hat{Q}^A \right\} = \frac{1}{2} |\sinh \vartheta|^2 \sinh(2 \text{Im}[\chi]). \quad (17.30)$$

Finally, the right-hand sides of Eqs. (17.27) contain the two "collision integrals," which are due to Andreev-like interactions of non-equilibrium quasiparticles with the order parameter. Both of them are proportional to the transversal component of the distribution function:

$$\mathcal{I}^a = \frac{F_T}{2} \text{Tr} \left\{ \hat{\tau}_3 \left(\hat{Q}^R \hat{\Delta} + \hat{\Delta} \hat{Q}^A \right) \right\} = 2F_T |\Delta| \text{Re}[\sinh \vartheta \sin(\theta - \chi)], \quad (17.31a)$$

$$\mathcal{I}^b = \frac{F_T}{2} \text{Tr} \left\{ \hat{Q}^R \hat{\Delta} + \hat{\Delta} \hat{Q}^A \right\} = -2F_T |\Delta| \text{Im}[\sinh \vartheta \cos(\theta - \chi)]. \quad (17.31b)$$

The actual collision integrals associated with the inelastic and electron-phonon interactions are discussed in Section 18.5; see also Kopnin [376]. Equations (17.25), (17.26), and (17.27), together with the spectral quantities (17.28)(17.31), represent a complete set of equations for disordered superconductors applicable within the static approximation. These equations are accompanied by the self-consistency relation (see Eq. (17.16))

$$\Delta(\mathbf{r}) = \frac{\lambda}{4} \int d\epsilon \left\{ \left[\sinh \vartheta e^{i\chi} + \sinh \vartheta^* e^{i\chi^*} \right] F_L - \left[\sinh \vartheta e^{i\chi} - \sinh \vartheta^* e^{i\chi^*} \right] F_T \right\}, \quad (17.32)$$

resulting in a coordinate-dependent order parameter field $\Delta(\mathbf{r})$.

One should supplement these equations with the boundary conditions that express the current continuity [380-382]. For a tunneling junction with conductance g_T , sandwiched between two metals, the continuity dictates that at the junction

$$v_L D_L \tilde{Q}_L \hat{\partial}_r^\perp \tilde{Q}_L = g_T [\tilde{Q}_L, \tilde{Q}_R] = v_R D_R \tilde{Q}_R \hat{\partial}_r^\perp \tilde{Q}_R, \quad (17.33)$$

where L/R denote left/right of the junction, respectively, and $\hat{\partial}_r^\perp$ stands for the derivative normal to the junction.

An analytic solution of the system of kinetic equations (17.25)-(17.27) is rarely possible. In general, one has to rely on numerical methods. To find a solution for a given transport problem, one may proceed as follows [378].

- (i) Start with a certain $\Delta(\mathbf{r})$. Usually one takes $\Delta = \text{const}$ everywhere in the superconductors and $\Delta = 0$ in the normal metals.
- (ii) Solve the Usadel equations (17.25)-(17.26) for the retarded Green function, thus determining the spectral angles $\vartheta(\mathbf{r}, \epsilon)$ and $\chi(\mathbf{r}, \epsilon)$.
- (iii) Use these solutions to calculate the spectral kinetic quantities $\mathcal{D}_{L,T}(\mathbf{r}, \epsilon)$, $\mathcal{J}_S(\mathbf{r}, \epsilon)$ and $\mathcal{Y}(\mathbf{r}, \epsilon)$.
- (iv) Solve the kinetic equations (17.27) for $F_{L/T}(\mathbf{r}, \epsilon)$.
- (v) Calculate a new $\Delta(\mathbf{r})$ from Eq. (17.32) and iterate this procedure until self-consistency is achieved.

Having solved the kinetic equations, one may determine the physical quantities of interest. For example, the electric current is given by the derivative of the action (17.7) with respect to the quantum component of the vector potential (cf. Eq. (14.55).) This way, one finds

$$\begin{aligned} \mathbf{J} &= \frac{e\pi\nu D}{4} \text{Tr} \left\{ \hat{\gamma}^q \otimes \hat{\tau}_3 \tilde{Q} \hat{\partial}_r \tilde{Q} \right\} = \frac{e\pi\nu D}{4} \text{Tr} \left\{ \hat{\tau}_3 \left(\hat{Q}^R \hat{\partial}_r \hat{Q}^K + \hat{Q}^K \hat{\partial}_r \hat{Q}^A \right) \right\} \\ &= \frac{e\pi\nu D}{4} \text{Tr} \left\{ \hat{\tau}_3 \left(\hat{Q}^R \hat{\partial}_r \hat{Q}^R \hat{F} - \hat{F} \hat{Q}^A \hat{\partial}_r \hat{Q}^A + \hat{\partial}_r \hat{F} - \hat{Q}^R \hat{\partial}_r \hat{F} \hat{Q}^A \right) \right\}. \end{aligned} \quad (17.34)$$

The first two terms associated with the gradients of the quasiparticle spectrum give the supercurrent $\mathbf{J}_S$. The last two terms proportional to the gradients of the distribution function are the normal component of the current $\mathbf{J}_N$. In terms of the quantities introduced previously, one finds the following for the super and normal current components, respectively:

$$\mathbf{J}_S = \frac{e\nu D}{2} \int d\epsilon F_L(\mathbf{r}, \epsilon) \mathcal{J}_S(\mathbf{r}, \epsilon); \quad \mathbf{J}_N = \frac{e\nu}{2} \int d\epsilon \mathcal{D}_T(\mathbf{r}, \epsilon) \hat{\partial}_r F_T(\mathbf{r}, \epsilon) \quad (17.35)$$

where we used that $\text{Tr} \left\{ \hat{Q}^R \hat{\partial}_r \hat{Q}^R \right\} = \text{Tr} \left\{ \hat{\tau}_3 \hat{Q}^R \hat{Q}^A \right\} = 0$. Notice that the normal component is the same as Eq. (14.55) with the substitution $D \rightarrow \mathcal{D}_T$. Indeed, it is only the component of the distribution function that is even in energy, that is, F_T , which contributes to the normal current (14.55). As opposed to the normal current, the supercurrent is given by the odd component of the distribution function F_L and therefore may exist even in equilibrium, where $F_L = \tanh \epsilon/2T$.

13.5.4 17.4 SNS System

As an example of an application of the general formalism developed in the previous section, we consider a superconductor-normal metal-superconductor (SNS) system. We shall assume that the normal part (N) is represented by a quasi-one-dimensional nano-wire with cross-section diameter less than the superconducting coherence length $\xi_0 = \sqrt{D/\Delta(0)}$. This allows us to treat the problem as 1 d, that is, the spatial dependence is restricted to the x -coordinate

only. The superconducting leads (S) are assumed to be bulk and 3d, which allows us to fix their order parameter to be $\Delta = \text{const}$ and avoid solving the self-consistency condition. That is, the normal nano-wire does not damage the superconductivity in bulk leads. In the normal wire there is no Cooper channel attraction, that is, $\lambda = 0$ and thus, according to the self-consistency equation (17.16), the order parameter is absent, $\Delta = 0$. Nevertheless, the leads induce superconductivity inside the normal region, through the coordinate-dependent $\hat{Q}$ -matrix. This phenomenon is known as the proximity effect.

We start from the case where both superconducting leads have the same phase of the order parameter, which we choose as $\theta = 0$. The $\hat{Q}^R(x, \epsilon)$ -matrix inside the wire, that is, for $|x| < L/2$, may be parametrized as in Eq. (17.24a) with $\chi = 0$ and thus $\partial_x \chi = 0$. As a result, the Usadel equation (17.26) simplifies considerably and reads as

$$D\partial_x^2 \vartheta(x, \epsilon) + 2i\epsilon \sinh \vartheta(x, \epsilon) = 0 \quad (17.36)$$

Indeed, $\Delta(x) = 0$ for $|x| < L/2$. At the interfaces with the superconducting leads at $x = \pm L/2$, this equation is supplemented by the boundary conditions $\vartheta(\pm L/2, \epsilon) = \vartheta_{\text{BCS}}(\epsilon)$, where $\tanh \vartheta_{\text{BCS}}(\epsilon) = \Delta/\epsilon$; see Eqs. (17.15) and (17.24). Having solved Eq. (17.36) for the angle $\vartheta(x, \epsilon)$, one finds the local density of states as $\nu(x, \epsilon) = \nu \text{Re}[\cosh \vartheta(x, \epsilon)]$; see Eq. (17.18).

It is convenient to perform rotation $\vartheta(x, \epsilon) = i\pi/2 - \zeta(x, \epsilon)$ such that Eq. (17.36) becomes real and allows the straightforward integration

$$\sqrt{\frac{\epsilon}{E_{\text{Th}}}} = \int_{\zeta_{\text{BCS}}}^{\zeta_0} \frac{d\zeta}{\sqrt{\sinh \zeta_0 - \sinh \zeta}} \equiv K(\zeta_0, \epsilon), \quad (17.37)$$

where $E_{\text{Th}} = D/L^2$ is the Thouless energy of the wire, $\zeta_0 = \zeta(0, \epsilon)$, and $\sinh \zeta_{\text{BCS}} = \epsilon/\sqrt{\Delta^2 - \epsilon^2}$. Equation (17.37) defines ζ_0 as a function of the energy ϵ . Knowing $\zeta_0(\epsilon)$ one determines the density of states in the middle of the wire as $\nu(0, \epsilon) = \nu \text{Im}[\sinh \zeta_0(\epsilon)]$.

In the limit of a long wire, $L \gg \xi_0$, the density of states is distorted from its normal value ν in the deep sub-gap limit, $\epsilon \ll \Delta$. One may approximate thus $\zeta_{\text{BCS}} \approx 0$ and the function on the right-hand side of Eq. (17.37) is essentially energy independent, $K(\zeta_0, \epsilon) \approx K(\zeta_0, 0)$. It exhibits the maximum $K_{\text{max}} = K(\zeta_0^{\text{max}}) \approx 1.75$ at $\zeta_0^{\text{max}} \approx 1.5$. On the other hand, the left-hand side of Eq. (17.37) exceeds K_{max} for $\epsilon > (K_{\text{max}})^2 E_{\text{Th}} = \epsilon_g$. Thus, for all energies $\epsilon < \epsilon_g$, Eq. (17.37) has only a real solution for ζ_0 and therefore $\nu(0, \epsilon) \equiv 0$, since $\nu(0, \epsilon) \propto \text{Im}[\sinh \zeta_0]$. For $\epsilon > \epsilon_g$ the function ζ_0 becomes complex and gives a finite density of states. Right above the gap, $0 < \epsilon - \epsilon_g \ll \epsilon_g$, one finds with the help of Eq. (17.37)

$$\nu(\epsilon) \approx 3.7\delta^{-1} \sqrt{\frac{\epsilon}{\epsilon_g} - 1}, \quad (17.38)$$

where $\nu(\epsilon) = \int dx \nu(x, \epsilon)$ is the global density of states, integrated over the volume of the wire, and $\delta = 1/(\nu L)$ is its level spacing. We found thus an induced mini-gap inside the long normal wire. The density of states exhibits square root nonanalytic behavior above the mini-gap. Note that since $\epsilon_g \propto E_{\text{Th}} \ll \Delta$, the approximation $\zeta_{\text{BCS}}(\epsilon_g) \approx 0$ is well justified.

In the opposite limit of a short wire, $L \ll \xi_0$, or equivalently $E_{\text{Th}} \gg \Delta$, Eq. (17.37) is still applicable. However, one must keep the full energy dependence of $\zeta_{\text{BCS}}(\epsilon)$. One may show that the energy gap is given by $\epsilon_g = \Delta - \Delta^3/8E_{\text{Th}}^2$ and is only slightly smaller than the bulk gap Δ . This is natural, since the proximity effect for the short wire is expected to be strong. Immediately above the induced gap, the density of states again exhibits square root nonanalyticity, Fig. 17.1. The coefficient in front of it, however, is large, $\nu(\epsilon) \sim \delta^{-1} (E_{\text{Th}}/\Delta)^2 \sqrt{\epsilon/\epsilon_g - 1}$, [383].

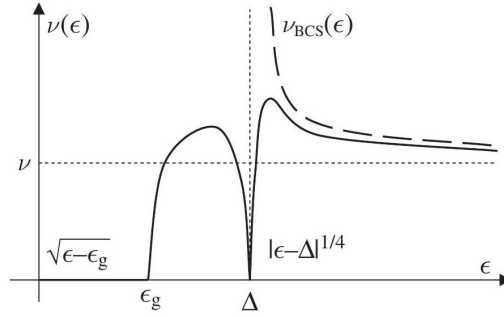


Figure 17.1 Integrated density of states in a short SNS system, after [383]. Above the proximity gap ϵ_g it exhibits square-root nonanalyticity, while at large energy it approaches the BCS result (17.18). One also finds a soft gap $\nu(\epsilon) \sim |\epsilon - \Delta|^{1/4}$ around the bulk order parameter Δ .

We turn now to the case of a finite phase difference θ between the order parameters of the two S leads. This leads to the boundary condition $\chi(L/2, \epsilon) - \chi(-L/2, \epsilon) = \theta$. Our goal is to calculate the Josephson supercurrent $J_S(\theta)$, which flows through the normal wire under these conditions. For the step function order parameter, $\Delta(x) = \Delta$ for $|x| > L/2$ and $\Delta = 0$ for $|x| < L/2$, Eqs. (17.25) and (17.26) acquire the form

$$D\partial_x (\sinh^2 \vartheta \partial_x \chi) = 0 \quad (17.39a)$$

$$D\partial_x^2 \vartheta + 2i\epsilon \sinh \vartheta = \frac{D}{2} (\partial_x \chi)^2 \sinh 2\vartheta \quad (17.39b)$$

The boundary conditions for ϑ are $\vartheta(\pm L/2, \epsilon) = \vartheta_{\text{BCS}}(\epsilon)$, while for the phase $\chi(L/2, \epsilon) - \chi(-L/2, \epsilon) = \theta$. For the short wire, $L \ll \xi_0$, the second term on the left-hand side of (17.39b) is smaller than the gradient term by $\epsilon/E_{\text{Th}} \ll 1$ and thus may be neglected. Equation (17.39a) allows for the first integral of motion $\sinh^2 \vartheta \partial_x \chi = -\mathcal{J}$ (cf. Eq. (17.29)). One may thus eliminate $\partial_x \chi$ from Eq. (17.39b) and find $\partial_x^2 \vartheta = \mathcal{J}^2 \cosh \vartheta / \sinh^3 \vartheta = -(\mathcal{J}^2/2) \partial_\vartheta \sinh^{-2} \vartheta$. This "Newtonian" equation may be exactly integrated:

$$\cosh \vartheta(x, \epsilon) = \cosh \vartheta_0 \cosh \left(\frac{\mathcal{J}x}{\sinh \vartheta_0} \right), \quad (17.40)$$

where $\vartheta_0 = \vartheta(0, \epsilon)$. Knowing $\vartheta(x, \epsilon)$, one inserts it back into the first integral of (17.39a), $\theta = \int_{-L/2}^{L/2} dx \partial_x \chi = -\mathcal{J} \int_{-L/2}^{L/2} dx / \sinh^2 \vartheta(x, \epsilon)$, to find

$$\tan(\theta/2) = -\frac{1}{\sinh \vartheta_0} \tanh \left(\frac{\mathcal{J}}{2 \sinh \vartheta_0} \right). \quad (17.41)$$

This equation along with Eq. (17.40) taken at the NS interfaces, $x = \pm L/2$, constitute the system of two algebraic equations for two unknown quantities: $\mathcal{J}$ and ϑ_0 . Such an algebraic problem may be straightforwardly solved, resulting in $\mathcal{J}(\epsilon, \theta) = -(2/L) \sinh \vartheta_0 \operatorname{arctanh} [\sinh \vartheta_0 \tan(\theta/2)]$, whereas the angle at $x = 0$ is $\sinh \vartheta_0 = \sinh \vartheta_{\text{BCS}} / \sqrt{1 + \tan^2(\theta/2) \cosh^2 \vartheta_{\text{BCS}}}$, where the boundary angle is $\cosh \vartheta_{\text{BCS}} = \epsilon / \sqrt{\epsilon^2 - \Delta^2}$. Knowing $\mathcal{J}(\epsilon, \theta)$, one finds the Josephson supercurrent with the help of Eq. (17.35) as

$$J_S(\theta) = \frac{evD}{2} \int_0^\infty d\epsilon \tanh \left(\frac{\epsilon}{2T} \right) \operatorname{Im} \mathcal{J}(\epsilon, \theta) \quad (17.42)$$

Using the obtained solution for $\mathcal{J}(\epsilon, \theta)$, one finds that

$$\operatorname{Im} \mathcal{J}(\epsilon, \theta) = \frac{1}{L} \frac{\pi \Delta \cos(\theta/2)}{\sqrt{\epsilon^2 - \Delta^2 \cos^2(\theta/2)}} \quad (17.43)$$

for $\Delta \cos(\theta/2) < \epsilon < \Delta$, and $\text{Im } \mathcal{J}(\epsilon, \theta) = 0$ otherwise. Employing Eqs. (17.42) and (17.43), one arrives at the result derived by Kulik and Omelyanchuk [384] for the zero-temperature Josephson current of the short diffusive SNS junction:

$$J_S(\theta) = \frac{\pi g_D \Delta}{e} \cos(\theta/2) \operatorname{arctanh}[\sin(\theta/2)] \quad (17.44)$$

where $g_D = e^2 \nu D/L$ is the conductance of the normal wire. The phase dependence is 2π -periodic with $J_S(0) = J_S(\pi) = 0$ and has a logarithmical divergent derivative at $\theta = \pi$.

13.5.5 17.5 Collective Modes of Disordered Superconductors

We now consider the spectrum of collective modes in disordered superconductors. They are combined fluctuations of the complex order parameter Δ , the $\hat{Q}$ -matrix (which encompasses both the quasiparticle spectrum and their distribution function) and, for charged superconductors, the scalar potential φ . The problem is somewhat similar to the collective modes of the collisionless plasma considered in Chapter 7 and described by the combined kinetic and Poisson equations. However, in the case of the superconductor one has to add the dynamics of the order parameter, governed by the self-consistency condition (17.16), and the associated change in the quasiparticle spectrum, governed by the retarded (or advanced) component of the Usadel equation. To find the spectrum of a small oscillation we linearize this system of equations with respect to small deviations, that is, put $\tilde{Q} = \hat{Q} + \delta\tilde{Q}$, while $\Delta = \Delta + \delta\Delta$, and restrict ourselves to the linear order in $\delta\tilde{Q}$, $\delta\Delta$, and φ .

Taking into account that $[\epsilon\hat{\tau}_3, \hat{\Lambda}^K] + [\hat{\Delta}, \hat{\Lambda}^K] = 0$, the linearized Keldysh component of the Usadel equation (17.19) for $\hat{Q}_{\epsilon\epsilon'}^K = \hat{\Lambda}_{\epsilon}^K \delta_{\epsilon\epsilon'} + \delta\hat{Q}_{\epsilon\epsilon'}^K$ takes the form

$$\begin{aligned} D\hat{\Lambda}^R \nabla_{\mathbf{r}}^2 \delta\hat{Q}^K + i [\epsilon\hat{\tau}_3, \delta\hat{Q}^K] + i [\hat{\Delta}, \delta\hat{Q}^K] \\ = -i [\delta\hat{\Delta}, \hat{\Lambda}^K] + i [\hat{\varphi}, \hat{\Lambda}^K] - D\hat{\Lambda}^K \nabla_{\mathbf{r}}^2 \delta\hat{Q}^A \end{aligned} \quad (17.45)$$

where $\delta\hat{\Delta}(\mathbf{r}, t) = \delta\Delta(\mathbf{r}, t)\hat{\tau}_+ - \delta\Delta^*(\mathbf{r}, t)\hat{\tau}_-$. It should be supplemented with the linearized self-consistency condition; see Eq. (17.16),

$$\delta\Delta = \frac{\pi\lambda}{2} \operatorname{Tr} \{ \hat{\tau}_- \delta\hat{Q}^K \} \quad (17.46)$$

and, for charged Cooper pairs, with the linearized Poisson equation; see Eq. (17.23),

$$(4\pi e^2)^{-1} \nabla_{\mathbf{r}}^2 \varphi = v\varphi + \frac{\pi v}{4} \operatorname{Tr} \{ \hat{\tau}_0 \delta\hat{Q}^K \}. \quad (17.47)$$

To solve the linearized Keldysh Usadel equation, one needs to find first the advanced component $\hat{Q}^A = \hat{\Lambda}^A + \delta\hat{Q}^A$ of the $\hat{Q}$ -matrix. Since the latter appears in Eq. (17.45) with the gradient square, one may omit gradient terms in the corresponding advanced component of the Usadel equation. (We are seeking for the lowest nonvanishing term in $D\mathbf{q}^2$.) It thus takes the form (cf. Eq. (17.12))

$$i [\epsilon\hat{\tau}_3, \delta\hat{Q}^A] + i [\hat{\Delta}, \delta\hat{Q}^A] = -i [\delta\hat{\Delta}, \hat{\Lambda}^A] + i [\hat{\varphi}, \hat{\Lambda}^A]. \quad (17.48)$$

One may distinguish between the longitudinal and transverse variations of the order parameter. The former changes the amplitude of the order parameter $\delta\Delta^L = \delta|\Delta|$, while the latter changes its phase $\delta\Delta^T = |\Delta|\delta\theta$. Here $\delta\Delta^{L(T)}(\mathbf{r}, t)$ are two real functions in space and time. In the adopted convention where $\hat{\Delta} = i\hat{\tau}_2\Delta$, the matrix forms of the corresponding variations are $\delta\hat{\Delta}^L = i\hat{\tau}_2\delta\Delta^L(\mathbf{r}, t)$, while $\delta\hat{\Delta}^T = i\hat{\tau}_1\delta\Delta^T(\mathbf{r}, t)$. Since the self-consistency relation (17.17)

fixes the modulus of the order parameter, one expects (and indeed finds) that the mode of the longitudinal fluctuations has a gap. The corresponding gap turns out to be $2|\Delta|$. On the other hand, the phase θ of the order parameter is not fixed by the self-consistency equation. As a result, the corresponding transversal mode may appear to be gapless. Yet, in the charged system, gradients of the phase are associated with charged supercurrents, which lead to a charge buildup and thus cost the Coulomb energy. As a result, at $T = 0$ the corresponding mode acquires a plasmon gap; see Chapter 7. The situation is more interesting at $T \lesssim T_c$, where $\Delta \ll T$. In this case there is a substantial thermal population of quasiparticle states. As a result, the induced supercurrents may be counterbalanced by the normal currents of the thermally excited quasiparticles, allowing for charge neutrality to be preserved. This leads to the gapless Carlson-Goldman [386] collective mode, which we consider in what follows.⁵

As a warmup exercise we consider a neutral superconductor, that is, $\varphi = 0$, where the transverse mode is expected to be gapless at all temperatures. If the order parameter variations are restricted to the transverse form, that is, $\delta\hat{\Delta} = i\hat{\tau}_1\delta\Delta^T(\mathbf{r}, t)$, one may seek for a solution of the advanced equation (17.48) in the following form:

$$\delta\hat{Q}_{\epsilon\epsilon'}^A(\mathbf{r}) = \hat{\tau}_0 r_{\epsilon\epsilon'}^A(\mathbf{r}) + \hat{\tau}_1 s_{\epsilon\epsilon'}^A(\mathbf{r}) \quad (17.49)$$

We take into account that, $i[\epsilon\hat{\tau}_3, \hat{\tau}_1 s^A] = -\hat{\tau}_2\{\epsilon, s^A\}_+ = -\hat{\tau}_2(\epsilon + \epsilon')s_{\epsilon\epsilon'}^A$, along with the fact that $\Lambda_\epsilon^A = -\hat{\tau}_3 u_\epsilon^* - i\hat{\tau}_2 v_\epsilon^*$ and thus the right-hand side of Eq. (17.48) is $-i[\delta\hat{\Delta}, \hat{\Lambda}^A] = \delta\Delta_{\epsilon-\epsilon'}^T[i\hat{\tau}_2(u_\epsilon^* + u_{\epsilon'}^*) + \hat{\tau}_3(v_\epsilon^* + v_{\epsilon'}^*)]$. Collecting coefficients in front of the $i\hat{\tau}_2$ and $\hat{\tau}_3$ Nambu matrices, one obtains two linear algebraic equations for $s_{\epsilon\epsilon'}^A$ and $r_{\epsilon\epsilon'}^A$:

$$\begin{aligned} i(\epsilon + \epsilon')s_{\epsilon\epsilon'}^A &= \delta\Delta_\omega^T(u_\epsilon^* + u_{\epsilon'}^*); \\ i(\epsilon - \epsilon')r_{\epsilon\epsilon'}^A + 2i\Delta s_{\epsilon\epsilon'}^A &= \delta\Delta_\omega^T(v_\epsilon^* + v_{\epsilon'}^*), \end{aligned}$$

where $\omega = \epsilon - \epsilon'$. Their solution is

$$s_{\epsilon\epsilon'}^A = -i\delta\Delta_\omega^T \frac{u_\epsilon^* + u_{\epsilon'}^*}{\epsilon + \epsilon'}; \quad r_{\epsilon\epsilon'}^A = i\delta\Delta_\omega^T \frac{v_\epsilon^* - v_{\epsilon'}^*}{\epsilon + \epsilon'} \quad (17.50)$$

where we used that $\epsilon v_\epsilon^* = \Delta u_\epsilon^*$ (cf. Eq. (17.15)).⁶ Having found $\delta\hat{Q}^A$, we turn now to the Keldysh Usadel component (17.45). Its solution may be sought for in the same form as (17.49) with $s_{\epsilon\epsilon'}^A, r_{\epsilon\epsilon'}^A \rightarrow s_{\epsilon\epsilon'}^K, r_{\epsilon\epsilon'}^K$. Substituting it in Eq. (17.45) and taking into account that, due to FDT, $\Lambda_\epsilon^K = F_\epsilon^{\text{eq}}(\Lambda_\epsilon^R - \Lambda_\epsilon^A) = F_\epsilon^{\text{eq}}[\hat{\tau}_3(u_\epsilon + u_\epsilon^*) + i\hat{\tau}_2(v_\epsilon + v_\epsilon^*)]$, one obtains two linear equations for $s_{\epsilon\epsilon'}^K$ and $r_{\epsilon\epsilon'}^K$:

$$\begin{aligned} [D\mathbf{q}^2 u_\epsilon - i(\epsilon + \epsilon')]s_{\epsilon\epsilon'}^K + D\mathbf{q}^2 v_\epsilon r_{\epsilon\epsilon'}^K &= \delta\Delta_\omega^T[F_\epsilon^{\text{eq}}(u_\epsilon + u_\epsilon^*) + F_{\epsilon'}^{\text{eq}}(u_{\epsilon'} + u_{\epsilon'}^*)] \\ &\quad - D\mathbf{q}^2 F_\epsilon^{\text{eq}}[(u_\epsilon + u_\epsilon^*)s_{\epsilon\epsilon'}^A + (v_\epsilon + v_\epsilon^*)r_{\epsilon\epsilon'}^A] \\ [D\mathbf{q}^2 v_\epsilon - 2i\Delta]s_{\epsilon\epsilon'}^K + [D\mathbf{q}^2 u_\epsilon - i(\epsilon - \epsilon')]r_{\epsilon\epsilon'}^K \\ &= \delta\Delta_\omega^T[F_\epsilon^{\text{eq}}(v_\epsilon + v_\epsilon^*) + F_{\epsilon'}^{\text{eq}}(v_{\epsilon'} + v_{\epsilon'}^*)] - D\mathbf{q}^2 F_\epsilon^{\text{eq}}[(u_\epsilon + u_\epsilon^*)r_{\epsilon\epsilon'}^A + (v_\epsilon + v_\epsilon^*)s_{\epsilon\epsilon'}^A] \end{aligned}$$

Notice that only the $s_{\epsilon\epsilon'}^K$ component enters the self-consistency condition (17.46). (The $r_{\epsilon\epsilon'}^K$ component enters the Poisson equation (17.47) and is necessary for the consideration of charged superconductors.) It is convenient to solve this system by first excluding the spatial gradients. One then finds for $r_{\epsilon\epsilon'}^K$

$$r_{\epsilon\epsilon'}^K(\mathbf{q}) = -\frac{i\delta\Delta_\omega^T(\mathbf{q})}{\epsilon + \epsilon'} [F_\epsilon^{\text{eq}}(v_\epsilon + v_\epsilon^*) - F_{\epsilon'}^{\text{eq}}(v_{\epsilon'} + v_{\epsilon'}^*)] \quad (17.51)$$

⁵ At the NS interface the neutralizing normal current flows in the N region and thus is spatially separated from the superconductor. As a result the gapless (phason) mode exists even at $T = 0$, [387].

Keeping now the terms to first order in $D\mathbf{q}^2$, one can solve for $s_{\epsilon\epsilon'}^K(\mathbf{q})$ and find

$$s_{\epsilon\epsilon'}^K(\mathbf{q}) = \frac{i\delta\Delta_\omega^T(\mathbf{q})}{\epsilon + \epsilon'} \left[F_\epsilon^{\text{eq}}(u_\epsilon + u_\epsilon^*) + F_{\epsilon'}^{\text{eq}}(u_{\epsilon'} + u_{\epsilon'}^*) + \frac{iD\mathbf{q}^2}{\epsilon + \epsilon'} \right. \\ \left. \times \{F_\epsilon^{\text{eq}}(u_\epsilon + u_\epsilon^*)u_{\epsilon'}^* - F_{\epsilon'}^{\text{eq}}(u_{\epsilon'} + u_{\epsilon'}^*)u_\epsilon + F_\epsilon^{\text{eq}}(v_\epsilon + v_\epsilon^*)v_{\epsilon'}^* - F_{\epsilon'}^{\text{eq}}(v_{\epsilon'} + v_{\epsilon'}^*)v_\epsilon\} \right] \quad (17.52)$$

where we used $u_\epsilon^2 - v_\epsilon^2 = (u_\epsilon^*)^2 - (v_\epsilon^*)^2 = 1$.

Finally, one substitutes $\delta\hat{Q}_{\epsilon\epsilon'}^K = \hat{\tau}_0 r_{\epsilon\epsilon'}^K + \hat{\tau}_1 s_{\epsilon\epsilon'}^K$ into the self-consistency condition (17.46). The latter takes the form $i\delta\Delta_\omega^T = (\lambda/4) \int d\epsilon s_{\epsilon, \epsilon-\omega}^K$. Since both parts of this relation are $\sim \delta\Delta_\omega^T(\mathbf{q})$, its compatibility dictates the dispersion relation $\omega(\mathbf{q})$ of the collective oscillation mode. Putting first $\mathbf{q} = 0$ and $\omega = 0$ (i.e. $\epsilon = \epsilon'$) in Eq. (17.52) and comparing it with Eq. (17.17), one observes that the self-consistency relation is satisfied identically. This is a manifestation of the fact that a static, spatially uniform variation of the phase $\delta\theta = \delta\Delta^T/\Delta$ of the order parameter is consistent with the gap equation (17.17). The remaining finite-frequency and finite-wavenumber part of the self-consistency relation takes the form

$$[\omega^2 a(\omega) - D\mathbf{q}^2 b(\omega)] \delta\Delta_\omega^T(\mathbf{q}) = 0 \quad (17.53)$$

where $\omega^2 a(\omega)$ is the ϵ -integral of the first line in Eq. (17.52) with the subtracted static part

$$a(\omega) = \frac{1}{\omega^2} \int_\Delta^\infty \frac{d\epsilon F_\epsilon^{\text{eq}} \epsilon}{\sqrt{\epsilon^2 - \Delta^2}} \left[\frac{1}{2\epsilon - \omega} + \frac{1}{2\epsilon + \omega} - \frac{1}{\epsilon} \right] = \int_\Delta^\infty d\epsilon \frac{\tanh \epsilon/2T}{\sqrt{\epsilon^2 - \Delta^2}} \frac{1}{4\epsilon^2 - \omega^2} \quad (17.54)$$

and $-D\mathbf{q}^2 b(\omega)$ is the ϵ -integral of the second line in Eq. (17.52). This latter integral requires some care. In particular, one should pay attention to the interval $\Delta < \epsilon < \Delta + \omega$, where $(u_{\epsilon'} + u_{\epsilon'}^*)u_\epsilon = 0$ (remember $\epsilon' = \epsilon - \omega$), but $(u_\epsilon + u_\epsilon^*)u_{\epsilon'}^* = 2i\epsilon\epsilon'/(\sqrt{\epsilon^2 - \Delta^2}\sqrt{\Delta^2 - \epsilon'^2})$ is pure imaginary! In the same way $(v_{\epsilon'} + v_{\epsilon'}^*)v_\epsilon = 0$, while $(v_\epsilon + v_\epsilon^*)v_{\epsilon'}^* = 2i\Delta^2/(\sqrt{\epsilon^2 - \Delta^2}\sqrt{\Delta^2 - \epsilon'^2})$ is pure imaginary. This interval (and similarly $-\Delta < \epsilon < -\Delta + \omega$) provides thus a real part to $b(\omega)$ (together with an imaginary i in front of $D\mathbf{q}^2$ in Eq. (17.52)). In the limit of small frequency $\omega \ll 2\Delta$ one finds

$$\text{Re } b(0) = \frac{1}{2} \int_\Delta^{\Delta+\omega} d\epsilon \frac{F_\epsilon^{\text{eq}}}{4\epsilon^2} \frac{2\epsilon^2 + 2\Delta^2}{\sqrt{\epsilon^2 - \Delta^2}\sqrt{\Delta^2 - (\epsilon - \omega)^2}} \approx \frac{F_\Delta^{\text{eq}}}{4\Delta} \int_\Delta^{\Delta+\omega} \frac{d\epsilon}{\sqrt{\epsilon - \Delta}\sqrt{\Delta + \omega - \epsilon}} \quad (17.55)$$

The amazing observation is that, despite being restricted to the interval of length ω , the last integral is simply equal to π . As a result, one finds that $\text{Re } b(0) = (\pi/4\Delta) \times \tanh(\Delta/2T)$. Notice that if we worked in the Wigner transformed representation, this part of the integral would be missing. Instead, one is left with ϵ -integrals that are divergent at $|\epsilon| = \Delta$. Such inapplicability of the Wigner transformation is due to the singular nature of the density of states. It may be mitigated by magnetic impurities or by taking $T > T_c$. Contribution to $b(\omega)$ from the outside of the interval $\Delta < \epsilon < \Delta + \omega$ is imaginary and is given by

$$\text{Im } b(0) = -\frac{1}{2} \int_{\Delta+\omega}^\infty d\epsilon \frac{F_\epsilon^{\text{eq}} - F_{\epsilon-\omega}^{\text{eq}}}{4\epsilon^2} \frac{2\epsilon^2 + 2\Delta^2}{\sqrt{\epsilon^2 - \Delta^2}\sqrt{(\epsilon - \omega)^2 - \Delta^2}} \quad (17.56)$$

One may evaluate now $a(0)$ and $\text{Im } b(0)$ in the two limiting cases: (i) $T = 0$ where $F_\epsilon^{\text{eq}} = \text{sign } \epsilon$ and (ii) $T_c - T \ll T_c$ where $\Delta(T) \ll T$ and thus in the significant region of energy $F_\epsilon^{\text{eq}} \approx \epsilon/2T$.

⁰⁶ It is instructive to verify that $\hat{\Lambda}_\epsilon^A \delta\hat{Q}_{\epsilon\epsilon'}^A + \delta\hat{Q}_{\epsilon\epsilon'}^A \hat{\Lambda}_{\epsilon'}^A = 0$ and therefore the nonlinear constraint $(\hat{Q}^A)^2 = \hat{1}$, Eq. (17.11), is satisfied to linear order in $\delta\Delta^T$.

For $T = 0$ one finds $a(0) = 1/4\Delta^2$, while $\text{Im } b(0) = 0$ and $\text{Re } b(0) \approx \pi/4\Delta$. Employing Eq. (17.53), one finds the acoustic mode with the dispersion relation [388]

$$\omega = \omega_B(\mathbf{q}) = \sqrt{\pi\Delta(0)D}q. \quad (17.57)$$

This is essentially the Bogoliubov mode of neutral superfluid discussed in Chapter 8. At $T = 0$ there are no thermally excited quasiparticles and thus no Landau damping of the collective mode. For a finite $T \ll \Delta$ one finds $\text{Im } b(0) \sim -\omega e^{-\Delta/T}$ and thus the Landau damping is exponentially suppressed. The speed of sound appears to be dependent on both the diffusion constant and the amplitude of the order parameter $c = \sqrt{\pi\Delta(0)D}$.

For $T_c - T \ll T_c$ one finds $a(0) = \pi/16T\Delta$ and $\text{Im } b(0) = -(\omega/8T\Delta) \ln(\Delta/\omega)$, where the logarithmic factor originates due to the near divergence of the integral in Eq. (17.56) at the lower boundary. Taking into account that in this limit $\text{Re } b(0) \approx \pi/8T$, the collective mode dispersion is found as

$$\omega_B(\mathbf{q}) = \sqrt{2\Delta(T)D}q - i\frac{Dq^2}{2\pi} \ln \frac{\Delta}{Dq^2}. \quad (17.58)$$

As long as $Dq^2 \ll \Delta(T)$ the Landau damping is relatively ineffective and the mode is underdamped. In this limit one also finds $Dq^2 \ll \omega_B(\mathbf{q}) \ll \Delta$, which justifies the approximations made previously. Notice that the acoustic mode exists even in the disordered system, if, of course, the wavelength is greater than the mean free path $q \ll 1/l_{\text{el}}$. The latter condition is indeed fulfilled, since we work in the regime where $\Delta \ll 1/\tau_{\text{el}}$.

We turn now to the case of a superconductor with charged Cooper pairs (such as a metal). In this case one needs to involve the Poisson equation (17.47) along with the self-consistency relation and keep the scalar potential φ on the right-hand side of the linearized Usadel equations (17.45) and (17.48). One can still look for a solution of the Usadel equations in the form of a linear superposition of the $\hat{\tau}_0$ and $\hat{\tau}_1$ Pauli matrices in Nambu space; see Eq. (17.49). The corresponding coefficients $r_{\epsilon\epsilon'}^{\text{A(K)}}$ and $s_{\epsilon\epsilon'}^{\text{A(K)}}$ are now linear superpositions of terms proportional to $\delta\Delta_\omega^{\text{T}}(\mathbf{q})$ and $\varphi_\omega(\mathbf{q})$. For example,

$$s_{\epsilon\epsilon'}^{\text{K}} = \frac{i\delta\Delta_\omega^{\text{T}}}{\epsilon + \epsilon'} [F_\epsilon^{\text{eq}}(u_\epsilon + u_\epsilon^*) + (\epsilon \leftrightarrow \epsilon')] - \frac{\varphi_\omega}{\epsilon + \epsilon'} [F_\epsilon^{\text{eq}}(v_\epsilon + v_\epsilon^*) - (\epsilon \leftrightarrow \epsilon')] \quad (17.59a)$$

$$r_{\epsilon\epsilon'}^{\text{K}} = -\frac{\varphi_\omega}{\omega} [F_\epsilon^{\text{eq}}(u_\epsilon + u_\epsilon^*) - (\epsilon \leftrightarrow \epsilon')] - \frac{i\omega\delta\Delta_\omega^{\text{T}} - 2\Delta\varphi_\omega}{(\epsilon + \epsilon')\omega} [F_\epsilon^{\text{eq}}(v_\epsilon + v_\epsilon^*) - (\epsilon \leftrightarrow \epsilon')] \quad (17.59b)$$

where we have omitted gradient terms $\sim D\mathbf{q}^2$ for brevity. We now substitute these expressions into the self-consistency condition (17.46) and the Poisson equation (17.47), which acquire the form

$$i\delta\Delta_\omega^{\text{T}} = \frac{\pi\lambda}{2} \int \frac{d\epsilon}{2\pi} s_{\epsilon\epsilon-\omega}^{\text{K}}; \quad -\frac{\mathbf{q}^2}{4\pi e^2} \varphi_\omega = v\varphi_\omega + \frac{\pi v}{2} \int \frac{d\epsilon}{2\pi} r_{\epsilon\epsilon-\omega}^{\text{K}}. \quad (17.60)$$

Performing the energy integrations as explained previously, one finds two linear homogenous equations for $\delta\Delta_\omega^{\text{T}}$ and φ_ω , which may be written as follows [388]:

$$\left[\begin{pmatrix} \omega^2 & 2i\omega\Delta \\ -2i\omega\Delta & 4\Delta^2 \end{pmatrix} a(\omega) - \begin{pmatrix} D\mathbf{q}^2 b(\omega) & 0 \\ 0 & D\mathbf{q}^2 c(\omega) - \frac{\mathbf{q}^2}{4\pi e^2 \nu} \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} \delta\Delta_\omega^{\text{T}} \\ \varphi_\omega \end{pmatrix} = 0. \quad (17.61)$$

The (1,1) element here is the already familiar condition (17.53), which (in the absence of φ) leads to the dispersion relation of the Bogoliubov mode. The matrix in front of $a(\omega)$

follows from the energy integration of Eqs. (17.59). Notice that the integral of the first term on the right-hand side of Eq. (17.59b) exactly cancels the anomalous term $\nu\phi_\omega$ in the Poisson equation. The fact that the determinant of this matrix is zero means that at $\mathbf{q} = 0$ the physical observables depend only on the gauge-invariant combination, $i\omega\delta\Delta_\omega^T - 2\Delta\varphi_\omega \sim \partial_t\theta + 2\varphi$, see Eq. (17.59b), rather than on the phase of the order parameter θ and the scalar potential φ separately. The only ⁷ term here we haven't derived explicitly for the lack of space is $c(\omega)$. However, its limiting behavior at $T = 0$ and $T_c - T \ll T_c$ may be understood without any algebra. Indeed, since at $T = 0$ the electronic spectrum has a gap and there are no thermal quasiparticles above the gap, the system is incompressible and does not respond to the gradient of the scalar potential, that is,

$c(\omega) = 0$. The technical reason is the same which led to $\text{Im } b(0) = 0$ at $T = 0$; see Eq. (17.56). On the other hand, at $T_c - T \ll T_c$ there are plenty of excited quasiparticles well above the superconducting gap $\Delta(T)$. Their response to the scalar potential is basically the same as for normal metals. (Superconducting correlations bring only small corrections $\sim \Delta(T)/T \ll 1$.) One thus concludes that $-D\mathbf{q}^2 c(\omega) = D\mathbf{q}^2 / (D\mathbf{q}^2 - i\omega) \approx iD\mathbf{q}^2 / \omega$, see Eq. (14.60), and thus $c(\omega) \approx -i/\omega$.

We are prepared now to discuss collective modes of charged superconductors. Their dispersion relation is obtained from the requirement that the determinant of the matrix in Eq. (17.61) is zero. At $T = 0$ one has $a = 1/4\Delta^2$, $b = \pi/4\Delta$, and $c = 0$. Demanding a zero determinant, one finds, for example, as $\mathbf{q} \rightarrow 0$,

$$\omega(0) = \omega_p = \sqrt{4\pi^2 e^2 \nu \Delta(0) D} \quad (17.62)$$

This frequency may be called the superconducting plasmon frequency (see Section (7.2)), if one identifies $n_s = \pi\nu\Delta Dm$ as the density of superconducting electrons. The mode clearly has a gap, due to the Coulomb energy cost associated with the charge redistribution by supercurrents. This result is quantitatively applicable only if $\omega_p \ll 2\Delta(0)$, which requires a strongly disordered substance.

At T close to T_c there is a large population of quasiparticles, which allow charge neutrality to be maintained. We can thus work in the limit of $e^2 \rightarrow \infty$. Recalling that in this case $a = \pi/16T\Delta$, $b = [1 - i(\omega/\pi\Delta)\ln(\Delta/\omega)]\pi/8T$, and $c = -i/\omega$, one finds from the condition of the vanishing determinant

$$\omega^2 - \left[2\Delta D\mathbf{q}^2 - i\frac{\pi\Delta^2\omega}{2T} \right] \left(1 - i\frac{\omega}{\pi\Delta} \ln \frac{\Delta}{\omega} \right) = 0 \quad (17.63)$$

Assuming for a moment that both imaginary terms are relatively small, one finds for the dispersion relation of the collective mode, first observed by Carlson and Goldman (CG) [386],

$$\omega_{\text{CG}}(\mathbf{q}) = \sqrt{2\Delta(T)Dq} - i\frac{\pi\Delta^2(T)}{4T} - i\frac{Dq^2}{2\pi} \ln \frac{\Delta(T)}{Dq^2} \quad (17.64)$$

The two imaginary terms here have very different natures. The last one is the Landau damping due to excitation of thermal quasiparticles, already discussed in the context of the Bogoliubov mode (17.58). It makes the CG mode overdamped for $\omega \gtrsim \Delta(T)$. The first one originates from the product of the $D\mathbf{q}^2 b(\omega)$ and $4\Delta^2 a(\omega)$ terms of the matrix (17.61). The former describes spatial variations of the order parameter $\delta\Delta^T$, while the latter is responsible for the quasiparticle number nonconservation in the presence of Δ . Such a nonconservation may be interpreted as the Andreev reflection processes, which convert quasiparticles into quasiholes and back. The corresponding damping term is therefore associated with the Andreev reflection

⁰⁷ The off-diagonal terms in the last matrix in Eq. (17.61) are small in the parameter $D\mathbf{q}^2/\omega$ and thus omitted.

of quasiparticles on the spatial fluctuations of the order parameter. It makes the CG mode overdamped for $\omega \lesssim \Delta^2(T)/T$. In between the Andreev and Landau damped regimes, for $\Delta^2(T)/T \lesssim \omega \lesssim \Delta(T)$, there is a propagating acoustic mode $\omega_{\text{CG}}(\mathbf{q}) = cq$, where the speed of sound

$$c = \sqrt{2\Delta(T)D} \quad (17.65)$$

coincides with the speed of the Bogoliubov mode (17.58). This result was first obtained by Schmid and Schön [389]. For clean superconductors with $T_c\tau_{\text{el}} \gg 1$ the corresponding velocity is given by $c \propto v_F \sqrt{\Delta(T)/T}$, [390]. It is clear that the propagating mode may exist only at a temperature very close to T_c , where $\Delta(T) \ll T$.

For the transverse fluctuations of the order parameter $\delta\hat{\Delta} \sim i\hat{\tau}_1$ we were able to find a solution of the Usadel equation for $\delta\hat{Q}^K$ as a superposition of the $\hat{\tau}_0$ and $\hat{\tau}_1$ matrices. The corresponding deviation of the distribution matrix $\hat{F}$, Eq. (17.21), is therefore restricted to the $\hat{\tau}_3$ direction, $\delta\hat{F} \sim \hat{\tau}_3$.⁸ This is the reason the corresponding (even in energy) component $F_T(\mathbf{r}, \epsilon)$ is called the transverse distribution. For the longitudinal variations of the order parameter $\delta\hat{\Delta} \sim i\hat{\tau}_2$, the Usadel equation is solved by a linear superposition of the $\hat{\tau}_2$ and $\hat{\tau}_3$ matrices. The corresponding mode, known as the Schmid or longitudinal one, may be derived in exactly the same way as the Bogoliubov mode. It appears to have a gap $\omega_L(0) = 2\Delta$. The corresponding deviation of the distribution matrix $\hat{F}$, Eq. (17.21), is restricted to the $\hat{\tau}_0$ direction, $\delta\hat{F} \sim \hat{\tau}_0$, allowing us to identify the odd in energy part $F_L(\mathbf{r}, \epsilon)$ as the longitudinal one.

13.5.6 17.6 Time-Dependent Ginzburg-Landau Theory

As we saw in Section 17.5, solution of the Usadel equation at $T < T_c$ requires careful account of the coherence factors u_ϵ and v_ϵ . The latter carry information about the singular BCS density of states, which is crucial for the derivation of the transverse (Goldstone) mode; see the discussion after Eq. (17.55). This difficulty is not there for $T > T_c$, or in the presence of magnetic impurities, which allow for superconductivity without the gap in the density of states. In these cases one may considerably simplify the theory by explicitly integrating out the fermionic $\tilde{Q}$ -matrix degrees of freedom. This may be achieved in the Gaussian approximation, which accounts for the diffusive nature of electron motion in metals, but disregards localization effects. As a result of this procedure one obtains the theory of coupled bosonic fields $\Delta(\mathbf{r}, t)$ and $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$, known as the time-dependent Ginzburg-Landau (TDGL) equation.

We shall restrict ourselves to the $T > T_c$ situation, where the order parameter field $\Delta(\mathbf{r}, t)$ does not have a nontrivial expectation value. Yet it exhibits thermal

fluctuations that manifest themselves in the singular behavior of various observables at $T \rightarrow T_c$. While TDGL is suitable for treating non-equilibrium dynamics of the order parameter field, it is based on the assumption that the underlying electronic degrees of freedom (encoded in the $\tilde{Q}$ -matrix) are in a state of local thermal equilibrium. This is possible due to scale separation between slow and long wavelength fields $\Delta(\mathbf{r}, t), \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ and the relatively fast electronic $\tilde{Q}$ -matrix field. Indeed, the latter is governed by electron-electron or electron-phonon relaxation times, which are finite at $T \gtrsim T_c$. On the other hand, the dynamics of the former is associated with the Ginzburg-Landau time $\tau_{\text{GL}} \propto (T - T_c)^{-1}$ and the coherence (or correlation) length $\xi \propto \sqrt{D\tau_{\text{GL}}}$, divergent as $T \rightarrow T_c$.

The program of integrating out the Gaussian $\tilde{Q}$ -matrix fluctuations is greatly simplified by the choice of a convenient gauge [391]. Here we employ the gauge invariance of the theory, which manifests itself in the invariance of the action (17.7) with respect to the following set of transformations (cf. Eqs. (16.1) and (16.2)):

⁸ Indeed, $\delta\hat{Q}^K \sim \Lambda^R \delta\hat{F} - \delta\hat{F} \Lambda^A$. Since $\Lambda^{R(A)}$ has only $\hat{\tau}_3$ and $\hat{\tau}_2$ components, $\delta\hat{F}$ must be restricted to $\hat{\tau}_3$ components only.

$$\begin{aligned}\check{Q}_{\mathcal{K},tt'}(\mathbf{r}) &= e^{-i\check{\mathcal{K}}(\mathbf{r},t)}\check{Q}_{tt'}(\mathbf{r})e^{i\check{\mathcal{K}}(\mathbf{r},t')}; & \check{\Delta}_{\mathcal{K}}(\mathbf{r},t) &= e^{-i\check{\mathcal{K}}(\mathbf{r},t)}\check{\Delta}(\mathbf{r},t)e^{i\check{\mathcal{K}}(\mathbf{r},t)}; \\ \check{\varphi}_{\mathcal{K}}(\mathbf{r},t) &= \check{\varphi}(\mathbf{r},t) + \check{\mathcal{T}}_3\partial_t\check{\mathcal{K}}(\mathbf{r},t); & \check{\mathbf{A}}_{\mathcal{K}}(\mathbf{r},t) &= \check{\mathbf{A}}(\mathbf{r},t) + \nabla_{\mathbf{r}}\check{\mathcal{K}}(\mathbf{r},t),\end{aligned}\quad (17.66)$$

where $\check{\mathcal{K}} = \mathcal{K}^\alpha \hat{\gamma}^\alpha \otimes \hat{\tau}_3$ is a matrix in $K \otimes N$ space, characterized by two scalar fields $\mathcal{K}^{\text{cl},q}(\mathbf{r}, t)$. It is convenient to choose them such that the gauge transformed electromagnetic potentials $\varphi_{\mathcal{K}}^\alpha$ and $\mathbf{A}_{\mathcal{K}}^\alpha$ satisfy the $\mathcal{K}$ -gauge condition (16.5). (The explicit form of the corresponding gauge fields $\mathcal{K}^\alpha$ is given by Eq. (16.7) with $V \rightarrow \varphi$.) As explained in Section 16.1, the advantage of the $\mathcal{K}$ -gauge is that (in equilibrium) the action does not contain terms linear in the electromagnetic potentials and deviations of the $\check{Q}_{\mathcal{K}}$ -matrix from the metallic saddle point $\check{\Lambda} = \hat{\Lambda} \otimes \hat{\tau}_3$, where $\hat{\Lambda}_\epsilon$ is given by Eq. (14.25).

Following Eqs. (14.37)-(14.39), it is convenient to parametrize the $\check{Q}_{\mathcal{K}}$ -matrix manifold specified by the nonlinear constraint $\check{Q}_{\mathcal{K}}^2 = \check{1}$, as [372, 391]

$$\check{Q}_{\mathcal{K}} = \check{\mathcal{U}}^{-1} \circ e^{-\mathcal{W}/2} \circ (\hat{\sigma}_3 \otimes \hat{\tau}_3) \circ e^{\check{\mathcal{W}}/2} \circ \check{\mathcal{U}}, \quad (17.67)$$

with the following choice of rotation generators:⁹

$$\check{\mathcal{W}}_{tt'}(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} c_{tt'}(\mathbf{r})\hat{\tau}_+ - c_{tt'}^*(\mathbf{r})\hat{\tau}_- & d_{tt'}^{\text{cl}}(\mathbf{r})\hat{\tau}_0 + \tilde{d}_{tt'}^{\text{cl}}(\mathbf{r})\hat{\tau}_3 \\ d_{tt'}^{\text{q}}(\mathbf{r})\hat{\tau}_0 + \tilde{d}_{tt'}^{\text{q}}(\mathbf{r})\hat{\tau}_3 & \tilde{c}_{tt'}(\mathbf{r})\hat{\tau}_+ - \tilde{c}_{tt'}^*(\mathbf{r})\hat{\tau}_- \end{pmatrix}_{\text{K}}, \quad \hat{\mathcal{U}} = \hat{\mathcal{U}} \otimes \hat{\tau}_0. \quad (17.68)$$

As compared with Eq. (14.39), $\check{\mathcal{W}}$ contains twice as many diffuson modes, which are described by four Hermitian matrices in time space: $\{d^{\text{cl}}, \tilde{d}^{\text{cl}}\}$, representing fluctuations of the longitudinal and transversal components of the distribution matrix (17.21), respectively, and their quantum counterparts $\{d^{\text{q}}, \tilde{d}^{\text{q}}\}$. It also contains the Cooperon modes described by two independent complex matrix fields $\{c, \tilde{c}\}$. The Nambu structure of the components of the Keldysh matrix (17.68) is chosen in a way to assure anticommutativity $\{(\hat{\sigma}_3 \otimes \hat{\tau}_3), \check{\mathcal{W}}\}_+ = 0$. One expands now the action (17.7) in powers of the $\check{\mathcal{W}}$ fluctuations and performs a Gaussian integration over the set of independent diffuson and Cooperon modes $\{d^\alpha, \tilde{d}^\alpha, c, \tilde{c}\}$. Some details of this procedure are discussed toward the end of this section. As a result of it one finds

$$\int \mathbf{D} [\check{Q}_{\mathcal{K}}] e^{iS[\check{Q}_{\mathcal{K}}, \Delta_{\mathcal{K}}, \mathbf{A}_{\mathcal{K}}]} = e^{iS_{\text{eff}}[\Delta_{\mathcal{K}}, \mathbf{A}_{\mathcal{K}}]} \quad (17.69)$$

where the effective bosonic action consists of three contributions,

$$S_{\text{eff}} = S_{\text{GL}} + S_{\text{S}} + S_{\text{N}} \quad (17.70)$$

with the subscripts denoting Ginzburg-Landau (GL), the supercurrent (S), and the normal current (N) parts, respectively. We now discuss them one by one.

The time-dependent Ginzburg-Landau part of the action $S_{\text{GL}}[\Delta_{\mathcal{K}}, \mathbf{A}_{\mathcal{K}}]$ originates from pairing two $\check{\mathcal{W}}_{\mathcal{K}}$ vertices, Fig. 17.2(a), as well as from pairing them with the $\check{\mathcal{W}}\check{\mathcal{A}}_{\mathcal{K}}\check{\mathcal{W}}$ and $\check{\mathcal{W}}\check{\mathcal{A}}_{\mathcal{K}}\check{\mathcal{W}}\check{\mathcal{A}}_{\mathcal{K}}$ vertices; see the derivation that follows. This leads to¹⁰

$$S_{\text{GL}} = 2\nu \text{Tr} \left\{ \vec{\Delta}_{\mathcal{K}}^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{L}^{-1} \vec{\Delta}_{\mathcal{K}}(\mathbf{r}, t) \right\}, \quad (17.71)$$

⁹ Notice that the structure is somewhat different from the weak-localization Cooper channel parametrizations (14.66) and (14.67), which may be traced back to the fact that in that case the saddle point is $\check{\Lambda} = \text{diag} \{ \hat{\Lambda}, \hat{\Lambda}^T \}_{\text{TR}}$, while in the present case it is $\check{\Lambda} = \hat{\Lambda} \otimes \hat{\tau}_3$, where $\hat{\tau}_3$ operates in the Nambu space N . The difference is due to the presence of the symplectic symmetry (14.64) in the time-reversal space TR, but not in the Nambu space.

where $\vec{\Delta}_{\mathcal{K}} = (\Delta_{\mathcal{K}}^{\text{cl}}, \Delta_{\mathcal{K}}^{\text{q}})^{\text{T}}$. The matrix $\hat{L}^{-1}$ has the typical bosonic causality structure in Keldysh space,

$$\hat{L}^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & (L^{-1})^{\text{A}} \\ (L^{-1})^{\text{R}} & (L^{-1})^{\text{K}} \end{pmatrix}_{\text{K}} \quad (17.72)$$

with components given by ¹¹

$$(L^{-1})^{\text{R(A)}} = \frac{\pi}{8T} \left[\mp \partial_t + D (\nabla_{\mathbf{r}} + 2ie\mathbf{A}_{\mathcal{K}}^{\text{cl}})^2 - \tau_{\text{GL}}^{-1} - \frac{7\zeta(3)}{\pi^3 T_c} |\Delta_{\mathcal{K}}^{\text{cl}}|^2 \right], \quad (17.73a)$$

¹⁰ The nonlinear term $\sim \Delta_{\mathcal{K}}^{\text{q}} \Delta_{\mathcal{K}}^{\text{cl}} |\Delta_{\mathcal{K}}^{\text{cl}}|^2$ originates from expanding the term $\check{Q}_{\mathcal{K}} \check{\Delta}_{\mathcal{K}}$ to third order in $\check{W}$ and pairing it with the three vertices $\mathcal{W}_{\mathcal{L}\mathcal{K}}$ [391].

¹¹ It is instructive to compare the GL action with the Gross-Pitaevskii one, Eq. (8.15). While the latter describes inertial dissipationless dynamics, the former prescribes the diffusive relaxation. The inertial dynamics and the corresponding acoustic mode are only partially recovered at $T < T_c$, thanks to the singular nature of the BCS density of states (DOS), Section 17.5. The difference may be traced back to the fact that the superconducting order parameter Δ interacts with the quasiparticles having a finite DOS, ν , at $T > T_c$. On the other hand, the Bose-Einstein condensate Φ_0 interacts with the quasiparticles whose DOS goes to zero at small energy (e.g. as ϵ^2 in 3d).

$$(L^{-1})^{\text{K}} = B_{\omega} \left[(L^{-1})^{\text{R}}(\omega) - (L^{-1})^{\text{A}}(\omega) \right] \approx \frac{i\pi}{2} \quad (17.73b)$$

where in equilibrium $B_{\omega} = \coth \omega/2T$ and we used $\omega \ll T \approx T_c$. The Ginzburg-Landau relaxation time is defined as $\tau_{\text{GL}} = \pi/8(T - T_c)$. Comparing the action (17.71)-(17.73) with Eq. (9.5), one notices that it describes the classical secondorder phase transition with the complex nonconservative order parameter (in the absence of the electromagnetic fields). In the Hohenberg-Halperin classification, Section 9.5, it belongs to the model A class. The corresponding Landau free energy (9.2) is given by

$$\mathcal{F}_{\text{GL}}[\Delta, \mathbf{A}] = \frac{\pi v}{8T} \int d\mathbf{r} \left[D |\partial_{\mathbf{r}} \Delta|^2 + \tau_{\text{GL}}^{-1} |\Delta|^2 + \frac{g}{2} |\Delta|^4 \right] \quad (17.74)$$

with the critical parameter $\tau_{\text{GL}}^{-1} \propto T - T_c$ and nonlinearity $g = 7\zeta(3)/\pi^3 T_c$. The complex order parameter field Δ happens to be charged with the charge $2e$ and therefore interacts with the vector potential through the covariant derivative $\nabla_{\mathbf{r}} \rightarrow \partial_{\mathbf{r}} = \nabla_{\mathbf{r}} + 2ie\mathbf{A}$. The useful feature of the $\mathcal{K}$ -gauge is the absence of interactions with the scalar electromagnetic potential (i.e. the time derivative does not acquire the covariant form in this specific gauge). The vector potential dynamics is governed by the usual Maxwell equations. The media provides the right-hand side of the Maxwell equations, which follow from the two additional terms in the effective action (17.70): $S_{\text{S}} + S_{\text{N}}$.

The supercurrent part of the action $S_{\text{S}}[\Delta_{\mathcal{K}}, \mathbf{A}_{\mathcal{K}}]$ originates from the diagrams of Fig. 17.2 (c),(d). It is given by ¹²

$$S_{\text{S}} = -\frac{\pi e v D}{T} \text{Tr} \left\{ \mathbf{A}_{\mathcal{K}}^{\text{q}} \text{Im} \left[\Delta_{\mathcal{K}}^{\text{cl}} (\nabla_{\mathbf{r}} + 2ie\mathbf{A}_{\mathcal{K}}^{\text{cl}}) \Delta_{\mathcal{K}}^{\text{cl}} \right] \right\} \quad (17.75)$$

Being differentiated with respect to $\mathbf{A}^{\text{q}}$, it provides an expression for the supercurrent that coincides with the conventional Ginzburg-Landau definition [375]: $\mathbf{J}_{\text{S}} = -\delta S_{\text{S}}/2\delta \mathbf{A}_{\mathcal{K}}^{\text{q}} = \delta \mathcal{F}_{\text{GL}}/\delta \mathbf{A}$, Eq. (17.74).

The main part of the normal action $S_{\text{N}}[\Delta_{\mathcal{K}}, \mathbf{A}_{\mathcal{K}}]$ is obtained by substituting the normal metal values $\check{Q}_{\mathcal{K}} = \check{\Lambda}$ and $\check{\Delta}_{\mathcal{K}} = 0$ into the action $S[\check{Q}_{\mathcal{K}}, \Delta_{\mathcal{K}}, \mathbf{A}_{\mathcal{K}}, \varphi_{\mathcal{K}}]$, Eq. (17.7). The calculation is virtually identical to the one leading to Eq. (16.17), but this time we choose to

express the result through the vector potential instead of the scalar one. (The two are related through the $\mathcal{K}$ -gauge condition (16.5).) This way, one finds

$$S_N = e^2 \nu D \text{Tr} \left\{ \vec{\mathbf{A}}_{\mathcal{K}}^T \left(\begin{array}{cc} 0 & D \nabla_{\mathbf{r}}^2 + \partial_t \\ D \nabla_{\mathbf{r}}^2 - \partial_t & 4iT \end{array} \right)_{\mathcal{K}} \vec{\mathbf{A}}_{\mathcal{K}} \right\}, \quad (17.76)$$

(????)

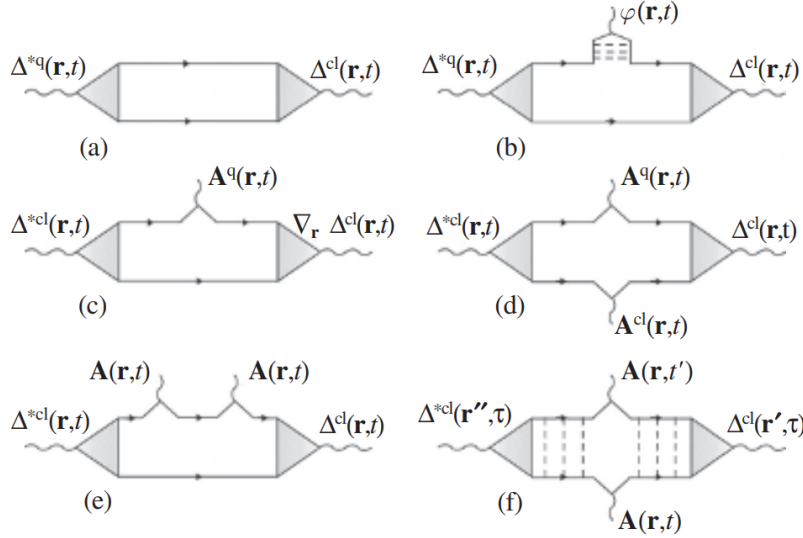


Figure 17.2 Diagrammatic representation of the effective action S_{eff} . (a) Ginzburg-Landau part S_{GL} , Eq. (17.71). (b) Anomalous Gor'kov-Eliashberg coupling of the scalar potential with the order parameter (see Eq. (17.83) and discussions in what follows). (c) Paramagnetic and (d) diamagnetic parts of the supercurrent action S_S . (e) DOS and (f) Maki-Thompson corrections to the normal current action S_N . In the case of diagrams (e) and (f) there are two possible choices for the vector potentials: classical-quantum, which is a part of the current, and quantum-quantum, which is its FDT counterpart, where $\vec{\mathbf{A}}_{\mathcal{K}} = (\mathbf{A}_{\mathcal{K}}^{cl}, \mathbf{A}_{\mathcal{K}}^q)^T$. As we shall see, S_N describes the normal dissipative current, as well as the corresponding FDT-related Johnson-Nyquist noise; see Eq. (13.17). The superconducting fluctuations lead to the renormalization of the density of states ν and the diffusion coefficient D in Eq. (17.76) by terms proportional to $|\Delta_{\mathcal{K}}^{cl}|^2$. They are known as density of states (DOS) [392] and Maki-Thompson (MT) [393] corrections, respectively, Fig. 17.2(e), (f). For example, the DOS correction calls for the renormalization $\nu \rightarrow \nu + \delta\nu(\mathbf{r}, t)$, where $\delta\nu(\mathbf{r}, t) = -\nu(7\zeta(3)/4\pi^2) |\Delta_{\mathcal{K}}^{cl}(\mathbf{r}, t)|^2/T^2$. For detailed discussion of the corresponding parts of the action see [391].

One can use the effective action (17.70) to derive the stochastic time-dependent Ginzburg-Landau equation. To this end one needs to get rid of terms quadratic in quantum components of the fields: $|\Delta_{\mathcal{K}}^q|^2$ in S_{GL} , and $(\mathbf{A}_{\mathcal{K}}^q)^2$ in S_N . For the former this is achieved through the Hubbard-Stratonovich transformation with the help of an auxiliary complex field ξ_{Δ} :

$$e^{-\pi\nu \text{Tr}\{|\Delta_{\mathcal{K}}^q|^2\}} = \int \mathbf{D}[\xi_{\Delta}] e^{-\frac{\pi\nu}{4T} \text{Tr}\left\{\frac{|\xi_{\Delta}|^2}{4T} - i\xi_{\Delta}^* \Delta_{\mathcal{K}}^q - i\xi_{\Delta} \Delta_{\mathcal{K}}^{*q}\right\}}. \quad (17.77)$$

As a result, the action S_{GL} , Eq. (17.71), acquires a linear form in the quantum component of the order parameter $\Delta_{\mathcal{K}}^q$. Integration over the latter leads to the functional delta-function, imposing the stochastic TDGL equation

⁰¹² Note that in Eq. (17.71) and throughout the rest of this section we have restored the electron charge e accompanying source fields $\mathbf{A} \rightarrow e\mathbf{A}$ and $\varphi \rightarrow e\varphi$, such that $\mathbf{A}$ and φ are now actual electromagnetic potentials.

$$\left[\partial_t + \tau_{\text{GL}}^{-1} - D [\nabla_{\mathbf{r}} + 2ie\mathbf{A}_{\mathcal{K}}^{\text{cl}}(\mathbf{r}, t)]^2 + \frac{7\zeta(3)}{\pi^3 T} |\Delta_{\mathcal{K}}^{\text{cl}}(\mathbf{r}, t)|^2 \right] \Delta_{\mathcal{K}}^{\text{cl}}(\mathbf{r}, t) = \xi_{\Delta}(\mathbf{r}, t), \quad (17.78)$$

where, in agreement with FDT, the complex Gaussian white noise $\xi_{\Delta}(\mathbf{r}, t)$ has the following correlator:

$$\langle \xi_{\Delta}(\mathbf{r}, t) \xi_{\Delta}^*(\mathbf{r}', t') \rangle = 2T \frac{8T}{\pi v} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t') \quad (17.79)$$

Indeed, the stationary solution of the corresponding Fokker-Planck equation (see Eq. (9.11)) is $e^{-\mathcal{F}_{\text{GL}}/T}$.

In a similar way, one decouples the term quadratic in $\mathbf{A}_{\mathcal{K}}^{\text{q}}$ in the action (17.76) by introducing a vector Hubbard-Stratonovich field $\vec{\xi}_{\mathbf{j}}(\mathbf{r}, t)$:

$$e^{-4T\sigma \text{Tr}\{\mathbf{A}_{\mathcal{K}}^{\text{q}}\}^2} = \int \mathbf{D} [\vec{\xi}_{\mathbf{j}}] e^{-\text{Tr}\left\{\frac{\vec{\xi}_{\mathbf{j}}^2}{4T\sigma} + 2i\mathbf{A}_{\mathcal{K}}^{\text{q}} \vec{\xi}_{\mathbf{j}}\right\}}, \quad (17.80)$$

where $\sigma = e^2 \nu D$ is the conductivity with DOS and MT renormalizations. The resulting action is now linear in $\mathbf{A}_{\mathcal{K}}^{\text{q}}$, allowing us to define the charge density $\rho(\mathbf{r}, t) = -\delta S_{\text{eff}} / 2\delta\varphi^{\text{q}}(\mathbf{r}, t)$ and the current density $\mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = -\delta S_{\text{eff}} / 2\delta\mathbf{A}^{\text{q}}(\mathbf{r}, t)$. It is important to emphasize that the differentiation here is performed over the bare electromagnetic potentials $\{\mathbf{A}, \varphi\}$, while the action S_{eff} (17.70) is written in terms of the gauged ones $\{\mathbf{A}_{\mathcal{K}}, \varphi_{\mathcal{K}}\}$. The connection between the two $\{\mathbf{A}, \varphi\} \rightleftharpoons \{\mathbf{A}_{\mathcal{K}}, \varphi_{\mathcal{K}}\}$ is provided by the functional $\mathcal{K}[\mathbf{A}, \varphi]$, which is defined by Eq. (16.5). A simple algebra then leads to a set of the continuity relation $\partial_t \rho(\mathbf{r}, t) + \text{div } \mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = 0$ and the expression for the current density entering the Maxwell equation $\nabla_{\mathbf{r}} \times \mathbf{H} - \dot{\mathbf{E}} = \mathbf{J}$,

$$\mathbf{J} = \sigma \mathbf{E} - D \nabla_{\mathbf{r}} \rho + \frac{\pi e \nu D}{2T} \text{Im} \left\{ \Delta_{\mathcal{K}}^{*\text{cl}} [\nabla_{\mathbf{r}} + 2ie\mathbf{A}_{\mathcal{K}}^{\text{cl}}] \Delta_{\mathcal{K}}^{\text{cl}} \right\} + \vec{\xi}_{\mathbf{j}}(\mathbf{r}, t), \quad (17.81)$$

where $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \partial_t \mathbf{A}_{\mathcal{K}} - \nabla_{\mathbf{r}} \varphi_{\mathcal{K}}$ is the electric field. The current fluctuations are induced by the vector Gaussian white noise with the correlator

$$\langle \xi_{\mathbf{j}}^{\mu}(\mathbf{r}, t) \xi_{\mathbf{j}}^{\nu}(\mathbf{r}', t') \rangle = 2T \sigma \delta_{\mu\nu} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t') \quad (17.82)$$

ensuring validity of the FDT. Equations (17.78) and (17.81) along with the continuity relation, supplemented by the Maxwell equations, constitute the complete set describing dynamics of the superconductors at $T \gtrsim T_c$.

It is instructive to rewrite the TDGL equation (17.78) back in the original gauge. This is achieved by the substitution of the gauged order parameter $\Delta_{\mathcal{K}}^{\text{cl}} = \Delta^{\text{cl}} \exp(-2ie\mathcal{K}^{\text{cl}})$ and the vector potential, Eq. (17.66), into Eq. (17.78). This way, one finds the following equation for the bare order parameter Δ^{cl} :

$$[\partial_t - 2ie\partial_t \mathcal{K}^{\text{cl}}] \Delta^{\text{cl}} = \left[D [\nabla_{\mathbf{r}} + 2ie\mathbf{A}^{\text{cl}}]^2 - \tau_{\text{GL}}^{-1} - \frac{7\zeta(3)}{\pi^3 T} |\Delta^{\text{cl}}|^2 \right] \Delta^{\text{cl}} + \xi_{\Delta} \quad (17.83)$$

where we have redefined the complex noise as $\xi_{\Delta} \rightarrow \xi_{\Delta} \exp(2ie\mathcal{K}^{\text{cl}})$, which, however, does not change its correlation function (17.79). Unlike the TDGL equation frequently found in the literature, the left-hand side of Eq. (17.83) contains the Gor'kov-Eliashberg [395] anomalous term $\partial_t \mathcal{K}^{\text{cl}}(\mathbf{r}, t)$ instead of the scalar potential $\varphi^{\text{cl}}(\mathbf{r}, t)$; see Fig. 17.2(b). In a generic case $\mathcal{K}^{\text{cl}}(\mathbf{r}, t)$ is a nonlocal functional of the scalar and longitudinal vector potentials given by Eq. (16.7), which for the classical component reads as

$$(D \nabla_{\mathbf{r}}^2 - \partial_t) \mathcal{K}^{\text{cl}}(\mathbf{r}, t) = \varphi^{\text{cl}}(\mathbf{r}, t) - D \text{div } \mathbf{A}^{\text{cl}}(\mathbf{r}, t). \quad (17.84)$$

The equivalence $\varphi^{\text{cl}} = -\partial_t \mathcal{K}^{\text{cl}}$ holds for spatially uniform potentials; however, in general the two are distinct. The standard motivation behind writing the scalar potential $\varphi^{\text{cl}}(\mathbf{r}, t)$ on the left-hand side of the TDGL equation is gauge invariance. Note, however, that the local gauge transformation

$$\Delta \rightarrow \Delta e^{-2ie\chi}, \quad \varphi \rightarrow \varphi + \partial_t \chi, \quad \mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A} + \nabla_{\mathbf{r}} \chi, \quad \mathcal{K} \rightarrow \mathcal{K} - \chi$$

leaves Eq. (17.83) unchanged, and therefore this form of the TDGL equation is perfectly gauge invariant. The last expression here is an immediate consequence of Eq. (17.84) and the rules of the gauge transformation for φ and $\mathbf{A}$. In the $\mathcal{K}$ gauge, Eq. (17.66), specified by $\chi = \mathcal{K}^{\text{cl}}$, the anomalous Gor'kov-Eliashberg term disappears from the left-hand side of the TDGL equation (17.83), and one recovers Eq. (17.78).

17.6.0.1 Derivation of the Effective Action

Substituting the parametrizations (17.67) and (17.68) into the action (17.7) and expanding to second order in the complex Cooperon modes c and $\tilde{c}$, one finds the following quadratic actions (throughout this section we omit the gauge-specifying subscript $\mathcal{K}$ for brevity):

$$iS^c[c, \Delta] = -\frac{\pi\nu}{2} \text{Tr} \left\{ c_{\epsilon'\epsilon}^* [Dq^2 - i(\epsilon + \epsilon')] c_{\epsilon'\epsilon} + 2i\Delta_{\epsilon\epsilon'}^c c_{\epsilon'\epsilon}^* - 2i\Delta_{\epsilon\epsilon'}^{*c} c_{\epsilon'\epsilon} \right\} \quad (17.85a)$$

$$iS^{\tilde{c}}[\tilde{c}, \Delta] = -\frac{\pi\nu}{2} \text{Tr} \left\{ \tilde{c}_{\epsilon'\epsilon}^* [Dq^2 + i(\epsilon + \epsilon')] \tilde{c}_{\epsilon'\epsilon} - 2i\Delta_{\epsilon\epsilon'}^{\tilde{c}} \tilde{c}_{\epsilon'\epsilon}^* + 2i\Delta_{\epsilon\epsilon'}^{*\tilde{c}} \tilde{c}_{\epsilon'\epsilon} \right\} \quad (17.85b)$$

where the following form factors were introduced:

$$\Delta_{\epsilon\epsilon'}^c = \Delta^{\text{cl}}(\epsilon - \epsilon') + F_{\epsilon}^{\text{eq}} \Delta^{\text{q}}(\epsilon - \epsilon'), \quad \Delta_{\epsilon\epsilon'}^{\tilde{c}} = \Delta^{\text{cl}}(\epsilon - \epsilon') - F_{\epsilon'}^{\text{eq}} \Delta^{\text{q}}(\epsilon - \epsilon'). \quad (17.86)$$

It is important to emphasize that the diffuson modes $\{d^{\alpha}, \tilde{d}^{\alpha}\}$ couple to Δ only starting from the quadratic order in $\tilde{\mathcal{W}}$. These terms produce nonlocal and nonlinear interaction vertices for the order parameter and will not be considered here; see [391] for more details. We have also utilized the advantage of the $\mathcal{K}$ -gauge to avoid terms linear in $\tilde{\mathcal{W}}$ and the electromagnetic potentials, see Section 16.1. To perform Gaussian integrations over the Cooperon modes c and $\tilde{c}$ it is convenient to find stationary configurations of the quadratic forms in Eqs. (17.85), which are given by

$$c_{\epsilon\epsilon'}(\mathbf{q}) = \frac{-2i\Delta_{\epsilon\epsilon'}^c(\mathbf{q})}{Dq^2 - i(\epsilon + \epsilon')}, \quad \tilde{c}_{\epsilon\epsilon'}(\mathbf{q}) = \frac{2i\Delta_{\epsilon\epsilon'}^{\tilde{c}}(\mathbf{q})}{Dq^2 + i(\epsilon + \epsilon')} \quad (17.87)$$

The Gaussian integral is calculated by substituting these stationary configurations back into the quadratic action (17.85), which leads to

$$iS_{\text{GL}}[\Delta] = 4\pi\nu \sum_{\mathbf{q}} \iint \frac{d\epsilon d\omega}{4\pi^2} \frac{[\Delta^{*\text{cl}} + F_{\epsilon-\omega/2}^{\text{eq}} \Delta^{*\text{q}}] [\Delta^{\text{cl}} + F_{\epsilon+\omega/2}^{\text{eq}} \Delta^{\text{q}}]}{Dq^2 - 2i\epsilon} \quad (17.88)$$

where $\Delta^{\text{cl}(\text{q})} = \Delta^{\text{cl}(\text{q})}(\mathbf{q}, \omega)$ with $\omega = \epsilon - \epsilon'$ and $\epsilon = (\epsilon + \epsilon')/2$. We have also employed the fact that F_{ϵ}^{eq} is an odd function to change variables as $\epsilon \rightarrow -\epsilon$ in the contribution coming from the $\tilde{c}$ modes. The contribution to $iS_{\text{GL}}[\Delta]$ with the two classical components of the order parameter $\sim \Delta^{*\text{cl}} \Delta^{\text{cl}}$ vanishes identically after the ϵ -integration, being an integral of the purely retarded function. This is a manifestation of the normalization condition for the Keldysh-type action (see Section 2.7 for discussions). The action therefore acquires the standard Keldysh causality

structure, Eqs. (17.71) and (17.72). Combining it with the bare Hubbard-Stratonovich term $\sim \Delta^{*q} \Delta^{cl} / \lambda$, Eq. (17.5), one obtains for its retarded and advanced components

$$(L^{-1})^{R(A)}(\mathbf{q}, \omega) = -\frac{1}{\lambda} - i \int d\epsilon \frac{F_{\epsilon \mp \omega/2}^{\text{eq}}}{Dq^2 - 2i\epsilon} \quad (17.89)$$

This expression can be reduced to a more familiar form. Indeed, adding and subtracting the right-hand side of Eq. (17.89) taken at zero frequency and momentum, one writes for, for example, the retarded component

$$(L^{-1})^R(\mathbf{q}, \omega) = -\frac{1}{\lambda} + \int_{-\omega_D}^{+\omega_D} d\epsilon \frac{F_{\epsilon}^{\text{eq}}}{2\epsilon} - i \int d\epsilon \left[\frac{F_{\epsilon}^{\text{eq}}}{Dq^2 - i\omega - 2i\epsilon} + \frac{F_{\epsilon}^{\text{eq}}}{2i\epsilon} \right]. \quad (17.90)$$

The first integral on the right-hand side is logarithmically divergent and is to be cut off at the Debye frequency ω_D . Recalling the definition of the critical temperature T_c , Eq. (17.17), one notices that the first two terms here combine to give $\ln T_c/T \approx (T_c - T)/T$. The last integral is convergent and may be evaluated exactly, leading to

$$\begin{aligned} (L^{-1})^R(\mathbf{q}, \omega) &= \ln \frac{T_c}{T} - \psi \left(\frac{Dq^2 - i\omega}{4\pi T} + \frac{1}{2} \right) + \psi \left(\frac{1}{2} \right) \\ &\approx \frac{\pi}{8T} (i\omega - Dq^2 - \tau_{\text{GL}}^{-1}) \end{aligned} \quad (17.91)$$

where $\psi(x)$ is the digamma function and $\tau_{\text{GL}}^{-1} = 8(T - T_c)/\pi$. Since according to the last expression $Dq^2 \sim \omega \sim \tau_{\text{GL}}^{-1} \ll T$, the expansion of the digamma function is justified. Transforming back to the space-time representation using $i\omega \rightarrow -\partial_t$ and $q^2 \rightarrow -\nabla_{\mathbf{r}}^2 \rightarrow -(\nabla_{\mathbf{r}} + 2ie\mathbf{A}^{cl})^2$, where we also included the vector potential, one arrives at Eq. (17.73a). To derive the Keldysh component of the $\hat{L}^{-1}$ matrix, one adds to Eq. (17.88) zero in the form $-4\pi\nu \text{Tr} \{ \Delta^{*q} \Delta^q / [Dq^2 - 2i\epsilon] \} = 0$, which vanishes upon ϵ integration by causality. Employing the familiar identity $F_{\epsilon-\omega/2}^{\text{eq}} F_{\epsilon+\omega/2}^{\text{eq}} - 1 = B_{\omega} (F_{\epsilon-\omega/2}^{\text{eq}} - F_{\epsilon+\omega/2}^{\text{eq}})$, one obtains Eq. (17.73b).

The supercurrent part of the action S_S emerges from the $\text{Tr} \{ [\check{\mathbf{A}}, \check{Q}] \hat{\partial}_{\mathbf{r}} \check{Q} \}$ term upon second-order expansion over the Cooperon modes, which leads to

$$S_S = \frac{i\pi\nu}{4} \text{Tr} \{ c_{tt'}^*(\mathbf{r}) \mathcal{N}_{tt'} c_{t't}(\mathbf{r}) + \tilde{c}_{tt'}^*(\mathbf{r}) \mathcal{N}_{tt'} \tilde{c}_{t't}(\mathbf{r}) \} \quad (17.92)$$

where

$$\mathcal{N}_{tt'} = \delta(t - t') \frac{2eD}{T} \left[\frac{1}{2} \text{div} \mathbf{A}^q(\mathbf{r}, t) + \mathbf{A}^q(\mathbf{r}, t) [\nabla_{\mathbf{r}} + 2ie\mathbf{A}^{cl}(\mathbf{r}, t)] \right] \quad (17.93)$$

Deriving $\mathcal{N}_{tt'}$, one uses an approximation for the equilibrium Fermi function in the time representation

$$F_{t-t'}^{\text{eq}} = -\frac{iT}{\sinh(\pi T(t-t'))} \xrightarrow{t-t' \gg 1/T} \frac{i}{2T} \delta'(t - t'), \quad (17.94)$$

which is applicable for slowly varying external fields. To perform the Gaussian integration over the Cooperon modes, one substitutes the stationary configurations (17.87) into Eq. (17.92). To this end it is convenient to rewrite them in the spacetime representation. This is achieved by noticing that, since $\epsilon \approx T$ and $Dq^2 \approx \tau_{\text{GL}}^{-1}$, $Dq^2 \ll \epsilon$. Therefore one may think of the denominators in Eq. (17.87) as $0 \mp i(\epsilon + \epsilon')$, which greatly simplifies the Fourier transformation to the time domain. This way, one finds

$$c_{tt'}(\mathbf{r}) \approx -i\theta(t-t')\Delta^{\text{cl}}\left(\mathbf{r}, \frac{t+t'}{2}\right) + \chi(t-t')\Delta^{\text{q}}\left(\mathbf{r}, \frac{t+t'}{2}\right) \quad (17.95\text{a})$$

$$\tilde{c}_{tt'}(\mathbf{r}) \approx i\theta(t-t')\Delta^{\text{cl}}\left(\mathbf{r}, \frac{t+t'}{2}\right) - \chi(t-t')\Delta^{\text{q}}\left(\mathbf{r}, \frac{t+t'}{2}\right) \quad (17.95\text{b})$$

$$\chi(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\epsilon}{2\pi} \tanh\left(\frac{\epsilon}{2T}\right) \frac{e^{-i\epsilon t}}{\epsilon + i0} = \frac{2}{\pi} \operatorname{arctanh}\left(e^{-\pi T|t|}\right) \quad (17.95\text{c})$$

where the step function $\theta(t-t')$ is understood as being smeared by about $1/T$ and in particular $\theta(0) = 1/2$. Now one can perform integration over t' in Eq. (17.92) with the help of the delta-function from Eq. (17.93). Keeping only the classical component of the order parameter, since $\mathcal{N}$ is already proportional to the quantum component $\mathbf{A}^{\text{q}}$, one obtains S_{S} , Eq. (17.75).

13.5.7 17.7 Fluctuating Superconductivity

Although for temperatures above T_c the expectation value of the order parameter is zero, the expectation value of $|\Delta^{\text{cl}}|^2$ is finite. Indeed, since the TDGL equation (17.78) or (17.83) contains the noise ξ_{Δ} , it forces the order parameter to fluctuate around zero, creating a finite correlation function of the form $\langle \Delta^{\text{cl}}(\mathbf{r})\Delta^{*\text{cl}}(\mathbf{r}') \rangle = iL^{\text{K}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')/(2\nu)$; see Eq. (17.71). Thermodynamic and transport observables in the metal are affected by the fluctuating order parameter. For example, the current (17.81) contains the term $\sim \operatorname{Im} \Delta^{*\text{cl}} \partial_{\mathbf{r}} \Delta^{\text{cl}}$. Upon averaging over the fluctuations there is a finite residual effect of such a sensitivity on the instantaneous value of the order parameter. This fact leads to a scope of fluctuation corrections to magnetization, density of states, conductivity, and so on, which usually exhibit singular behavior at $T \rightarrow T_c$; see Larkin and Varlamov [396] for a review.

Here we focus on fluctuation corrections to the conductivity, which originate from the expression (17.81) for the electric current. The latter consist of the normal (the first two terms on the right-hand side of Eq. (17.81)) and the supercurrent (the third term), coming from S_{N} and S_{S} , respectively (the noise ξ_{J} , while important for the current noise spectrum, does not contribute to the average current). The normal part includes the Δ^{cl} -dependent density of states and diffusion constant renormalization. Upon averaging over the order parameter fluctuations they lead to DOS [392] and Maki-Thompson [393] corrections to the conductivity. We shall not derive them here, referring the reader to [396, 391, 24]. Instead we concentrate on the supercurrent part, which leads to a correction to the conductivity discovered by Aslamazov and Larkin [397]. Averaging the supercurrent part of Eq. (17.81) over the fluctuations of the order parameter, one obtains

$$\delta \mathbf{J}_{\text{S}}(\mathbf{r}) = \frac{\pi e D}{4T} \left[\frac{1}{2} (\nabla_{\mathbf{r}} - \nabla_{\mathbf{r}'}) + 2ie\mathbf{A} \right] L^{\text{K}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \Big|_{\mathbf{r}'=\mathbf{r}} \quad (17.96)$$

where $L^{\text{K}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ is the Keldysh component of the full dressed correlation matrix. In the absence of external fields the latter is even in $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$ and thus $\delta \mathbf{J}_{\text{S}} = 0$. One needs therefore to evaluate how $L^{\text{K}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ is affected by applied fields. This task leads to the Dyson equation for the correlation matrix $\hat{L}$. We restrict ourselves to the linear response on a spatially uniform ac vector potential $\mathbf{A}(\Omega)$. The latter enters the bosonic operator $\hat{L}^{-1}$ in Eq. (17.71) as $(\pi D/2T)\hat{\sigma}_1 e \mathbf{A} i \nabla_{\mathbf{r}}$ and we invert the operator to first order in such a perturbation (neglecting the nonlinear terms in TDGL). Going to the Fourier representation, one finds for the ac current at frequency Ω

$$\delta \mathbf{J}_S = \frac{i\pi e D}{4T} \sum_{\mathbf{q}, \omega} \left[\mathbf{q} \left(\hat{L}(\mathbf{q}, \omega + \Omega) \frac{\pi D}{2T} \hat{\sigma}_1 e(\mathbf{A}\mathbf{q}) \hat{L}(\mathbf{q}, \omega) \right)^K + 2e\mathbf{A}L^K(\mathbf{q}, \omega) \right] \quad (17.97)$$

where all correlators $\hat{L}$ are understood hereafter as not containing the external vector potential, and the superscript K means that the Keldysh, that is, (cl, cl), component of the correlation matrix is taken. Performing the matrix multiplication and employing the bosonic FDT relation $L^K = B_\omega (L^R - L^A)$, one finds for the first term in the square brackets on the right-hand side of Eq. (17.97)

$$\frac{\pi e D}{2T} \mathbf{q}(\mathbf{A}\mathbf{q}) [B_\omega L_{\omega+\Omega}^R L_\omega^R - B_{\omega+\Omega} L_{\omega+\Omega}^A L_\omega^A + (B_{\omega+\Omega} - B_\omega) L_{\omega+\Omega}^R L_\omega^A] \quad (17.98)$$

Let us look first at the $\Omega = 0$ limit. The last term on the right-hand side vanishes, while the first two along with the last (paramagnetic) terms on the right-hand side of Eq. (17.97) combine to yield the following expression:

$$2eB_\omega \nabla_{\mathbf{q}} [(\mathbf{A}\mathbf{q}) (L_\omega^R(\mathbf{q}) - L_\omega^A(\mathbf{q}))],$$

where we employed the fact that $\nabla_{\mathbf{q}} L_\omega^{R(A)}(\mathbf{q}) = (\pi D \mathbf{q} / 4T) (L_\omega^{R(A)})^2$; see Eq. (17.73a). Being the full gradient, this expression vanishes upon summation over momenta $\mathbf{q}$. As expected, a vector potential that is constant in space and time does not produce any current.

We look now for the first order in the external frequency Ω . The last term on the right-hand side of Eq. (17.98) yields $\Omega (\partial_\omega B_\omega) L_\omega^R L_\omega^A$. Shifting the integration variable $\omega + \Omega \rightarrow \omega$ in the second term, one finds for the first and second terms:

$$\begin{aligned} B_\omega L_{\omega+\Omega}^R L_\omega^R - B_\omega L_\omega^A L_{\omega-\Omega}^A &\rightarrow \Omega B_\omega [(\partial_\omega L_\omega^R) L_\omega^R + L_\omega^A (\partial_\omega L_\omega^A)] \\ &= \frac{\Omega}{2} B_\omega [\partial_\omega (L_\omega^R)^2 + \partial_\omega (L_\omega^A)^2] \rightarrow -\frac{\Omega}{2} (\partial_\omega B_\omega) [(L_\omega^R)^2 + (L_\omega^A)^2], \end{aligned}$$

where in the last instance we involved ω -integration by parts. As a result, one finds for the current

$$\begin{aligned} \delta \mathbf{J}_S &= - \left(\frac{\pi e D}{4T} \right)^2 i\Omega \sum_{\mathbf{q}, \omega} \mathbf{q}(\mathbf{A}\mathbf{q}) (\partial_\omega B_\omega) [(L_\omega^R)^2 + (L_\omega^A)^2 - 2L_\omega^R L_\omega^A] \\ &= \left(\frac{\pi e D}{4T} \right)^2 \int \frac{d\omega}{2\pi} (\partial_\omega B_\omega) \sum_{\mathbf{q}} \mathbf{q}(\mathbf{E}\mathbf{q}) [L_\omega^R(\mathbf{q}) - L_\omega^A(\mathbf{q})]^2 \end{aligned} \quad (17.99)$$

where the electric field is given by $\mathbf{E} = \partial_t \mathbf{A} = -i\Omega \mathbf{A}$. The AslamazovLarkin (AL) correction to the conductivity is given by $\delta\sigma_{AL} = \delta \mathbf{J}_S / \mathbf{E}$. Since for $T - T_c \ll T_c$, $\omega \sim \tau_{GL}^{-1} \ll T$, one may approximate the bosonic distribution function as $B_\omega = \coth \omega / 2T \approx 2T_c / \omega$. Recalling that the order parameter propagators are $L^{R(A)} = (8T/\pi) [\pm i\omega - Dq^2 - \tau_{GL}^{-1}]^{-1}$, Eq. (17.73a), and performing the frequency integration in Eq. (17.99), one finds

$$\delta\sigma_{AL} = \frac{8T_c e^2 D}{d} \sum_{\mathbf{q}} \frac{Dq^2}{(Dq^2 + \tau_{GL}^{-1})^3}. \quad (17.100)$$

Further analysis depends on the effective dimensionality d of the system. In particular, for a film of thickness less than the superconducting coherence length $\xi = \sqrt{D\tau_{GL}}$, which is effectively two-dimensional, $d = 2$, one obtains $\delta\sigma_{AL} = e^2 T_c \tau_{GL} / 2\pi$. Recalling that $\tau_{GL} = \pi/8 (T - T_c)$, one finally obtains [397]

$$\delta\sigma_{\text{AL}} = \frac{e^2}{16\hbar} \frac{T_c}{T - T_c}. \quad (17.101)$$

As a precursor of the superconducting transition, the conductivity is singularly enhanced as $T \rightarrow T_c$. Moreover, the singular correction depends only on the reduced temperature $T/T_c - 1$ and is insensitive to the bare conductivity and other microscopic details of the film. For an arbitrary dimensionality $d < 4$, Eq. (17.100) yields $\delta\sigma_{\text{AL}} \propto \tau_{\text{GL}}^{2-d/2}$. This leads in $d = 1$ to the fluctuation correction, which scales as $\delta\sigma_{\text{AL}} \propto (T - T_c)^{-3/2}$, while in $d = 3$ it goes as $\delta\sigma_{\text{AL}} \propto (T - T_c)^{-1/2}$.

13.5.8 17.8 Problems

17.8.1 Gapless Superconductivity

Consider a superconductor in a presence of a static, spatially uniform perturbation, which breaks the time-reversal symmetry. This may be, for example, a small concentration of magnetic impurities, or an in-plane magnetic field, $H_{\parallel}$, applied to a thin film of thickness $d < \xi$, where $\xi = \sqrt{D/\Delta}$ is the coherence length. In the latter case one introduces an (x, y) -independent vector potential $A_x = H_{\parallel}z$, and integrates the action (17.7) over the z -coordinate, $|z| < d/2$. This leads to 2d spatially uniform action

$$iS = -\frac{\pi v d}{8} \text{Tr} \left\{ -\frac{\gamma}{2} [\tilde{\mathcal{T}}_3, \tilde{\mathcal{Q}}]^2 + 4i\epsilon \tilde{\mathcal{T}}_3 \tilde{\mathcal{Q}} + 4i\tilde{\Delta} \tilde{\mathcal{Q}} \right\}, \quad (17.102)$$

where $\gamma = \frac{1}{6}D(H_{\parallel}d)^2$ is the energy scale of the time-reversal symmetry breaking perturbation.

Perform variation with respect to $\tilde{\mathcal{Q}}$ and derive the Usadel equation for the stationary matrix $\hat{\Lambda}_{\epsilon}^{\text{R}}$ (cf. Eq. (17.13)). Parametrize $\hat{\Lambda}_{\epsilon}^{\text{R}}$ with the help of the complex rotation angle in the Nambu space, $\vartheta(\epsilon)$, as in Eq. (17.24), and show that the latter satisfy the following equation:

$$\epsilon = \Delta \coth \vartheta - i\gamma \cosh \vartheta. \quad (17.103)$$

Solution of this equation determines, among other things, the density of states:

$$v(\epsilon) = \frac{v}{4} \text{Tr} \left\{ \hat{\tau}^3 \hat{\Lambda}^{\text{R}} - \hat{\Lambda}^{\text{A}} \hat{\tau}^3 \right\} = v \text{Re}[\cosh \vartheta(\epsilon)] \quad (17.104)$$

Within the energy gap, $|\epsilon| < \epsilon_g$, where $0 \leq \epsilon_g \leq \Delta$, the density of states is zero, that is, $\text{Re}[\cosh \vartheta] = 0$, and thus the angle is $\vartheta = -i\pi/2 + \theta$, with real θ . This brings $\epsilon = \Delta \tanh \theta - \gamma \sinh \theta$. By investigating the right-hand side of this equation, show that it may be indeed satisfied only in the limited range of energies, $|\epsilon| < \epsilon_g$, where the gap ϵ_g is given by the astroid condition [398]

$$\epsilon_g^{2/3} + \gamma^{2/3} = \Delta^{2/3} \quad (17.105)$$

Investigate behavior of the density of states, $\nu(\epsilon)$, immediately above the gap, that is, $\epsilon \gtrsim \epsilon_g$. Notice that according to the astroid condition, the gap exists as long as $\gamma < \Delta$.

Let's look now at the self-consistency relation (17.32) at $T = 0$, that is, with $F_{\text{L}}(\epsilon) = \text{sign}(\epsilon)$ and $F_{\text{T}}(\epsilon) = 0$. It takes the form (notice, $\vartheta(-\epsilon) = -\vartheta^*(\epsilon)$):

$$1 = \frac{\lambda}{\Delta} \text{Re} \int_0^{\omega_{\text{D}}} d\epsilon \sinh \vartheta = \frac{\lambda}{\Delta} \text{Re} \int d\tau \frac{d\epsilon}{d\tau} \tau = -\lambda \text{Re} \int \frac{d\tau}{\sqrt{1+\tau^2}} \left[\frac{1}{\tau} + i \frac{\gamma}{\Delta} \tau^2 \right] \quad (17.106)$$

where $\tau = \sinh \vartheta$ and $d\epsilon/d\tau$ is calculated using Eq. (17.103). One can now eliminate the interaction strength, λ , by dividing this equation by that at $\gamma = 0$, which defines the bare order parameter Δ_0 . Think carefully about the limits of the τ integral (they are different for $\gamma < \Delta$ vs. $\gamma > \Delta$) and perform the integration explicitly.¹³ This leads to the relation $\log(\Delta_0/\Delta) = g(\gamma/\Delta)$, where $g(x) = \pi x/4$, if $x < 1$, and $g(x) = \ln(x + \sqrt{x^2 - 1}) - \frac{1}{2x}\sqrt{x^2 - 1} + \frac{\pi}{2} \arcsin x^{-1}$, if $x > 1$.

If you look for a point where $\Delta \rightarrow 0$, this spells $x \rightarrow \infty$ and $g(x) \rightarrow \log(2x)$. This means that the self-consistency loses a nonzero solution once $\gamma \geq \Delta_0/2$. This is the quantum phase transition point, where the superconductivity is destroyed by the time-reversal-symmetry breaking perturbation. On the other hand, the gap disappears if $\gamma \geq \Delta$, that is, at $x \geq 1$, or $\log(\Delta_0/\Delta) \geq \pi/4$. Therefore, within the interval $e^{-\pi/4} = 0.456 < \gamma/\Delta_0 < 1/2$ below the quantum phase transition, the self-consistency condition leads to a nonzero order parameter $0 < \Delta < \gamma$, while the gap in the spectrum is already fully suppressed. This is the phenomenon of the gapless superconductivity [398]. Solve Eq. (17.103) numerically and plot the density of states (17.104) as a function of energy for $\gamma < \Delta$, $\gamma = \Delta$, and $\gamma > \Delta$ [414].

17.8.2 Microwave Absorption in Superconductors

Consider a superconducting thin film irradiated with a microwave electromagnetic field with frequency ω . In a spatially uniform case this leads to the action $iS_{\text{coll}}[\tilde{Q}] = \frac{\pi v D}{8} \text{Tr} \{ [\tilde{\mathcal{T}}_3 \mathbf{A}, \tilde{Q}]^2 \}$ (cf. the first term in Eq. (17.102)), where $\mathbf{A}(t)$ is the ac vector potential, associated with the electromagnetic wave. This term leads to the collision integral, given by

$$\frac{v(\epsilon)}{v} \partial_t F_{L,\epsilon} = I_{\text{coll}}[F_{L,\epsilon}] = \frac{1}{\pi v} \text{Tr}_N \left\{ \hat{\tau}_0 \left(\frac{\delta i S_{\text{coll}}}{\delta \tilde{Q}_{\epsilon\epsilon}} \right)_K^{(1,2)} \right\}, \quad (17.107)$$

where $\nu(\epsilon)$ is the superconducting density of states (17.18) and we have restricted ourselves to the longitudinal component of the distribution function and thus taken the Nambu trace $\text{Tr}_N \{ \hat{\tau}_0 \dots \}$. Calculate the variation, take its (1,2) Keldysh block, and put the $\tilde{Q}$ -field to its stationary point value, $\tilde{Q} = \tilde{\Lambda}_\epsilon$, which is diagonal in the energy space, with $\hat{\Lambda}_\epsilon^K = F_{L,\epsilon} (\hat{\Lambda}_\epsilon^R - \hat{\Lambda}_\epsilon^A)$. Finally take the trace over the Nambu subspace. This way you'll find for the collision integral:

$$I_{\text{coll}}[F_{L,\epsilon}] = \sum_{\pm} \mathcal{M}_{\epsilon,\epsilon'} (F_{L,\epsilon'} - F_{L,\epsilon}); \quad \mathcal{M}_{\epsilon,\epsilon'} = D(\mathbf{A})^2 [\text{Re } u_\epsilon \text{Re } u_{\epsilon'} + \text{Re } v_\epsilon \text{Re } v_{\epsilon'}] \quad (17.108)$$

where the summation stands for absorption and emission processes $\epsilon' = \epsilon \pm \omega$. It's worth noticing that for an ultrasound stimulation, the expression is similar, but with $\mathcal{M}_{\epsilon,\epsilon'} \propto [\text{Re } u_\epsilon \text{Re } u_{\epsilon'} - \text{Re } v_\epsilon \text{Re } v_{\epsilon'}]$ instead, see Eq. (18.30). The difference may be traced back to the presence of the time-reversal symmetry breaking matrices $\hat{\tau}_3$, multiplying the vector potential, but not the phonon field.

Calculate the energy absorption, by evaluating change of the total electron energy $\partial_t E_e = \partial_t \int d\epsilon \nu(\epsilon) \frac{1}{2} (1 - F_{L,\epsilon}) = -\frac{\nu}{2} \int d\epsilon I_{\text{coll}}[F_{L,\epsilon}] = \text{Re}[\sigma(\omega)] (\omega \mathbf{A})^2$, where the last equality expresses the Joule heating as a product of the electric field $e\omega \mathbf{A}$ and the in-phase current $\text{Re}[\sigma(\omega)](e\omega \mathbf{A})$. Substitute the collision integral (17.108) and rearrange the energy integrals to find for, for example, $0 < \omega < 2\Delta$:

$$\text{Re}[\sigma(\omega)] = \frac{\sigma_D}{\omega} \int_{\Delta}^{\infty} d\epsilon (F_{L,\epsilon+\omega} - F_{L,\epsilon}) \frac{\epsilon(\epsilon + \omega) + \Delta^2}{\sqrt{\epsilon^2 - \Delta^2} \sqrt{(\epsilon + \omega)^2 - \Delta^2}} \quad (17.109)$$

¹³ Use the fact that for $\omega_D \gg \Delta_0$ the upper limit of the τ -integral is $\Delta/\omega_D \ll 1$, and $\Delta_0/\omega_D \ll 1$ for the normalization integral. There is thus a narrow interval, where $\int_{\Delta/\omega_D}^{\Delta_0/\omega_D} d\tau/\tau = \log(\Delta_0/\Delta)$.

where $\sigma_D = e^2 \nu D$ is the Drude conductivity of the normal metal. This is the Mattis-Bardeen formula [399] for the microwave absorption in superconductors. Derive the corresponding expression for $\omega > 2\Delta$. In the linear response regime one may take the equilibrium value for the distribution function $F_{L,\epsilon} = \tanh(\epsilon/2T)$.

Show that in the limit $\omega \ll T \ll \Delta$ the Mattis-Bardeen formula leads to

$$\text{Re}[\sigma(\omega)] = \sigma_D \frac{2\Delta}{T} e^{-\Delta/T} \left[\log\left(\frac{T}{\omega}\right) - \gamma_E \right] \quad (17.110)$$

where γ_E is the Euler gamma; while in the limit $\omega \ll 2\Delta \ll T \lesssim T_c$ to

$$\text{Re}[\sigma(\omega)] = \sigma_D \left[1 + \frac{\Delta}{2T} \log\left(\frac{2\Delta}{\omega}\right) \right] \quad (17.111)$$

What is the Kramers-Kronig counterpart of the logarithmic singularity at small frequency in the $\text{Im}[\sigma(\omega)]$? The singularity is a consequence of the BCS density of states.¹⁴ Moreover, the coefficient in front of $\log(1/\omega)$ is proportional to $\partial_\epsilon F_{L,\epsilon}|_{\epsilon=\Delta}$. Both of these features are particularly sensitive to deviations from the linear response, which tend to smear the singularity. Such deviations come from (i) the BCS density of states being rounded up by $\gamma \propto D\mathbf{A}^2$, as discussed in Problem 17.8.1, and (ii) a non-equilibrium distribution function, which is a subject of Problem 17.8.3.

17.8.3 Stimulated Superconductivity

Here we discuss the kinetic equation (17.107), (17.108) beyond the linear response regime. For BCS superconductors, $\text{Re } u_\epsilon = \text{Re } v_\epsilon = 0$ if $|\epsilon| < \Delta$. This implies that for $\omega < 2\Delta$ both initial and final energies $\epsilon, \epsilon' > \Delta$ (or $\epsilon, \epsilon' < -\Delta$). These processes conserve the number of thermal quasiparticles. (The pair-breaking processes with, e.g. $\epsilon < -\Delta$ and $\epsilon' > \Delta$, which create extra quasiparticles, are only possible for $\omega > 2\Delta$.) Therefore radiation with $\omega < 2\Delta$ excites the quasiparticles to higher energies, without changing their total number. This means less quasiparticles at $\epsilon \approx \Delta$ in an irradiated film than without the radiation. According to the self-consistency condition (17.16), it is $F_{L,\Delta}$ that is primarily responsible for the value of Δ . Thus, heating the quasiparticles with $\omega < 2\Delta$ radiation increases the order parameter. Compare it with the usual phonon-mediated heating, which, of course, suppresses the order parameter. The key difference is that while the former conserves quasiparticle number, the latter creates more quasiparticles. Enhancement of the order parameter by radiation was seen experimentally [402, 403] and soon explained by Eliashberg [400]; for a review see [401].

Let us focus on $T \lesssim T_c$, where $\omega \ll 2\Delta \ll T$. Expand the right-hand side of Eq. (17.108) to the second powers in ω to arrive at the energy diffusion equation

$$\partial_t (v(\epsilon) F_{L,\epsilon}) = v \partial_\epsilon (\omega^2 \mathcal{M}_{\epsilon,\epsilon} \partial_\epsilon F_{L,\epsilon}) \quad (17.112)$$

This is a generalization of the energy diffusion in normal metals, discussed in Section 14.9. It shows that in the superconductors the diffusion coefficient is energy-dependent:

$$\mathcal{D}(\epsilon) = \omega^2 \mathcal{M}_{\epsilon,\epsilon} = D(\omega \mathbf{A})^2 \frac{\epsilon^2 + \Delta^2}{\epsilon^2 - \Delta^2} \theta(|\epsilon| - \Delta); \quad (17.113)$$

compare Eq. (14.80). According to Eq. (17.112), the total number of quasiparticles, $\int_{\Delta}^{\infty} d\epsilon \nu(\epsilon) \frac{1}{2} (1 - F_{L,\epsilon})$, is conserved.

¹⁴ It is interesting to note, however, that the logarithmic singularity is not present in the ultrasound absorption by quasiparticles, cf. Eq. (18.48), due to the different combination of u_ϵ and v_ϵ coherence factors, mentioned previously.

The only stationary solution with no energy current is $F_{L,\epsilon} = \text{const}$, which cannot satisfy the quasiparticle conservation. This indicates that one has to invoke some relaxation mechanism, for example, phonons, to find a stationary distribution. Assuming some (energy-dependent) relaxation time $\tau_{\text{rel}}(\epsilon)$, the characteristic diffusion distance in the energy direction is found from $\epsilon^* = \sqrt{\mathcal{D}(\epsilon^*) \tau_{\text{rel}}(\epsilon^*)}$. The distribution function may be approximated as $F_{L,\epsilon} = F^* = \text{const}$ for $\epsilon < \epsilon^*$ and $F_{L,\epsilon} = \tanh(\epsilon/2T)$ for $\epsilon > \epsilon^*$, where F^* is found from the quasiparticle number conservation. Substitute such $F_{L,\epsilon}$ in the self-consistency relation and show that $\Delta \approx \epsilon^*$ for $\Delta(T) < \epsilon^* < \Delta(0)$ and $\Delta \rightarrow \Delta(0)$ for $\Delta(0) < \epsilon^*$. Here $\Delta(T) \ll \Delta(0)$ is the equilibrium order parameter.

13.6 Electron-Phonon Interactions

(note on cond matter is the main note for it)

In this chapter we consider interactions of electrons with acoustic phonons. We derive the corresponding sigma-model and show how it yields kinetic theory for electron and phonon distributions. We obtain electron-phonon thermalization times along with the ultrasound attenuation rate in normal metals and superconductors.

13.6.1 18.1 Phonon Action and Propagators

Lattice displacement at a point $(\mathbf{r}, t)$ is described by a real vector field $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ with the Cartesian components $u^\mu(\mathbf{r}, t)$, where $\mu = x, y, z$. It is convenient to pass right away to the Fourier basis, $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{q}, t \rightarrow \omega$ and consider $\mathbf{u}_{\mathbf{q},\omega}$ as phonon degrees of freedom. Notice that the latter are formally complex variables, obeying $\bar{\mathbf{u}}_{\mathbf{q},\omega} = \mathbf{u}_{-\mathbf{q},-\omega}$. In accordance with our considerations of real boson fields in Section 6.4, their Keldysh action is given by

$$S[\mathbf{u}] = \frac{\rho_m}{2} \sum_{\mathbf{q},\omega,j} \bar{u}_{\mathbf{q},\omega}^{\mu,\alpha} \left[\omega^2 - \left(\omega_{\mathbf{q}}^{(j)} \right)^2 \right] \eta_{\mu\nu}^{(j)}(\mathbf{q}) \hat{\sigma}_1^{\alpha\beta} u_{\mathbf{q},\omega}^{v,\beta}, \quad (18.1)$$

where ρ_m is the material mass density, $\alpha, \beta = cl, q$ and $\hat{\sigma}_1$ is the Pauli matrix in the Keldysh space.¹ Index j is used to label phonon modes whose dispersion relations are denoted as $\omega_{\mathbf{q}}^{(j)}$. We shall restrict ourselves to the low-frequency acoustic modes, but the optical ones may be treated in exactly the same way. The acoustic modes come with longitudinal, $j = l$, and transversal, $j = t$, polarizations. Their long-wavelength dispersion relations are $\omega_{\mathbf{q}}^{(j)} = v_j q$, where $v_{l,t}$ are the speeds of longitudinal and transversal sound correspondingly. In the action (18.1) these two polarizations are encoded by the two projectors

$$\eta_{\mu\nu}^{(l)}(\mathbf{q}) = \frac{q_\mu q_\nu}{q^2}; \quad \eta_{\mu\nu}^{(t)}(\mathbf{q}) = \delta_{\mu\nu} - \frac{q_\mu q_\nu}{q^2} \quad (18.2)$$

with matrix multiplication properties: $\eta^{(j)} \eta^{(j)} = \eta^{(j)}$; $\eta^{(t)} \eta^{(l)} = 0$, $\eta^{(t)} + \eta^{(l)} = 1$, and $\text{tr } \eta^{(t)} = d - 1$; $\text{tr } \eta^{(l)} = 1$, showing that there are $d - 1$ transversal and one longitudinal mode. The longitudinal part of the action is expressed in terms of $(q_v u^v) \sim \text{div } \mathbf{u}$, representing lattice compression or dilation. On the contrary, the transversal displacements are not associated with local variations of the lattice density.

The phonon propagators,

$$D_{\nu\mu}^{\alpha\beta}(\mathbf{q}, \omega) = -i \langle u_{\mathbf{q},\omega}^{\nu,\alpha} \bar{u}_{\mathbf{q},\omega}^{\mu,\beta} \rangle, \quad (18.3)$$

⁰¹ Notice dimensions: $[\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)] = L$, thus $[\mathbf{u}_{\mathbf{q},\omega}] = L^{d+1}T$, while $[\rho_m] = M/L^d$ and $[\sum_{\mathbf{q},\omega}] = L^{-d}T^{-1}$. Therefore $[S[\mathbf{u}]] = ML^2/T = [\hbar]$.

may be straightforwardly read out from the Gaussian action (18.1). In particular, the corresponding retarded (advanced) components are given by

$$D_{\nu\mu}^{R(A)}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{\rho_m} \sum_{j=l,t} \frac{\eta_{\nu\mu}^{(j)}(\mathbf{q})}{(\omega \pm i0)^2 - (\omega_{\mathbf{q}}^{(j)})^2} \quad (18.4)$$

Their imaginary parts may be written as

$$\text{Im } D_{\nu\mu}^{R(A)}(\mathbf{q}, \omega) = \pm \frac{\pi}{\rho_m} \sum_{j=l,t} \frac{\eta_{\nu\mu}^{(j)}(\mathbf{q})}{2\omega} \left[\delta(\omega - \omega_{\mathbf{q}}^{(j)}) + \delta(\omega + \omega_{\mathbf{q}}^{(j)}) \right] \quad (18.5)$$

The Keldysh component is given by the matrix $D^K = D^R B - B D^A$, where B is the matrix of phonon distribution functions. We will not discriminate between $d - 1$ transversal modes and assign them the same scalar distribution function, $B^{(t)}$, while longitudinal ones may have a different one, $B^{(l)}$. Under this assumption the distribution matrix may be written as $B = \eta^{(l)} B^{(l)} + \eta^{(t)} B^{(t)}$. The Wigner transform of these two-point objects is $B^{(j)}(\mathbf{r}, t; \mathbf{q}, \omega)$. Due to the fact that distribution functions appear in product with $\text{Im } D^R$, which contains the delta function, one may put $\omega = \omega_{\mathbf{q}}^{(j)}$ and consider simpler objects $B_{\mathbf{q}}^{(j)}(\mathbf{r}, t) = B^{(j)}(\mathbf{r}, t; \mathbf{q}, \omega_{\mathbf{q}}^{(j)})$. Occasionally we will restrict ourselves to distributions isotropic in the phonon momenta space, where the distribution functions do not depend on momentum direction, but only on its absolute value. In this case, one can consider $B_{\omega_{\mathbf{q}}^{(j)}}(\mathbf{r}, t)$, or for brevity $B_{\omega}^{(j)}(\mathbf{r}, t)$. In thermal equilibrium they are given by $B_{\omega}^{(l)} = B_{\omega}^{(t)} = \coth(\omega/2T)$ in accordance with the fluctuation-dissipation relation. Away from equilibrium $B_{\mathbf{q}}^{(j)}(\mathbf{r}, t)$ should be found from kinetic equations, discussed in Section 18.6.

13.6.2 18.2 Fröhlich and Pippard Electron-Phonon Interactions

The most obvious mechanism of electron-phonon interactions in metals is due to the Coulomb attraction. Indeed, since the conduction band electrons are delocalized and separated from the underlying crystal lattice, the latter carries a positive charge density. It is important that, due to the global charge neutrality, the lattice charge density is exactly equal (and opposite) to the average electronic charge density, ρ_0 , which may be written as

$$\rho_0 = \int^{k_F} \frac{d^d \mathbf{k}}{(2\pi)^d} = \int_0^{\epsilon_F} d\epsilon \nu(\epsilon) = \frac{k_F v_F v}{d} \quad (18.6)$$

where we assumed a parabolic band with the density of states $\nu(\epsilon) = \nu(\epsilon/\epsilon_F)^{d/2-1}$ and $v = v(\epsilon_F)$, where $\epsilon_F = k_F v_F/2$. The phonon displacement, $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$, creates thus a nonuniform lattice charge density $\rho_{\text{lat}}(\mathbf{r}, t) = \rho_0 \text{div } \mathbf{u}(\mathbf{r}, t) - \rho_0$. Such lattice charge interacts with the electronic charge density, $\rho_e(\mathbf{r}, t) = \bar{\psi}(\mathbf{r}, t)\psi(\mathbf{r}, t)$, via the Coulomb interactions.

The Coulomb interactions are screened by the fast electronic degrees of freedom, while slow phonons do not effectively participate in the screening. One should thus use RPA interactions $U_{\text{RPA}}^{-1}(\mathbf{q}, \omega) = (4\pi e^2/q^2)^{-1} + \Pi_0(\mathbf{q}, \omega)$, discussed in Section 10.7. Here $\Pi_0(\mathbf{q}, \omega)$ is the electronic polarization operator, Sections 10.5 and 10.6. Since phonon frequencies are typically much smaller than the electronic ones, one is justified considering the static limit of the polarization operator, $\Pi_0(\mathbf{q}, 0) \approx \nu$; see Eq. (10.56) in the clean case, or Eq. (14.60) in the disordered case. Moreover, for long-wavelength acoustic phonons the characteristic wavenumbers are much less than inverse screening radius, $q \ll \sqrt{4\pi e^2 \nu}$. This leads to the approximately frequency- and momentum-independent interactions $U_{\text{RPA}}^{-1}(\mathbf{q}, \omega) \approx \nu$. In the space-time representation those are local and instantaneous interactions between the lattice distortion, $\rho_0 \text{div } \mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$, and the electronic density, $\bar{\psi}(\mathbf{r}, t)\psi(\mathbf{r}, t)$, of the form

$$\begin{aligned}
S^{(F)}[\mathbf{u}, \psi] &= \frac{1}{v} \int_{\mathcal{C}} dt \int d\mathbf{r} \rho_0 \operatorname{div} \mathbf{u}(\mathbf{r}, t) \bar{\psi}(\mathbf{r}, t) \psi(\mathbf{r}, t) \\
&= \int_{\mathcal{C}} dt \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \bar{\psi}\left(\mathbf{k} + \frac{\mathbf{q}}{2}, t\right) \Gamma_{\mu\nu}^{(F)} i q^\mu u_{\mathbf{q}, t}^v \psi\left(\mathbf{k} - \frac{\mathbf{q}}{2}, t\right)
\end{aligned} \tag{18.7}$$

where

$$\Gamma_{\mu\nu}^{(F)} = \frac{\rho_0}{\nu} \delta_{\mu\nu} = \frac{k_F v_F}{d} \delta_{\mu\nu}; \tag{18.8}$$

compare Eq. (18.6). This is the celebrated Fröhlich electron-phonon coupling [404] (denoted thus with the superscript (F)). Notice that it provides electron interactions only with the longitudinal phonons. Indeed, the transversal ones do not lead to the lattice charge density distortion and thus do not contribute to the Coulomb energy. It is also important to notice that the coupling constant, $k_F v_F/d$, is independent of lattice properties as well as details of the interactions. It depends only on the Fermi surface parameters. This is due to the assumed perfect screening of the Coulomb interactions by the conduction electrons. This is a valid approximation in good metals and superconductors, where the Fermi velocity is much larger than the speed of sound, $v_F \gg v_l$. If this condition is not satisfied, there may be important deviations from the Fröhlich form, Eqs. (18.7), (18.8).

While legitimate in the clean case, the Fröhlich coupling misses an important piece of the physics in the "dirty" limit, $ql_{\text{el}} \ll 1$, where q is phonon wavenumber and $l_{\text{el}} = v_F \tau_{\text{el}}$ is electron elastic mean free path. As was first realized by Pippard [406], phonons not only deform the lattice but also displace impurities, transforming formerly static disorder potential $V_{\text{dis}}(\mathbf{r})$ into the dynamic one, $V_{\text{dis}}(\mathbf{r} + \mathbf{u}(\mathbf{r}, t))$. Colloquially, this leads to the electron density being dragged along with the lattice displacement and providing a compensation for the induced lattice charge $e\rho_0 \operatorname{div} \mathbf{u}$. In other words, the displaced impurity potential provides fast elastic relaxation of the electron distribution around the Fermi surface locally deformed by phonons. These ideas were put on the quantitative basis by Tsuneto [407] and Schmid [408], who showed that in the limit $ql_{\text{el}} \ll 1$ the Fröhlich coupling, Eq. (18.7), should be modified as

$$S^{(P)}[\mathbf{u}, \psi] = \int_{\mathcal{C}} dt \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \bar{\psi}\left(\mathbf{k} + \frac{\mathbf{q}}{2}, t\right) \Gamma_{\mu\nu}^{(P)}(\mathbf{k}) i q^\mu u_{\mathbf{q}, t}^v \psi\left(\mathbf{k} - \frac{\mathbf{q}}{2}, t\right) \tag{18.9}$$

where the Pippard (P) vertex is given by

$$\Gamma_{\mu\nu}^{(P)}(\mathbf{k}) = \frac{k_F v_F}{d} \delta_{\mu\nu} - k_\mu v_\nu \tag{18.10}$$

where $v_v = \partial \epsilon_{\mathbf{k}} / \partial k_v = k_v / m$ for the parabolic dispersion $\epsilon_{\mathbf{k}} = k^2 / 2m$. The first term on the right-hand side of Eq. (18.10) is already familiar Fröhlich coupling. The second one originates from the impurities motion.

The remarkable feature of the Pippard coupling is that its integral over the Fermi surface vanishes

$$\int d\Omega_{\mathbf{k}} \Gamma_{\mu\nu}^{(P)}(\mathbf{k}) = 0 \tag{18.11}$$

where $\int d\Omega_{\mathbf{k}}$ denotes angular integration in the reciprocal space. Therefore in the zeroth approximation the impurities motion cancels the Coulomb effect and eliminates the scalar Fröhlich coupling between longitudinal phonons and the electron density. The remaining coupling is of

the quadrupole nature, described by the traceless symmetric tensor (18.10). This greatly reduces electron-phonon interactions in the "dirty" limit, $ql_{\text{el}} \ll 1$, in comparison with the scalar Fröhlich coupling.

On the bright side, it predicts almost equal coupling of electrons with the longwavelength longitudinal and transversal phonons (see the following discussion) the feature that is routinely observed experimentally. The precise cancellation of the scalar coupling, expressed in Eq. (18.11), is not a law of nature. It is a consequence of the assumed perfect screening and the impurities rigidly following the lattice displacements. If either of these assumptions is not fulfilled, some degree of the scalar Fröhlich coupling remains, significantly enhancing interactions with the longitudinal phonons.

The most straightforward way to derive Eqs. (18.9), (18.10) [407, 409] is by performing a unitary transformation, which yields a Hamiltonian in the co-moving reference frame, where the impurity potential is static. Alternative ways maybe found in Refs. [410, 411, 412]. We shall not repeat these derivations here. Instead, we accept Eqs. (18.9), (18.10) as a phenomenological starting point and derive an effective nonlinear sigma model which incorporates electron-phonon interaction in the Pippard-Tsuneto-Schmid form. Problem 18.8.4 includes impurities motion in the sigma-model from the first principles and shows that it leads to the same result. This provides an indirect justification for the microscopic vertex in the form of Eqs. (18.9), (18.10).

13.6.3 18.3 Nonlinear Sigma-Model for Electron-Phonon Interactions

Following Section 14.2 we now perform the averaging over the static disorder and introduce the time nonlocal matrix field $\hat{Q}_{t,\nu}(\mathbf{r})$ to split emerging four-fermion term. The resulting action, including electron-phonon coupling, Eqs. (18.9), (18.10), is now quadratic in the fermionic fields, which may be integrated out in the usual way, leading to (cf. Eq. (14.21)):

$$iS[\hat{Q}, \hat{\mathbf{u}}] = -\frac{\pi v}{4\tau} \text{Tr} \{ \hat{Q}^2 \} + \text{Tr} \ln \left[\hat{G}^{-1} + \frac{i}{2\tau_{\text{el}}} \hat{Q} + \Gamma_{\mu\nu}^{(P)} \partial^\mu \hat{u}^\nu \right] \quad (18.12)$$

where $\hat{G}^{-1}$ is the free fermion inverse Green function (10.36), $\hat{G}^{-1} = i\partial_t + \nabla_{\mathbf{r}}^2/2m + \mu \approx i\partial_t + i\mathbf{v}_F \nabla_{\mathbf{r}}$. The Keldysh matrix of lattice displacements has the standard form $\hat{\mathbf{u}} = \mathbf{u}^\alpha \hat{\gamma}^\alpha$, where $\alpha = cl, q$ and $\hat{\gamma}^{cl} = \hat{\sigma}_0, \hat{\gamma}^q = \hat{\sigma}_1$ are the two vertex matrices in the fermionic Keldysh space.

The soft diffusive modes of the action are described by the manifold $\hat{Q}^2 = \hat{1}$ and therefore one can write $\hat{Q} = \hat{\mathcal{R}}^{-1} \circ \hat{\Lambda} \circ \hat{\mathcal{R}}$, Eq. (14.27), where $\hat{\Lambda}$ is the fermionic Green function at coinciding spatial points, Eq. (14.25). One then introduces impurity-dressed Green function $\hat{\mathcal{G}}^{-1} = \hat{G}^{-1} + \frac{i}{2\tau_{\text{el}}} \hat{\Lambda}$ and rewrites the action (18.12) as (cf. Eq. (14.32))

$$iS[\hat{Q}, \hat{\mathbf{u}}] = \text{Tr} \ln \left[\hat{1} + i\hat{\mathcal{G}}\hat{\mathcal{R}}\partial_t\hat{\mathcal{R}}^{-1} + i\hat{\mathcal{G}}\hat{\mathcal{R}}\mathbf{v}_F\nabla_{\mathbf{r}}\hat{\mathcal{R}}^{-1} + \hat{\mathcal{G}}\hat{\mathcal{R}}\Gamma_{\mu\nu}^{(P)}\partial^\mu \hat{u}^\nu \hat{\mathcal{R}}^{-1} \right] \quad (18.13)$$

Finally, one expands the logarithm here to the lowest nonvanishing orders. First, neglecting the electron-phonon Γ -term, one obtains the already familiar nonlinear sigma-model action, $iS[\hat{Q}]$, Eq. (14.33). Focusing now on the phonon-induced term, it is easy to see that the first order in Γ term vanishes upon integration over the fast fermionic momentum, $\mathbf{k}$, due to the relation (18.11), see footnote 5 in Chapter 14 following Eq. (14.32). It is this point, where the Pippard-Tsuneto-Schmid coupling, Eqs. (18.9), (18.10), is qualitatively different from the Fröhlich one (the latter would bring the first order $\text{Tr} \{ (\rho_0 \text{div} \hat{\mathbf{u}}) \hat{Q} \}$ term). Going to the second order in $\Gamma^{(P)}$, one finds

$$iS[\hat{Q}, \hat{\mathbf{u}}] = iS[\hat{Q}] - \frac{1}{2} \text{Tr} \left[\hat{\mathcal{G}}\hat{\mathcal{R}}\Gamma_{\mu\nu}^{(P)}\partial^\mu \hat{u}^\nu \hat{\mathcal{R}}^{-1} \hat{\mathcal{G}}\hat{\mathcal{R}}\Gamma_{\eta\lambda}^{(P)}\partial^\eta \hat{u}^\lambda \hat{\mathcal{R}}^{-1} \right]$$

We employ now Eq. (14.30) along with

$$\sum_{\mathbf{k}} \mathcal{G}^R(\mathbf{k}, \epsilon) \mathcal{G}^A(\mathbf{k}, \epsilon) = 2\pi v \tau_{\text{el}}; \quad \sum_{\mathbf{k}} \mathcal{G}^R(\mathbf{k}, \epsilon) k_\mu v_\nu \mathcal{G}^A(\mathbf{k}, \epsilon) = \frac{2\pi v k_F v_F \tau_{\text{el}}}{d} \delta_{\mu\nu};$$

$$\sum_{\mathbf{k}} \mathcal{G}^R(\mathbf{k}, \epsilon) k_\mu v_\nu \mathcal{G}^A(\mathbf{k}, \epsilon) k_\eta v_\lambda = \frac{2\pi v k_F^2 v_F^2 \tau_{\text{el}}}{d(d+2)} (\delta_{\mu\nu} \delta_{\eta\lambda} + \delta_{\mu\eta} \delta_{\nu\lambda} + \delta_{\mu\lambda} \delta_{\nu\eta}),$$

to finally find

$$iS[\hat{Q}, \hat{\mathbf{u}}] = iS[\hat{Q}] + \frac{\pi v k_F^2 D}{4} \text{Tr} \left\{ [\hat{Q}, \partial^\mu \hat{u}^\nu] [\hat{Q}, \partial^\eta \hat{u}^\lambda] \right\} \Upsilon_{\mu\nu, \eta\lambda} \quad (18.14)$$

where $[\hat{Q}, \partial^\mu \hat{u}^\nu] = \hat{Q}_{tt'}(\mathbf{r}) \partial^\mu \hat{u}_{\mathbf{r}, t'}^\nu - \partial^\mu \hat{u}_{\mathbf{r}, t}^\nu \hat{Q}_{tt'}(\mathbf{r})$ and $D = v_F^2 \tau_{\text{el}}/d$ is the diffusion constant,

$$\Upsilon_{\mu\nu, \eta\lambda} \equiv \frac{1}{d+2} \left[\delta_{\mu\eta} \delta_{\nu\lambda} + \delta_{\mu\lambda} \delta_{\nu\eta} - \frac{2}{d} \delta_{\mu\nu} \delta_{\eta\lambda} \right] \quad (18.15)$$

Notice that, due to the symmetry of this tensor with respect to $\mu \leftrightarrow \nu$ and $\eta \leftrightarrow \lambda$ permutations, one can rewrite the electron-phonon vertex (18.14) in terms of the linear strain tensor $\hat{\varepsilon}_{\mathbf{r}, t}^{\mu\nu} = (\partial^\mu \hat{u}_{\mathbf{r}, t}^\nu + \partial^\nu \hat{u}_{\mathbf{r}, t}^\mu)/2$:

$$iS[\hat{Q}, \hat{\varepsilon}] = iS[\hat{Q}] + \frac{\pi v k_F^2 D}{2(d+2)} \left[\text{Tr} \left\{ [\hat{Q}, \hat{\varepsilon}^{\mu\nu}] [\hat{Q}, \hat{\varepsilon}^{\nu\mu}] \right\} - \frac{1}{d} \text{Tr} \left\{ [\hat{Q}, \hat{\varepsilon}^{\mu\mu}] [\hat{Q}, \hat{\varepsilon}^{\nu\nu}] \right\} \right]. \quad (18.16)$$

The spatially local, second-order in the lattice displacement, $\mathbf{u}$, vertex (18.14), or (18.16) is the leading term describing interaction of phonons with the electronic degrees of freedom in disordered metals, in the $ql_{\text{el}} \ll 1$ limit.

The present derivation relies on the phenomenological electron-phonon coupling (18.9), (18.10). Problem 18.8.4 addresses how it may be systematically deduced from the phonon-displaced disorder potential $V_{\text{dis}}(\mathbf{r} + \mathbf{u}(\mathbf{r}, t))$. The scalar Fröhlich vertex, Eq. (18.8), leads to the linear in displacement vertex $S \propto \rho_0 \text{Tr}\{\text{div } \hat{\mathbf{u}} \hat{Q}\}$. Such a term is analogous to the scalar potential term in Eq. (14.48). Therefore, the electron-phonon kinetics with scalar Fröhlich interactions is very similar to the theory of electron-electron interactions, considered in Chapter 16. The only difference is that the electron-electron effective interaction $U_{\text{RPA}}(\mathbf{q}, \omega)$ is substituted by the longitudinal phonon propagator $q^\mu q^\nu D_{\nu\mu}(\mathbf{q}, \omega)$, Eq. (18.5). Such a theory was developed, for example, in Ref. [413]. It leads to the disorder-enhanced electron-phonon interaction effects, akin to the disorder-enhanced electron-electron interactions phenomena of Chapter 16. In the presence of the perfect screening the scalar term is absent, however, due to the traceless form of the Pippard-Tsuneto-Schmid electron-phonon vertex (18.10). In this case one has to resort to the quadratic quadrupole vertex (18.14), first derived in Ref. [414]. It leads to disorder-suppressed electron-phonon interactions effects, considered in Refs. [407, 408, 410, 411, 412, 414]. The sigma-model action (18.14) provides a compact way of deriving these results, which will be demonstrated in what follows.

13.6.4 18.4 Electron Kinetics in Normal Metals

To derive electron collision integral due to the electron-phonon interactions one first averages the action (18.14) over the fluctuations of the lattice displacements, $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$. With the help of Eq. (18.3) one obtains the collision action from Eq. (18.14):

$$i\langle S[\hat{Q}, \hat{\mathbf{u}}] \rangle_{\mathbf{u}} = iS[\hat{Q}] + iS_{\text{coll}}[\hat{Q}] \quad (18.17)$$

where

$$iS_{\text{coll}}[\hat{Q}] = \frac{\pi\nu k_F^2 D}{4} \sum_{\mathbf{q}, \omega} \text{Tr} \left\{ \hat{Q}_{\epsilon-\omega, \epsilon'-\omega} \hat{\gamma}^\alpha \hat{Q}_{\epsilon', \epsilon} \hat{\gamma}^\beta \right\} D_{\nu\lambda}^{\alpha\beta}(\mathbf{q}, \omega) q^\mu q^\eta \Upsilon_{\mu\nu, \eta\lambda}, \quad (18.18)$$

where the trace, Tr , operation involves Keldysh matrix structure along with the summation over ϵ and ϵ' . We now adopt the strategy of Sections 14.4 and 17.2, where the kinetic (Usadel) equation is identified as the stationary point condition for the $\hat{Q}$ -field, which stabilizes the action. We thus look for the matrix stationary point equation $\delta \langle S[\hat{Q}, \hat{\mathbf{u}}] \rangle_{\mathbf{u}} / \delta \hat{Q}_{\epsilon\epsilon}(\mathbf{r}) = 0$. As explained in Section 14.4, its Keldysh (1, 2) component constitutes the kinetic equation for the distribution function F_ϵ . This way one finds

$$\partial_t F_\epsilon - \nabla_{\mathbf{r}} [D \nabla_{\mathbf{r}} F_\epsilon] = I_{\text{coll}} [F_\epsilon(\mathbf{r}, t)] \quad (18.19)$$

where the electron-phonon collision integral is given by

$$I_{\text{coll}} [F_\epsilon(\mathbf{r}, t)] = \frac{1}{\pi v} \left(\frac{\delta i S_{\text{coll}}}{\delta \hat{Q}_{\epsilon\epsilon}(\mathbf{r})} \right) \Big|_{\hat{Q}=\hat{\Lambda}}^{(1,2)} \quad (18.20)$$

The variational derivative here ought to be restricted to the sigma-model target space, $\hat{Q}^2 = 1$. A simple way to ensure this is to use the $\hat{Q}$ -matrix parameterization $\hat{Q} = e^{-\hat{\mathcal{W}}/2} \hat{\Lambda} e^{\hat{\mathcal{W}}/2} \approx \hat{\Lambda} + \frac{1}{2}[\hat{\Lambda}, \hat{\mathcal{W}}]$ and expand the action (18.18) to the linear order in $\hat{\mathcal{W}}_{\epsilon\epsilon}$. Here $\hat{\mathcal{W}}$'s are infinitesimal generators of the symmetry transformations. This way one obtains

$$I_{\text{coll}} [F_\epsilon] = \frac{k_F^2 D}{4i} \sum_{\mathbf{q}, \epsilon'} \left[\hat{\gamma}^\beta \hat{\Lambda}_{\epsilon'} \hat{\gamma}^\alpha \hat{\Lambda}_\epsilon - \hat{\Lambda}_\epsilon \hat{\gamma}^\beta \hat{\Lambda}_{\epsilon'} \hat{\gamma}^\alpha \right]^{(1,2)} \times D_{\nu\lambda}^{\alpha\beta}(\mathbf{q}, \epsilon - \epsilon') q^\mu q^\eta \Upsilon_{\mu\nu, \eta\lambda} \quad (18.21)$$

We now employ the classical form of $\hat{\Lambda}_\epsilon$, Eq. (14.25), along with the vertex matrices, $\hat{\gamma}^{cl, q}$ to evaluate the Keldysh(1, 2) component (cf. with Eq. (16.51) for electron-electron interactions)

$$I_{\text{coll}} [F_\epsilon] = \sum_{\epsilon'} \mathcal{M}(\epsilon - \epsilon') [1 - F_\epsilon F_{\epsilon'} - B_{\epsilon-\epsilon'}(F_\epsilon - F_{\epsilon'})] \quad (18.22)$$

where the dimensionless phonon matrix element is given by

$$\mathcal{M}(\omega) = 2k_F^2 D \sum_{\mathbf{q}} \text{Im} [D_{\nu\lambda}^R(\mathbf{q}, \omega)] q^\mu q^\eta \Upsilon_{\mu\nu, \eta\lambda} = \mathcal{M}_l(\omega) + (d-1)\mathcal{M}_t(\omega) \quad (18.23)$$

with the superscripts $j = l, t$ denoting the one longitudinal and $(d-1)$ transversal modes. Employing Eqs. (18.3) and (18.15), one finds: ³

$$\mathcal{M}_j(\omega) = \frac{b_j \pi k_F^2 D}{\rho_m} \sum_{(\mp), \mathbf{q}} \frac{q^2}{\omega} \delta(\omega \mp v_j q) = \frac{b_j \pi \Omega_d k_F^2 D |\omega|^d \text{sign } \omega}{(2\pi)^d \rho_m v_j^{d+2}} \equiv \frac{|\omega|^d \text{sign } \omega}{\Theta_j^d} \quad (18.24)$$

where $\Omega_d = 2\pi^{d/2}/\Gamma(d/2)$ is the area of S_{d-1} unit sphere and the coefficients are given $b_t = 1/(d+2)$; $b_l = b_t(2d-2)/d$. The two characteristic energy scales $\Theta_{l,t}$ are defined through the last equality in (18.24).

Consider now a situation where the electrons are heated by an external radiation or a current. Due to the fast electron-electron relaxation they establish an almost thermal distribution with an elevated temperature, T_e , which may be significantly larger than the lattice temperature, T . To discuss the heat transfer between electron and phonon subsystems, define electronic

energy density as $E_e = \int d\epsilon \nu(\epsilon) \epsilon n_\epsilon$, where the fermionic occupation number, n_ϵ , is found from $F_\epsilon = 1 - 2n_\epsilon$. In a spatially uniform case one finds from the kinetic equation (18.19), $\partial_t E_e = -(\nu/2) \int d\epsilon \epsilon I_{\text{coll}}$, where we put $\nu(\epsilon) \approx \nu$, anticipating that the integral is localized near the Fermi energy (see the following discussion).

² Notice that the 1 in the square brackets on the right-hand side is kept for convenience. It is actually given by $(\Lambda_\epsilon^R - \Lambda_\epsilon^A) \sum_{\epsilon'} [\Lambda_{\epsilon'}^R D^R(\epsilon' - \epsilon) + \Lambda_{\epsilon'}^A D^A(\epsilon' - \epsilon)] = 0$, since it involves the energy integration of the sum of the retarded and advanced correlators, Eqs. (2.45) and (10.29). However, recalling that $\Lambda^{R(A)} = \pm 1$, one can formally write this expression as $\propto \sum_{\epsilon'} [D^R(\epsilon' - \epsilon) - D^A(\epsilon' - \epsilon)] \propto \sum_{\epsilon'} \text{Im} [D^R(\epsilon' - \epsilon)]$, resulting in the first term in the square brackets in Eq. (18.22).

³ Here we employed $q^\mu q^\nu \Upsilon_{\mu\nu, \eta\lambda} = q^2 [b_t \eta_{\nu\lambda}^{(t)} + b_l \eta_{\nu\lambda}^{(l)}]$ with $b_t = 1/(d+2)$; $b_l = b_t(2d-2)/d$ along with $\text{tr} \eta^{(t)} = d-1$ and $\text{tr} \eta^{(l)} = 1$.

We now use that in a state of partial equilibrium $1 - F_\epsilon F_{\epsilon'} = (F_\epsilon - F_{\epsilon'}) \coth \omega/2T_e$, where $\omega = \epsilon - \epsilon'$ and $B_{\epsilon-\epsilon'} = \coth \omega/2T$. Noticing also that $\int d\epsilon \epsilon (F_\epsilon - F_{\epsilon-\omega}) = \omega^2$, one finds, from Eqs. (18.22) and (18.24), [410, 411]

$$\partial_t E_e = v \int_0^\infty \frac{d\omega}{2\pi} \mathcal{M}(\omega) \omega^2 \left[n_B \left(\frac{\omega}{T} \right) - n_B \left(\frac{\omega}{T_e} \right) \right] = (T^{d+3} - T_e^{d+3}) \alpha_d v \sum_{j=1}^d \frac{1}{\Theta_j^d}, \quad (18.25)$$

where the bosonic occupation number is $n_B = (B_\omega - 1)/2 = (e^{\omega/T} - 1)^{-1}$ and $\alpha_3 = 4\pi^5/63$, $\alpha_2 = 12\zeta(5)/\pi \approx 3.96$, $\alpha_1 = \pi^3/30$. The j summation hereafter runs over one longitudinal mode and $d-1$ transversal ones.

Dynamics of electronic temperature relaxation is found as $\partial_t E_e = C(T_e) \partial_t T_e$, where the electronic specific heat is $C(T_e) = \partial E_e / \partial T_e = \frac{\pi^2}{3} \nu T_e$. This way, one obtains

$$\partial_t T_e = (T^{d+3} - T_e^{d+3}) \frac{3\alpha_d}{\hbar \pi^2 T_e} \sum_{j=1}^d \frac{1}{\Theta_j^d} \approx -T_e^{d+2} \frac{3\alpha_d}{\hbar \pi^2} \sum_{j=1}^d \frac{1}{\Theta_j^d}, \quad (18.26)$$

where in the last equality we took the limit $T_e \gg T$ and restored $\hbar$ to have proper dimensions. This leads to a characteristic relaxation time $\tau \propto \hbar \Theta_j^d / T_e^{d+1}$ and a slow power-law cooling $T_e(t) \sim t^{-1/(d+1)}$ at $t > \tau$. In the opposite limit when $\delta T = T_e - T \ll T$ one finds exponential equilibration, $\delta T(t) \propto e^{-t/\tau_E}$, with the energy relaxation rate [408]

$$\frac{\hbar}{\tau_E} = \frac{3\alpha_d(d+3)}{\pi^2} \left(\frac{1}{\Theta_t^d} + \frac{d-1}{\Theta_l^d} \right) T^{d+1}. \quad (18.27)$$

We found thus that the cooling rate of electrons in disordered metals decreases extremely fast at temperatures $T < \Theta_t < \Theta_l$. This can lead to spectacular effects due to an effective decoupling of electrons and the lattice, resulting in overheating of the electronic subsystem by an applied current [415].

To give an order of magnitude estimate consider aluminum with $\rho_m = 2.7 \text{ g/cm}^3$, $\epsilon_F = 11.7 \text{ eV}$ and $v_F = 1.7 \times 10^8 \text{ cm/s}$, $v_t = 3 \times 10^5 \text{ cm/s}$, $v_l = 6.4 \times 10^5 \text{ cm/s}$. Taking the elastic mean free path as $l_{\text{el}} = 100 \text{ nm}$, one obtains diffusion constant $D = 570 \text{ cm}^2/\text{s}$, and $\Theta_t = 10 \text{ K}$, while $\Theta_l = 35 \text{ K}$. The energy relaxation time is given by $\tau_E = 3(1 \text{ K}/T)^4 \mu\text{s}$. This may be compared with the electron-electron relaxation time, evaluated in Section 16.5. The latter scales as $\tau_{\text{ee}} = \hbar v (\hbar D / T)^{d/2}$. For our example of aluminum one finds $\tau_{\text{ee}} = 2.5(1 \text{ K}/T)^{3/2} \mu\text{s}$. Thus, for $T \gtrsim 1 \text{ K}$ the electron-phonon time is shorter, implying fast equilibration between electrons and the lattice. For smaller temperatures aluminum is superconducting, of course, requiring a separate consideration.

13.6.5 18.5 Kinetics of Quasiparticles in Superconductors

Quasiparticles in superconductors may be either thermal or non-equilibrium, excited by external circuit fluctuations, RF signal, or injected through, for example, a tunneling contact. They occupy states above the energy gap, $|\epsilon| > \Delta$. Such quasiparticles constitute a major source of decoherence in superconducting qubits [416, 417]. Understanding their thermalization rates is thus of primary importance for improving performance of prototypical quantum computers. At small temperature, $T \ll \Delta$, the quasiparticle concentration is small and therefore their mutual interactions are usually inconsequential. In this situation the dominant mechanism of the quasiparticles' thermalization is their interactions with the acoustic phonons.⁴

The beauty of the sigma-model description, presented in Section 18.3 is that it is immediately applicable to superconductors. One should only enlarge the dimensionality of the Q -matrix from the Keldysh to Keldysh $\otimes$ Nambu space, $\hat{Q} \rightarrow \tilde{Q}$ and introduce a factor of 1/2 in front of the action (18.12) to acknowledge Nambu doubling of the degrees of freedom. With these simple modifications Eqs. (18.14) and (18.18) hold, and one can employ them to describe kinetics of quasiparticle-phonon interactions. Following Section 17.2, one looks for the stationary point of the action (18.18), in particular its (1, 2) Keldysh component. The resulting equation is still a matrix in the Nambu space, which needs to be projected onto Nambu $\hat{\tau}_0$ and $\hat{\tau}_3$ components. This way, one obtains kinetic equations for the longitudinal (energy), F_L , and transversal (charge), F_T , components of the distribution function; see Sections 17.2 and 17.3. Without phonons the corresponding kinetic equations are given by Eqs. (17.27). Interactions with the acoustic phonons provide the collision terms. The latter directly follow from Eq. (18.21) by substituting the BCS form of the $\hat{\Lambda}$ matrix, Eqs. (17.14) and (17.15), multiplying it by $\hat{\tau}_0$ and $\hat{\tau}_3$ matrices and taking the trace over the Nambu space.

We use now the BCS Green functions, which are matrices in the Nambu space, Eq. (17.14), $\hat{\Lambda}_\epsilon^R = \hat{\tau}_3 u_\epsilon + i\hat{\tau}_2 v_\epsilon$ and $\hat{\Lambda}_\epsilon^A = -\hat{\tau}_3 u_\epsilon^* - i\hat{\tau}_2 v_\epsilon^*$, where the coherence factors are given by Eq. (17.15) and obey $u_\epsilon^2 - v_\epsilon^2 = 1$. The Keldysh component is given by $\hat{\Lambda}^K = \hat{\Lambda}^R \hat{F} - \hat{F} \hat{\Lambda}^A$, where $\hat{F}$ is the distribution matrix in the Nambu space, which may be written as $\hat{F} = F_{L,\epsilon}(\mathbf{r}, t)\hat{\tau}_0 + F_{T,\epsilon}(\mathbf{r}, t)\hat{\tau}_3$, Eq. (17.21).⁵ To keep the presentation compact we first assume that there is no charge imbalance, that is, $F_T = 0$ and derive the kinetic equation for the longitudinal component. To this end we project the (1, 2) Keldysh component of the Usadel equation onto the $\hat{\tau}_0$ Nambu component: $\text{Tr}_N [\hat{\tau}_0 \delta \langle S[\tilde{Q}, \mathbf{u}] \rangle_{\mathbf{u}} / \delta \tilde{Q}_{\epsilon\epsilon} |_{\text{K}}^{(1,2)}] = 0$. This way, we find:

$$\frac{v(\epsilon)}{v} \partial_t F_{L,\epsilon} - \nabla_{\mathbf{r}} [D \nabla_{\mathbf{r}} F_{L,\epsilon}] = I_{\text{coll}} [F_L] \quad (18.28)$$

where $v(\epsilon) = v \text{Re } u_\epsilon$ is the BCS density of states, Eq. (17.18). The collision integral is given by Eq. (18.21), where the superconducting $\hat{\Lambda}$ is used and the trace is taken over the Nambu space. A straightforward calculation yields

$$I_{\text{coll}} [F_L] = \sum_{\epsilon'} \mathcal{M}(\epsilon, \epsilon') [1 - F_{L,\epsilon} F_{L,\epsilon'} - B_{\epsilon-\epsilon'} (F_{L,\epsilon} - F_{L,\epsilon'})] \quad (18.29)$$

where the matrix element is, [410, 414],

$$\begin{aligned} \mathcal{M}(\epsilon, \epsilon') &= \mathcal{M}(\epsilon - \epsilon') \\ [\text{Re } u_\epsilon \text{Re } u_{\epsilon'} - \text{Re } v_\epsilon \text{Re } v_{\epsilon'}] &= \mathcal{M}(\epsilon - \epsilon') \frac{|\epsilon\epsilon'| - \Delta^2 \text{sign}(\epsilon\epsilon')}{\sqrt{\epsilon^2 - \Delta^2} \sqrt{\epsilon'^2 - \Delta^2}} \end{aligned} \quad (18.30)$$

⁴ Indeed, the optical phonon frequency, being of the order of the Debye frequency, ω_D , is much larger than the superconducting energy gap, Δ , making them ineffective for relaxation of low-energy quasiparticles.

⁵ In equilibrium $F_{L,\epsilon} = \tanh(\epsilon/2T)$ and $F_{T,\epsilon} = 0$.

and $\mathcal{M}(\epsilon - \epsilon')$ is the normal state matrix element, Eq. (18.23). For BCS superconductors $\text{Re } u_{\epsilon'} = \text{Re } v_{\epsilon'} = 0$ for $|\epsilon'| < \Delta$, Eq. (17.15). This implies that the collision integral exists only if both initial and final state energies exceed the gap, Δ , that is, $|\epsilon|, |\epsilon'| > \Delta$. This is to be expected, since there are no quasiparticle states below energy Δ .

Consider relaxation of a quasiparticle initially residing at some energy $\epsilon > \Delta$. After absorbing or emitting an acoustic phonon, it acquires a final energy ϵ' with the rate given by Eq. (18.29). It is convenient to split the energy integration in this equation into the two regions $\epsilon' > \Delta$ and $\epsilon' < -\Delta$. The former processes represent scattering of quasiparticles without changing their total number. The latter leads to the quasiparticle recombination, resulting in decrease of their population. As shown in what follows, the recombination process is very slow, allowing it to reach a state of partial thermal equilibrium within the band of quasiparticles, $\epsilon > \Delta$, and quasiholes, $\epsilon < -\Delta$, without equilibrating between the two bands. To discuss such partially equilibrated state, notice that, if both $\epsilon, \epsilon' > \Delta$, the collision integral (18.29) is nullified by $F_{L,\epsilon>\Delta} = \tanh(\epsilon - \mu^*)/2T$, where T is the lattice temperature and $\mu^* < \Delta$ is an effective chemical potential residing below the bottom of the quasiparticle band. Similarly, if $\epsilon, \epsilon' < -\Delta$, the collision integral (18.29) is nullified by $F_{L,\epsilon<-\Delta} = \tanh(\epsilon + \mu^*)/2T$, rendering $F_{L,\epsilon}$ to be the odd function of energy, as it should.

The effective chemical potential, μ^* , is determined by the quasiparticle density, given by $\rho_{\text{qp}} = \int_{\Delta}^{\infty} d\epsilon \nu(\epsilon) n_{\text{qp}}(\epsilon)$, where the quasiparticle occupation number is found from $F_{L,\epsilon} = 1 - 2n_{\text{qp}}(\epsilon)$. In the partially equilibrated state with $T \ll \Delta - \mu^*$, one finds

$$\rho_{\text{qp}} \approx v \int_{\Delta}^{\infty} d\epsilon \frac{\epsilon}{\sqrt{\epsilon^2 - \Delta^2}} e^{-(\epsilon - \mu^*)/T} = v \sqrt{\frac{\pi \Delta T}{2}} e^{-(\Delta - \mu^*)/T} \quad (18.31)$$

The effective chemical potential, $\mu^*(t)$, is a slow function of time, which reaches zero in true equilibrium. To describe dynamics of the quasiparticle density, one substitutes it into the kinetic equation (18.28), where the final energy integration is restricted to $\epsilon' < -\Delta$:

$$\partial_t \rho_{\text{qp}} = v \int_{\Delta}^{\infty} d\epsilon \int_{-\infty}^{-\Delta} \frac{d\epsilon'}{2\pi} \mathcal{M}(\epsilon, \epsilon') (F_{L,\epsilon} - F_{L,\epsilon'}) \left[n_B\left(\frac{\epsilon - \epsilon'}{T}\right) - n_B\left(\frac{\epsilon - \epsilon' - 2\mu^*}{T}\right) \right],$$

where we have used the fact, that in the state of partial equilibrium with $\epsilon > \Delta$ and $\epsilon' < -\Delta$, $1 - F_{L,\epsilon} F_{L,\epsilon'} = (F_{L,\epsilon} - F_{L,\epsilon'}) \coth((\epsilon - \epsilon' - 2\mu^*)/2T)$. For $T \ll \Delta - \mu^*$ the integrals here are dominated by the near vicinities of $\pm\Delta$, correspondingly, where $F_{L,\epsilon} \approx 1$ and $F_{L,\epsilon'} \approx -1$. This way one finds

$$\partial_t \rho_{\text{qp}} = v \mathcal{M}(2\Delta) \Delta T \left[e^{-2\Delta/T} - e^{-2(\Delta - \mu^*)/T} \right] \approx -\rho_{\text{qp}}^2 \frac{2}{\pi v} \sum_{j=1}^d \left(\frac{2\Delta}{\Theta_j} \right)^d, \quad (18.32)$$

where in the last approximate equality we assumed $T \ll \mu^* < \Delta$ and used Eqs. (18.24) and (18.31). The fact that $\partial_t \rho_{\text{qp}} \propto -\rho_{\text{qp}}^2$ reflects the binary collision nature of the recombination process. Indeed, a quasiparticle needs to "collide" (through the phonon exchange) with a quasihole for the recombination to occur. The recombination rate is thus proportional to the product of their densities. Equation (18.32) predicts that after a dynamical perturbation, creating excess quasiparticles, the quasiparticle concentration is given by the universal law,

$$\rho_{\text{qp}}(t) = \left(\frac{\Theta_t}{2\Delta} \right)^d \frac{\pi \hbar v}{2(d-1)t} = \frac{\rho_0}{d(d-1)} \left(\frac{\Theta_t}{2\Delta} \right)^d \frac{\pi \hbar}{\epsilon_F t} \quad (18.33)$$

where ρ_0 is the total electron density and we employed Eq. (18.6). This is a remarkable result, which shows that the concentration of quasiparticles does not depend either on lattice temperature (provided $T \ll \Delta$) or on an initial quasiparticle concentration. It only depends on material parameters and time, t , the system is allowed to equilibrate after a kick. The t^{-1} algebraic decay persists up until an exponentially long (in $e^{\Delta/T}$) time, when the quasiparticle

concentration approaches its equilibrium value $\rho_{\text{qp}} \sim \rho_0 \sqrt{\Delta T / \epsilon_F^2} e^{-\Delta/T}$; compare Eq. (18.31) with $\mu^* = 0$.

Indeed, the presence of non-equilibrium quasiparticles has been detected in qubits [418, 419], where time t is limited by the coherence time and can't be extended indefinitely. To eliminate these undesirable long-lived quasiparticles, the qubit designs employ magnetic vortex [419, 420], or normal metal [421] traps and gap engineering by variation of the film thickness [422]. The basic idea is to incorporate regions with a reduced superconducting gap near the qubit. The non-equilibrium quasiparticles diffusing to these regions and partially equilibrating down to the local gap, appear to be trapped and do not influence the qubit operation. To evaluate efficiency of, for example, a vortex trap, one needs to extend the electron-phonon collision integral treatment to superconductors with the broken time reversal symmetry and suppressed gap [414], but we do not go into details here.

Before concluding this section, we briefly discuss relaxation of the charge imbalance, described by the even in energy, $F_{T,\epsilon}$, component of the distribution function. Projecting the (1, 2) Keldysh component of the Usadel equation onto the $\hat{\tau}_3$ Nambu component, $\text{Tr}_N [\hat{\tau}_3 \delta \langle S[\tilde{Q}, \mathbf{u}] \rangle_{\mathbf{u}} / \delta \tilde{Q}_{\epsilon\epsilon} |_{\text{K}}^{(1,2)}] = 0$, one finds

$$\frac{v(\epsilon)}{v} \partial_t F_{T,\epsilon} - \nabla_{\mathbf{r}} [\mathcal{D}_T(\epsilon) \nabla_{\mathbf{r}} F_{T,\epsilon}] = \tilde{I}_{\text{coll}} [F_T, F_L] \quad (18.34)$$

where $\mathcal{D}_T(\epsilon) = D\epsilon^2 / (\epsilon^2 - \Delta^2)$, Eq. (17.28), is the charge diffusion coefficient. The corresponding collision integral is given by

$$\tilde{I}_{\text{coll}} [F_T, F_L] = \sum_{\epsilon'} \tilde{\mathcal{M}}(\epsilon, \epsilon') [-F_{L,\epsilon} F_{T,\epsilon'} - F_{T,\epsilon} F_{L,\epsilon'} - B_{\epsilon-\epsilon'} (F_{T,\epsilon} - F_{T,\epsilon'})], \quad (18.35)$$

where $|\epsilon|, |\epsilon'| > \Delta$ and the matrix element is

$$\tilde{\mathcal{M}}(\epsilon, \epsilon') = \mathcal{M}(\epsilon - \epsilon') \text{Re } u_{\epsilon} \text{Re } u_{\epsilon'} = \mathcal{M}(\epsilon - \epsilon') \frac{v(\epsilon)}{v} \frac{v(\epsilon')}{v} \quad (18.36)$$

where $\mathcal{M}(\epsilon - \epsilon')$ is the normal state matrix element, Eq. (18.23). Using the fact that $F_{L,\epsilon}, B_{\omega}$ are odd and $\tilde{\mathcal{M}}(\epsilon, \epsilon')$ is odd under permutation of the two arguments, one can show conservation of the total imbalance $\partial_t \mathcal{Q} = 0$, where $\mathcal{Q} \equiv \int d\epsilon \nu(\epsilon) F_{T,\epsilon}$. This means that the electron-phonon collisions do not induce a gap in the spectrum of Carlson-Goldman transverse collective mode, Section 17.5. Indeed, conservation of the $\mathbf{q} = 0$ component of the imbalance implies $\omega_{\text{CG}}(0) = 0$, Eq. (17.64). Moreover, one can check that if both $F_{L,\epsilon}$ and B_{ω} are given by their equilibrium values, then $F_{T,\epsilon} \propto \cosh^{-2}(\epsilon/2T)$ nullifies the collision integral (18.35), [377]. It represents, therefore, the (quasi)stationary form of the transverse distribution function. It may be associated with a shift of the quasiparticle chemical potential with respect to the one of the condensate, $F_{T,\epsilon} = \delta\mu \partial_{\mu} F_{L,\epsilon} |_{\mu=0}$. Such chemical potential mismatch serves as a voltage and, according to the Josephson relation, leads to a steady-state rotation of the phase of the order parameter. One can see an indication of this looking at the self-consistency relation, Eq. (17.16), where F_T induces an imaginary correction (i.e. a phase) to an otherwise real Δ . Such steady-state phase rotation due to the conserved charge imbalance exists only in a completely isolated piece of a superconductor. Any coupling to leads or external circuitry results in equilibration of the imbalance and dampening of the phase rotation [377].

13.6.6 18.6 Phonon Kinetics

So far we have been tacitly assuming that the phonon modes are in thermal equilibrium at the lattice temperature T and considered kinetics of the electronic (and quasiparticle) subsystem. Here we broaden the scope, allowing for the phonon modes to be away from equilibrium,

describing them with the distribution functions $B_{\mathbf{q}}^{(j)}$. Our aim thus is to derive a kinetic equation for real bosonic fields, discussed in Section 6.7.

Its collision integral is expressed through the components of the phonon self-energy matrix $\hat{\Sigma}(\mathbf{q}, \omega)$. The latter may be directly read out from the electronphonon interaction vertex (18.14), (18.15). To this end we disregard fluctuations of the $\hat{Q}_{t,t'}$ -matrix degrees of freedom and set them to the metallic saddle point, $\hat{Q}_{t,t'} \rightarrow \hat{\Lambda}_{t-t'} \rightarrow \hat{\Lambda}_{\epsilon}$, where we use time translation invariance and, in the last transition, the Fourier transform. With this substitution the action (18.14) acquires the following form:

$$iS[\hat{\Lambda}, \hat{\mathbf{u}}] = \frac{\pi v k_F^2 D}{2} \sum_{\mathbf{q}, \omega, j} \bar{u}_{\mathbf{q}, \omega}^{v, \alpha} \text{Tr} \left\{ \hat{\Lambda}_{\epsilon - \omega} \hat{\gamma}^{\alpha} \hat{\Lambda}_{\epsilon} \hat{\gamma}^{\beta} - \hat{\gamma}^{\alpha} \hat{\gamma}^{\beta} \right\} b_j q^2 \eta_{v\lambda}^{(j)} u_{\mathbf{q}, \omega}^{\lambda, \beta}, \quad (18.37)$$

where we used $q^{\mu} q^{\eta} \Upsilon_{\mu\nu, \eta\lambda} = q^2 [b_t \eta_{\nu\lambda}^{(t)} + b_l \eta_{\nu\lambda}^{(l)}]$, with the coefficients b_j defined after Eq. (18.24). The Tr operation implies trace over the Keldysh (and possibly Nambu) matrix structure along with summation over ϵ . This action is quadratic in lattice displacements, $\hat{\mathbf{u}}_{\mathbf{q}, \omega}$, and therefore constitutes the self-energy correction to the bare phonon action (18.1). Employing the normal metal form of the $\hat{\Lambda}$ matrices, Eq. (14.25), one finds for the retarded, advanced, and Keldysh components of the phonon self-energy. (Also notice that $\alpha = \beta = cl$ component is zero, as it must.)

$$\Sigma_j^{R(A)}(\mathbf{q}, \omega) = \mp i \frac{2\pi v k_F^2 D}{\rho_m} b_j q^2 \sum_{\epsilon} (F_{\epsilon} - F_{\epsilon - \omega}) \quad (18.38a)$$

$$\Sigma_j^K(\mathbf{q}, \omega) = -2i \frac{2\pi v k_F^2 D}{\rho_m} b_j q^2 \sum_{\epsilon} (1 - F_{\epsilon} F_{\epsilon - \omega}) \quad (18.38b)$$

where we normalized the self-energy by material mass density, ρ_m , to have the latter as a common factor in front of the phonon propagator (18.3). Employing now Eqs. (6.54) and (6.55), one obtains the following kinetic equation (mind the change in notations relative to Eq. (6.54); we now call boson distribution B instead of F , reserving F for the fermion distribution):

$$\partial_t B_{\mathbf{q}}^{(j)} + \mathbf{v}_{j\mathbf{q}} \nabla_{\mathbf{r}} B_{\mathbf{q}}^{(j)} = v \frac{b_j \pi k_F^2 D}{\rho_m} \frac{q^2}{\omega_{\mathbf{q}}^{(j)}} \sum_{\epsilon} \left[1 - F_{\epsilon} F_{\epsilon - \omega_{\mathbf{q}}^{(j)}} - B_{\mathbf{q}}^{(j)} (F_{\epsilon} - F_{\epsilon - \omega_{\mathbf{q}}^{(j)}}) \right] \quad (18.39)$$

where $\mathbf{v}_{j\mathbf{q}} = \nabla_{\mathbf{q}} \omega_{\mathbf{q}}^{(j)} = v_j \mathbf{q} / q$. For non-equilibrium phonons with the distribution function depending on the quantum numbers j and $\mathbf{q}$, instead of the energy $\omega = \omega_{\mathbf{q}}^{(j)}$, one should modify the electronic kinetic equation (18.19), (18.22) as

$$\partial_t F_{\epsilon} - \nabla_{\mathbf{r}} [D \nabla_{\mathbf{r}} F_{\epsilon}] = \frac{k_F^2 D}{2\rho_m} \sum_{j=1}^d b_j \sum_{(\mp), \mathbf{q}} \frac{\pm q^2}{\omega_{\mathbf{q}}^{(j)}} \left[1 - F_{\epsilon} F_{\epsilon \mp \omega_{\mathbf{q}}^{(j)}} - B_{\mathbf{q}}^{(j)} (F_{\epsilon} - F_{\epsilon \mp \omega_{\mathbf{q}}^{(j)}}) \right]. \quad (18.40)$$

Notice that the electronic distribution function, F_{ϵ} , still depends only on energy, because of the "dirty" limit constraint, that is $\omega \ll v_j / l_{\text{el}} = v_j / v_F \tau_{\text{el}} \ll 1 / \tau_{\text{el}}$. This means that electrons equilibrate fast over momentum directions due to the elastic scattering. This leaves their energy as the only relevant parameter. The closely related observation is that, in our treatment, phonons propagate ballistically, while electrons do so diffusively. The coupled kinetic equations (18.39) and (18.40) should be solved together to find electron and phonon distribution functions in a truly non-equilibrium setup.

Here we restrict ourselves to a sanity check demonstrating that the total energy of electron and phonon subsystems is conserved. For simplicity we focus on a spatially uniform and momentum isotropic case, where the phonon distribution function depends on $\omega_{\mathbf{q}}^{(j)} = \omega$ and the coupled kinetic equations take the following form:

$$\partial_t B_{\omega}^{(j)} = v \frac{b_j \pi k_F^2 D}{\rho_m v_j^2} \omega \sum_{\epsilon} \left[1 - F_{\epsilon} F_{\epsilon-\omega} - B_{\omega}^{(j)} (F_{\epsilon} - F_{\epsilon-\omega}) \right] \quad (18.41)$$

$$\partial_t F_{\epsilon} = \sum_{j=1}^d \sum_{\omega} \mathcal{M}_j(\omega) \left[1 - F_{\epsilon} F_{\epsilon-\omega} - B_{\omega}^{(j)} (F_{\epsilon} - F_{\epsilon-\omega}) \right] \quad (18.42)$$

where odd in energy electron-phonon matrix elements, $\mathcal{M}_j(\omega)$, are given by Eq. (18.24). The electron energy was already discussed in Section 18.4, Eq. (18.25). It is given by $E_e = \int d\epsilon \nu(\epsilon) \epsilon n_{\epsilon}$, where the fermionic occupation number, n_{ϵ} , is found from $F_{\epsilon} = 1 - 2n_{\epsilon}$. The phonon energy density is given by

$$E_{\text{ph}} = \sum_{j=1}^d \sum_{\mathbf{q}} \omega_{\mathbf{q}}^{(j)} n_B^{(j)}(\omega_{\mathbf{q}}^{(j)}) = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^d \int_0^{\infty} d\omega \omega N_j(\omega) (B_{\omega}^{(j)} - 1) \quad (18.43)$$

where $N_j(\omega) = \sum_{\mathbf{q}} \delta(\omega - \omega_{\mathbf{q}}^{(j)}) = |\omega|^{d-1} \Omega_d / (2\pi v_j)^d$ is the density of states of transversal and longitudinal acoustic phonons and $n_B^{(j)}(\omega) = (B_{\omega}^{(j)} - 1) / 2$ is the boson occupation number. One thus finds

$$\partial_t E_{\text{ph}} = \frac{1}{4} \int d\omega \omega \sum_{j=1}^d N_j(\omega) \partial_t B_{\omega}^{(j)}; \quad \partial_t E_e = -\frac{v}{2} \int d\epsilon \epsilon \partial_t F_{\epsilon} \quad (18.44)$$

where we employed that $B_{\omega}^{(j)}$ is an odd function of ω to extend the integration to negative infinity. One now uses the kinetic equations (18.41) and (18.42) along with the matrix elements (18.24) to observe ⁶ that the total energy is indeed conserved: $\partial_t E_{\text{ph}} + \partial_t E_e = 0$.

13.6.7 18.7 Ultrasound Attenuation

Probably the simplest and most experimentally relevant problem in phonon kinetics is attenuation of an ultrasound beam by its interactions with the electrons. Those lead to conversion of the sound energy to electron-hole pairs. For a high-intensity acoustic beam one may use kinetic equation (18.39) to calculate evolution of phonon occupation numbers along the propagation direction. Here we restrict ourselves with the linear response approach, where the damping of a certain phonon mode labeled by j and $\mathbf{q}$ is given by the imaginary part of its retarded self-energy, $\Sigma_j^R(\mathbf{q}, \omega)$.

For normal metals one can immediately use Eq. (18.38a). To this end notice that the energy sum there $\sum_{\epsilon} (F_{\epsilon} - F_{\epsilon-\omega}) = \omega / \pi$, independently on a specific form of the electronic distribution. One thus finds

$$\Sigma_j^R(\mathbf{q}, \omega) = -i \frac{2\nu k_F^2 D}{\rho_m} b_j q^2 \omega \equiv -i 2\gamma_q^{(j)} \omega \quad (18.45)$$

where the phonon scattering rate is

$$\gamma_q^{(j)} = b_j \frac{v k_F^2 D q^2}{\rho_m} \sim \frac{m}{M} D q^2 \quad (18.46)$$

where m/M is the ratio of electron to ion masses and D is electron diffusion coefficient. This form of the self-energy implies that the $\omega^2 - (\omega_{\mathbf{q}}^{(j)})^2$ in the bare phonon action (18.1) is replaced by $\omega^2 + i\gamma_q^{(j)}\omega - (\omega_{\mathbf{q}}^{(j)})^2$. This means that on the semiclassical level the phonon displacements obey the Newtonian equation with friction ⁷

$$\ddot{\mathbf{u}} = -(\omega_{\mathbf{q}}^{(j)})^2 \mathbf{u} - 2\gamma_q^{(j)} \dot{\mathbf{u}}. \quad (18.47)$$

For long wavelength, that is, small q , the oscillators are underdamped, $\gamma_q^{(j)} \ll \omega_{\mathbf{q}}^{(j)}$. Thus the ultrasound propagates in metals with the characteristic inverse decay length $\xi_q^{-1} = \gamma_q/v_j \sim v_j \tau_{\text{el}} q^2$, where we used that $v_F^2 \sim v_j^2 M/m$. Notice that in more disordered materials (i.e. with shorter electronic τ_{el}) the sound propagates better (longer ξ_q). This is, of course, due to the Pippard effect of almost perfect compensation of the induced lattice charge by electrons dragged along with moving impurities. Also notice that the sound attenuation length is independent of the lattice temperature. As we will see, the situation is very different in superconductors, where the attenuation length grows rapidly as temperature is decreased.

We turn now to BCS superconductors. Due to the gap in the quasiparticle spectrum, one expects suppressed sound absorption for $\omega < 2\Delta$, that is, $q < 2\Delta/v_j$. To quantify this effect we go back to the effective phonon action (18.37) and use the superconducting saddle point for the electronic degrees of freedom, $\hat{\Lambda} \rightarrow \check{\Lambda}$ (along with an extra overall factor 1/2 to compensate for Nambu doubling). Performing the trace over electronic Keldysh subspace we find for the retarded, that is, $\alpha = q; \beta = cl$, component of the phonon self-energy: $\text{Tr} \{ \check{\Lambda}_{\epsilon-\omega} \hat{\gamma}^q \check{\Lambda}_{\epsilon} \hat{\gamma}^{cl} \} = \text{Tr}_N \{ \hat{\Lambda}_{\epsilon-\omega}^K \hat{\Lambda}_{\epsilon}^R + \hat{\Lambda}_{\epsilon-\omega}^A \hat{\Lambda}_{\epsilon}^K \}$. We substitute now the BCS Green functions in the Nambu space, Eq. (17.14), $\hat{\Lambda}_{\epsilon}^R = \hat{\tau}_3 u_{\epsilon} + i\hat{\tau}_2 v_{\epsilon}$, $\hat{\Lambda}_{\epsilon}^A = -\hat{\tau}_3 u_{\epsilon}^* - i\hat{\tau}_2 v_{\epsilon}^*$, and $\hat{\Lambda}^K = \hat{\Lambda}^R \hat{F} - \hat{F} \hat{\Lambda}^A$, where $\hat{F} = F_{L,\epsilon} \hat{\tau}_0 + F_{T,\epsilon} \hat{\tau}_3$, Eq. (17.21), to find [407] ⁸

$$\begin{aligned} \text{Im} \Sigma_j^R(\mathbf{q}, \omega) &= -\frac{2\pi v k_F^2 D}{\rho_m} b_j q^2 \sum_{\epsilon} (F_{L,\epsilon} - F_{L,\epsilon-\omega}) [\text{Re} u_{\epsilon} \text{Re} u_{\epsilon-\omega} - \text{Re} v_{\epsilon} \text{Re} v_{\epsilon-\omega}] \\ &= -\frac{\gamma_{\mathbf{q}}^{(j)}}{2} \int d\epsilon (F_{L,\epsilon} - F_{L,\epsilon-\omega}) \frac{|\epsilon(\epsilon - \omega)| - \Delta^2 \text{sign} \epsilon(\epsilon - \omega)}{\sqrt{\epsilon^2 - \Delta^2} \sqrt{(\epsilon - \omega)^2 - \Delta^2}}, \end{aligned} \quad (18.48)$$

where the energy integral runs over the region $|\epsilon| > \Delta$ and $|\epsilon - \omega| > \Delta$. Notice that the charge imbalance component of the distribution, F_T , does not show up in this expression.

The integral in Eq. (18.48) is most readily analyzed in the limit $\omega \ll T, \Delta$. One may expand then to linear order in ω and use the fact that the fraction tends to 1, as $\omega \rightarrow 0$, to find $-\text{Im} \Sigma_j^R = 2\gamma_q^{(j)} \int_{\Delta}^{\infty} d\epsilon \partial_{\epsilon} F_{L,\epsilon} \omega = 2\gamma_q^{(j)} (1 - F_{L,\Delta}) \omega$. Finally one obtains for the low-frequency ultrasound attenuation rate in superconductors:

$$\gamma_q^{(j)\text{SC}}(T) = 2\gamma_q^{(j)} n_{\Delta}, \quad (18.49)$$

⁰⁶ To this end we change the integration variable from ω to $\epsilon' = \epsilon - \omega$ and use the expression for the phonon density of states along with Eq. (18.24) to find

$$\partial_t E_{\text{ph}} = \frac{v}{4} \sum_{j=1}^d \iint \frac{d\epsilon d\epsilon'}{2\pi} (\epsilon - \epsilon') \mathcal{M}_j(\epsilon - \epsilon') [1 - F_{\epsilon} F_{\epsilon'} - B_{\epsilon-\epsilon'}^{(j)} (F_{\epsilon} - F_{\epsilon'})]$$

Using the fact that $\mathcal{M}_j(\epsilon - \epsilon')$ is odd, while the expression in the square brackets is even upon exchange of ϵ and ϵ' , one can replace $(\epsilon - \epsilon')$ by 2ϵ . This brings it exactly to the form $-\partial_t E_{\epsilon}$.

⁷ The Keldysh component of the self-energy leads to the stochastic Langevin force acting on the oscillator. If electrons are in the thermal state, the latter obeys the fluctuation-dissipation relation.

where $\gamma_q^{(j)}$ is the corresponding normal state temperature-independent attenuation and $n_\Delta = (1 - F_{L,\Delta})/2$ is the quasiparticle occupation number at the superconducting gap energy Δ . In equilibrium it is given by the Fermi function, $n_\Delta = (e^{\Delta/T} + 1)^{-1}$, where $\Delta = \Delta(T)$ is the temperature-dependent BCS

energy gap. Equation (18.49) predicts a sharp decrease in ultrasound attenuation at $T < T_c$, and exponentially small, $\sim e^{-\Delta/T}$, attenuation in the limit $T \ll \Delta$. This was indeed measured in numerous experiments. According to Eq. (18.48), the ultrasound attenuation is a sensitive tool to measure a non-equilibrium quasiparticle occupation n_Δ .

13.6.8 18.8 Problems

18.8.1 Temperature Profile in a Conductor

Find a temperature profile in a quasi-1D conductor of length L with an applied voltage V . Assume a state of local equilibrium, characterized by a coordinatedependent electronic temperature and chemical potential. Put lattice temperature to zero, for simplicity.

Solution: If electrons are locally equilibrated (by electron-electron collisions) their distribution function acquire the form $F_\epsilon(x) = \tanh(\epsilon - \mu(x))/2T_e(x)$, where $\mu(x)$ is a local chemical potential, with the boundary conditions $\mu(\pm L/2) = \pm eV/2$, and $T_e(x)$ is a local electron temperature with $T_e(\pm L/2) = 0$. To find $\mu(x)$ and $T_e(x)$ we write equations for electron density, $\rho_e(x) = v \int d\epsilon n_\epsilon(x)$, and energy density, $E_e(x) = v \int d\epsilon (\epsilon - \mu(x)) n_\epsilon(x)$, where $n_\epsilon(x) = (1 - F_\epsilon(x))/2$ is the local occupation number. Employing (18.19), calculating $\nabla_x^2 F_\epsilon$, and evaluating the energy integrals, one finds

$$\partial_t \rho_e - \nabla_x (vD \nabla_x \mu) = 0 \quad (18.50a)$$

$$\partial_t E_e - \nabla_x \left(\frac{\pi^2}{3} v D T_e \nabla_x T_e \right) = vD (\nabla_x \mu)^2 + (T^6 - T_e^6) v \sum_{j=1}^3 \frac{\alpha_3}{\Theta_j^3} \quad (18.50b)$$

where we employed Eq. (18.25) and $\int ds s^2 / \cosh^2 s = \pi^2/6$. Here the dimensionality of the phonon bath is $d = 3$. Zero on the right-hand side of (18.50a) reflects conservation of particle number by the electron-phonon collisions. The term $vD (\nabla_x \mu)^2$ represents Joule heating of the electron gas by an applied bias. Here one identifies charge current, $J = evD \nabla_x \mu$, and the heat current, $J_h = \frac{\pi^2}{3} v D T_e \nabla_x T_e$. The corresponding charge conductivity $\sigma_D = e^2 v D$ and the heat conductivity $\kappa = \frac{\pi^2}{3} v D T_e$ obey the Wiedemann-Franz law:

$$\frac{\kappa}{\sigma_D} = \mathcal{L} T_e \quad (18.51)$$

where the Lorenz number is $\mathcal{L} = \pi^2 / (3e^2)$.

In the stationary case one finds $\nabla_x^2 \mu = 0$ and thus $\mu(x) = eVx/L$. The temperature profile is then found from the following equation:

$$\frac{\pi^2}{6} \nabla_x^2 T_e^2 = - \left(\frac{eV}{L} \right)^2 + T_e^6 \frac{1}{D} \sum_{j=1}^3 \frac{\alpha_3}{\Theta_j^3}, \quad (18.52)$$

where we assume a negligible lattice temperature, $T \ll T_e$. We only analyze it in the limiting cases of long and short wire. If the wire is long one may neglect the heat diffusion and find an almost uniform electron temperature (apart from the boundary layers) given by

⁰⁸ Notice that this one-line sigma-model exercise takes 10 pages of heroic diagrammatic calculations in Ref. [407].

$$T_e \sim \hbar \left(\frac{eV}{L} \right)^{1/3} \left(\frac{\rho_m v_t^5}{\hbar k_F^2} \right)^{1/6} \quad (18.53)$$

Notice that, despite being a result of the balance between Joule heating and phonon cooling, the stationary T_e is independent of the wire's conductivity, νD . It only depends on the material parameters (mass density, speed of sound, and Fermi momentum) along with the local electric field, eV/L . Taking the numbers for aluminum, Section 18.4, one finds $T_e = 4 \text{ K}(eV/L[\text{ cm}])^{1/3}$.

If the wire is short, one may disregard phonon cooling and consider the balance of the heat diffusion and Joule heating. Solving equation (18.52) with the boundary conditions $T_e(\pm L/2) = 0$, one finds a semicircular profile for the temperature

$$T_e(x) = eV \frac{\sqrt{3}}{2\pi} \sqrt{1 - (2x/L)^2} \quad (18.54)$$

with the maximal temperature in the middle $T_e(0) \approx 0.27 eV$. The short and long wire limits are distinguished by comparing this value with Eq. (18.53). This brings the characteristic length scale $L_V \propto (eV)^{-2}$, such that the short wire limit is $L \lesssim L_V$.

18.8.2 Phonon Diffusion

In 3D at large distances phonons propagate diffusively due to their scattering by electrons. Using the approach of Section 14.1, derive the corresponding diffusion equation for the phonon distribution function (assume locally equilibrated electrons with temperature $T_e(\mathbf{r}, t)$). Assuming a locally equilibrated lattice with temperature $T(\mathbf{r}, t)$, derive a flow equation for the lattice energy density and phonon heat conductivity.

Solution: Following Section 14.1 we assume almost isotropic boson distribution function: $B_{\mathbf{q}} = B_0(\omega_{\mathbf{q}}, \mathbf{r}, t) + \mathbf{n}_{\mathbf{q}} \cdot \mathbf{B}_1(\omega_{\mathbf{q}}, \mathbf{r}, t)$, where $\mathbf{n}_{\mathbf{q}}$ is a unit vector with the direction of $\mathbf{q}$ and we have suppressed polarization index j . Substituting this form in the phonon kinetic equation (18.39) and (i) integrating over directions of $\mathbf{n}_{\mathbf{q}}$; (ii) multiplying by $\mathbf{n}_{\mathbf{q}}$ and then integrating over directions, one finds

$$\partial_t B_0 + \frac{v_j}{3} \nabla_{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{B}_1 = \gamma_q \left(\coth \frac{\omega_{\mathbf{q}}}{2T_e} - B_0 \right) \quad (18.55a)$$

$$\partial_t \mathbf{B}_1 + v_j \nabla_{\mathbf{r}} B_0 = -\gamma_q \mathbf{B}_1 \quad (18.55b)$$

where we used $1 - F_{\epsilon} F_{\epsilon-\omega} = (F_{\epsilon} - F_{\epsilon-\omega}) \coth \omega/2T_e$ along with $\sum_{\epsilon} (F_{\epsilon} - F_{\epsilon-\omega}) = \omega/\pi$ and Eq. (18.46). Neglecting $\partial_t \mathbf{B}_1$ in comparison with $\gamma_q \mathbf{B}_1$, we finally obtain the damped-diffusion equation for the isotropic part of the phonon distribution, $B_0(\omega_{\mathbf{q}}, \mathbf{r}, t)$:

$$\partial_t B_0 - D_{\text{ph}} \nabla_{\mathbf{r}}^2 B_0 = \gamma_q \left(\coth \frac{\omega_{\mathbf{q}}}{2T_e} - B_0 \right), \quad (18.56)$$

where the phonon diffusion coefficient, $^9 D_{\text{ph}}(\omega_{\mathbf{q}}) = v_j^2 / (3\gamma_q) \propto \frac{v_j^4}{D\omega_{\mathbf{q}}^2} \frac{M}{m}$.

Assuming local equilibrium, $B_0(\omega_{\mathbf{q}}, \mathbf{r}, t) = \coth \omega_{\mathbf{q}}/2T(\mathbf{r}, t)$, and using the expression for the phonon energy (18.43), one finds

$$\partial_t E_{\text{ph}} - \nabla_{\mathbf{r}} \cdot \left(\sum_{j=1}^3 \frac{v_j \rho_m}{18 b_j v D k_F^2} T \nabla_{\mathbf{r}} T \right) = (T_e^6 - T^6) v \sum_{j=1}^3 \frac{\alpha_3}{\Theta_j^3}, \quad (18.57)$$

here $b_t = 1/5$ and $b_l = 4/15$. Comparing this with Eq. (18.50b) for the electron heat current, one notices that the lattice heat conductivity, $\kappa_{\text{ph}} \approx \frac{v_t \rho_m}{v D k_F^2} T$, scales linearly with temperature,

in agreement with the Wiedemann-Franz law (18.51). Unlike the electron one, it is inversely proportional to the charge conductivity, vD . This leads to the upward renormalization of the Lorenz number of the form $\delta\mathcal{L} \sim (10/k_F l_{\text{el}})^2$, where we put $(M/m)^{1/4} \approx 10$. It may be noticeable in highly disordered heavy metal compounds.

18.8.3 Quantum Correction to Electron-Phonon Vertex

Evaluate the first quantum correction to the electron-phonon vertex (18.16).

Remarks: Since the electron-phonon vertex is proportional to the diffusion constant, D , it is tempting to assume that it is suppressed by the weak-localization correction, similar to Eq. (14.72). Indeed the electron-phonon vertex (18.16), $\sim \text{Tr}\{\hat{Q}, \hat{\varepsilon}[\hat{Q}, \hat{\varepsilon}]\}$, where $\hat{\varepsilon}$ is the linear strain tensor, looks similar to vector potential vertex $\sim \text{Tr}\left\{\left[\hat{Q}, \hat{\mathbf{A}}\hat{\tau}_3\right]\left[\hat{Q}, \hat{\mathbf{A}}\hat{\tau}_3\right]\right\}$, considered in Section 14.8 to evaluate the weak-localization correction. The difference is that the strain field does not break the time-reversal symmetry and thus comes without a $\hat{\tau}_3$ matrix in the time-reversal space. The calculation of the weak-localization correction proceeds exactly as in

Section 14.8, but the absence of $\hat{\tau}_3$ matrices results in the opposite sign of the quantum correction, as compared to conductivity. This can be seen even easier using the diagram in Fig. 14.3, where the external wavy lines represent now the strain tensor $\varepsilon^{\mu\nu}$, coupled to the fermion vertex $\Gamma_{\nu\mu}^{(P)}$, Eq. (18.10). The latter is quadratic in electron velocity. Thus, the fact that the two fermion vertices have opposite velocities does not lead to the negative sign, unlike the case of the weak localization correction to conductivity, Section 14.8, where the vertices are linear in the velocity. As a result, the first quantum correction enhances electron-phonon coupling [423] in Eq. (18.16)

$$vk_F^2 D \rightarrow vk_F^2 D \left(1 + \frac{1}{\pi v} \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{Dq^2 - i\omega}\right),$$

where ω is a frequency of the phonon field $\varepsilon^{\mu\nu}(\omega)$.

18.8.4 Sigma-Model with Moving Impurities

Derive a sigma-model for the case where the impurity potential is dynamical due to slow phonon deformations of the lattice: $V_{\text{dis}}(\mathbf{r}) \rightarrow V_{\text{dis}}(\mathbf{r} + \mathbf{u}(\mathbf{r}, t))$.

Solution: It is convenient to shift $\mathbf{r}$ to write the interaction of the electron density $\rho_e(\mathbf{r}, t) = \bar{\psi}(\mathbf{r}, t)\psi(\mathbf{r}, t) - \rho_0$ with the disorder potential as

$$H_{\text{dis}} = \sum_{\mathbf{r}} V_{\text{dis}}(\mathbf{r}) \rho_e(\mathbf{r} - \mathbf{u}(\mathbf{r}, t), t).$$

Performing averaging over the Gaussian distribution of short-ranged disorder, one finds the following action

$$iS_{\text{dis}} = -\frac{1}{4\pi\nu\tau_{\text{el}}} \iint dt dt' \sum_{\mathbf{r}} \bar{\psi}_{\mathbf{r}-\mathbf{u}, t} \psi_{\mathbf{r}-\mathbf{u}, t} \bar{\psi}_{\mathbf{r}-\mathbf{u}', t'} \psi_{\mathbf{r}-\mathbf{u}', t'}$$

where $\mathbf{u} = \mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ and $\mathbf{u}' = \mathbf{u}(\mathbf{r}, t')$. One can now rearrange the fermionic fields and decouple the four-fermion action with the help of the nonlocal in time field $Q_{t, t'}(\mathbf{r})$. This leads to the following term:

⁰⁹ The scattering rate should also include phonon scattering by phonon nonlinearities and lattice imperfections. Those typically scale with higher powers of q , making scattering by electrons dominant at small temperatures.

$$\bar{\psi}_{\mathbf{r}-\mathbf{u},t} Q_{t,t'}(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{r}-\mathbf{u}',t'} \approx \bar{\psi}_{\mathbf{r},t} \left[Q_{t,t'}(\mathbf{r}) - \hat{\mathcal{L}}_1 + \frac{1}{2} \hat{\mathcal{L}}_2 \right] \psi_{\mathbf{r},t'} \quad (18.58)$$

We have expanded fermionic fields to the second order in the displacement $\mathbf{u}$, which brings the two operators:

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{L}}_1 &= \overleftarrow{\nabla} \cdot \mathbf{u} Q_{t,t'}(\mathbf{r}) + Q_{t,t'}(\mathbf{r}) \mathbf{u}' \cdot \vec{\nabla} \\ \hat{\mathcal{L}}_2 &= \overleftarrow{\nabla} \overleftarrow{\nabla} \cdot \mathbf{u} \mathbf{u}' Q + \overleftarrow{\nabla} \cdot \mathbf{u} 2Q \mathbf{u}' \cdot \vec{\nabla} + Q \mathbf{u}' \mathbf{u}' \cdot \cdot \vec{\nabla} \vec{\nabla} \end{aligned} \quad (18.59)$$

where the arrows above the gradient operators show the direction of the differentiation in the context of Eq. (18.58). The action is now quadratic in the unshifted fermionic fields, which may be integrated out in the standard way, leading to the determinant:

$$\text{Tr} \log \left\{ G^{-1} - \varphi + \frac{i}{2\tau_{\text{el}}} \left[Q - \hat{\mathcal{L}}_1 + \frac{1}{2} \hat{\mathcal{L}}_2 \right] \right\}, \quad (18.60)$$

where $\varphi = \varphi_{\mathbf{r},t}$ is the scalar potential coming from the Hubbard-Stratonovich decoupling of the Coulomb interactions.

From this point on, one proceeds along the standard route of deriving Keldysh nonlinear sigma-model, Chapter 14. To this end one passes to the Keldysh 2×2 structure, by splitting the contour on forward and backward branches and performing the Keldysh rotation. One then realizes that the soft diffusive modes of the action are described by the manifold $\hat{Q}^2 = 1$ and therefore one can write $\hat{Q} = \hat{\mathcal{R}}^{-1} \hat{\Lambda} \hat{\mathcal{R}}$, where $\hat{\Lambda}$ is the Green function in coinciding spatial points, Eq. (14.25). This way, Eq. (18.60) may be rewritten as

$$\text{Tr} \log \left\{ 1 + \hat{\mathcal{G}} \hat{\mathcal{R}} \left[G^{-1}, \hat{\mathcal{R}}^{-1} \right] - \hat{\mathcal{G}} \hat{\mathcal{R}} \left[\hat{\varphi} + \frac{i}{2\tau_{\text{el}}} \hat{\mathcal{L}}_1 - \frac{i}{4\tau_{\text{el}}} \hat{\mathcal{L}}_2 \right] \hat{\mathcal{R}}^{-1} \right\} \quad (18.61)$$

where $\hat{\mathcal{G}}^{-1} = G^{-1} + i\hat{\Lambda}/2\tau_{\text{el}}$. Finally, one expands the logarithm here to the lowest nonvanishing orders. First neglecting $\hat{\mathcal{L}}_{1,2}$ terms, one obtains the standard nonlinear sigma-model action, cf. Eq. (14.48):

$$iS_0 = \frac{iv}{2} \text{Tr} \{ \hat{\varphi} \hat{\sigma}^1 \hat{\varphi} \} - \frac{\pi v}{4} \text{Tr} \left\{ D \left(\partial_{\mathbf{r}} \hat{Q} \right)^2 - 4\partial_t \hat{Q} - 4i\hat{\varphi} \hat{Q} \right\} \quad (18.62)$$

The first term on the right-hand side here represents static polarizability (i.e. screening) of the electronic band. It comes from the so-called retarded-retarded and advanced-advanced loops. The dynamic screening is encoded in $\pi\nu \text{Tr}\{\hat{\varphi} \hat{Q}\}$ term along with fluctuations of the $\hat{Q}$ field around its stationary point $\hat{\Lambda}$.

We focus now on the phonon-induced $\hat{\mathcal{L}}_{1,2}$ terms, which originate from the motion of the impurities relative to the electronic liquid. It is easy to see that the first order in $\hat{\mathcal{L}}_1$ vanishes. One is thus left with the three terms: (i) first order in $\hat{\mathcal{L}}_1$ and in $i\hat{\mathcal{R}} \mathbf{v}_F \cdot \vec{\nabla} \hat{\mathcal{R}}^{-1}$; (ii) first order in $\hat{\mathcal{L}}_2$; and (iii) second order in $\hat{\mathcal{L}}_1$. A straightforward, but somewhat lengthy evaluation of these three terms results:

$$iS_{\text{(i)}} = -i\pi v \frac{v_F k_F}{d} \text{Tr} \{ \hat{\mathbf{u}} \cdot \nabla \hat{Q} \} = i\pi \rho_0 \text{Tr} \{ \text{div} \hat{\mathbf{u}} \hat{Q} \}; \quad (18.63a)$$

$$iS_{\text{(ii)}} = -i \frac{\pi v}{2\tau_{\text{el}}} \frac{k_F^2}{d} \text{Tr} \{ \hat{\mathbf{u}} \cdot \hat{\mathbf{u}} - \hat{\mathbf{u}} \hat{Q} \hat{\mathbf{u}} \hat{Q} \}; \quad (18.63b)$$

$$iS_{\text{(iii)}} = -iS_{\text{(ii)}} + \frac{\pi v D k_F^2}{4} \text{Tr} \left\{ \left[\hat{Q}, \partial^\mu \hat{u}^\nu \right] \left[\hat{Q}, \partial^\eta \hat{u}^\lambda \right] \right\} \Upsilon_{\mu\nu, \eta\lambda}, \quad (18.63c)$$

where $\Upsilon_{\mu\nu,\eta\lambda}$ is given by Eq. (18.15). Notice that the leading orders in $S_{(\text{iii})}$ is exactly cancelled against $S_{(\text{ii})}$. The second sub-leading term in Eq. (18.63c) originates from the gradient operators in $\hat{\mathcal{L}}_1$ acting on displacements $\hat{\mathbf{u}}$, as opposed to the Green functions, $\hat{\mathcal{G}}$.

The scalar linear coupling $S_{(i)}$ may be combined with the potential term in Eq. (18.62) by shifting the potential $\hat{\phi} \rightarrow \hat{\phi} = \hat{\phi} + \frac{\rho_0}{v} \text{div } \hat{\mathbf{u}}$. To deal with it we need to bring the Fröhlich electron-phonon coupling via the Coulomb interaction of the electron density and lattice compression. The corresponding action is

$$S_C = \int dt \left[\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}} \varphi_{\mathbf{q},t} U_C^{-1} \varphi_{-\mathbf{q},t} + \sum_{\mathbf{r}} \varphi_{\mathbf{r},t} (\rho_0 \text{div } \mathbf{u} - \rho_e)_{\mathbf{r},t} \right], \quad (18.64)$$

where $U_C = 4\pi e^2/q^2$ is the bare Coulomb interaction. In the limit of the strong Coulomb interactions, $U_C \rightarrow \infty$, one is left with the static screening $\frac{v}{2} \text{Tr} \{ \hat{\phi} \hat{\sigma}^1 \hat{\phi} \}$ in Eq. (18.62) along with the Fröhlich interaction term $\hat{\phi} \hat{\sigma}^1 \rho_0 \text{div } \hat{\mathbf{u}}$ in Eq. (18.64) (the $-\varphi_{\mathbf{r},t} \rho_e(\mathbf{r},t)$ term is already fully included in (18.62)). Upon the aforementioned shift, these terms result in $\frac{v}{2} \text{Tr} \{ \hat{\phi} \hat{\sigma}^1 \hat{\phi} \} - \frac{\rho_0^2}{2v} \text{div } \hat{\mathbf{u}} \hat{\sigma}^1 \text{div } \hat{\mathbf{u}}$. The first term here stands for the screened electron-electron interactions, unaffected by lattice compression, while the second one serves to renormalize upward the longitudinal sound velocity. This latter effect is already accommodated by using the correct value of v_l and thus no other effects of the scalar electron-phonon coupling, $S_{(i)}$, remain.

The only remaining term thus is the second - the quadrupole term in Eq. (18.63c), which coincides with Eq. (18.14). The latter was derived using phenomenological Pippard-Tsuneto-Schmid form, Eq. (18.9), of the electron-phonon coupling. The present first-principles derivation thus provides an independent justification for the Schmid theory [408].

14 Nonequilibrium dynamics of closed interacting quantum systems by Polkovnikov et al.

Here, we will give an overview of recent theoretical and experimental progress in the area of nonequilibrium dynamics of isolated quantum systems. We particularly focus on quantum quenches: the temporal evolution following a sudden or slow change of the coupling constants of the system Hamiltonian. We discuss several aspects of the slow dynamics in driven systems and emphasize the universality of such dynamics in gapless systems with specific focus on dynamics near continuous quantum phase transitions. We also review recent progress on understanding thermalization in closed systems through the eigenstate thermalization hypothesis and discuss relaxation in integrable systems. Finally we overview key experiments probing quantum dynamics in cold atom systems and put them in the context of our current theoretical understanding.

Introduction

In the past two decades the outlook of condensed matter physics has been deeply and unexpectedly revolutionized by a few experimental breakthroughs in atomic physics, quantum optics and nanoscience. In synthesis, crucial advances in these fields have made it possible to realize artificial systems (e.g. optical lattices, quantum dots, nanowires) that are described to a very high degree of accuracy by models (e.g. Hubbard, Kondo, and Luttinger models) whose physics has been a subject of intense investigation in various contexts ranging from high temperature superconductivity to low temperature transport in metals. It is fair to say that this experimental progress has changed the way theory and experiment look at each other. In

the past, effective models were largely devised to explain the low energy physics of highly complex systems. The situation has now been reversed so that one can experimentally realize and simulate the physics of such models. On one hand, the design and realization of interacting many-body systems could in principle be used to perform practical tasks, such as quantum information processing [Farhi *et al.*(2001)Farhi, Goldstone, Gutmann, Lapan, Lundgren, and Preda]. On the other hand, direct simulations of simple models could help resolving important problems in condensed matter physics. But most importantly, the availability of experimental controllable systems whose properties can be accurately described by simple models provides unprecedented opportunity to explore several new frontiers of condensed matter physics including the nonequilibrium dynamics in closed interacting quantum systems.

Equilibrium systems can often be understood using a combination of a mean field theory, renormalization group, and universality. This allows us to understand low temperature experimental data obtained in complex systems, such as interacting electrons in solids, in terms of simple effective models containing a few relevant parameters. Away from equilibrium the situation is much less clear. While some progress was made in the past for classical systems [Schmittmann and Zia(1995)], there are no rigorously justified generalizations of any of these approaches to generic quantum nonequilibrium systems. It is thus not obvious that the theoretical study of the dynamics of simplified models would accurately describe experiments of more complex systems. In addition there are fewer available tools for analyzing dynamics of even simple interacting models. In this respect cold atomic gases and nanostructures make possible what would be arduous otherwise: a fruitful comparison between nonequilibrium theories based on simple models and carefully designed experiments with tunable system parameters.

Finding systematic ways to understand the nonequilibrium physics of interacting systems is not only of fundamental importance, but could also be crucial for future technologies. A quantum computer, for example, will definitely require the capability of performing real time manipulations of interacting quantum systems. Though large scale quantum computers are yet to be on the horizon, it is evident that quantum coherent dynamics will be one of the focus points of various experimental systems and of future technologies.

Nonequilibrium dynamics is a potentially a vast field: there are many ways to take a system out of equilibrium, such as applying a driving field or pumping energy or particles in the system through external reservoirs as in transport problems. It is thus of utter importance to focus on simple, yet fundamental protocols. In this Colloquium we will concentrate on the simplest paradigm: the study of the nonequilibrium dynamics of closed interacting quantum systems following a change in one of the system parameters (quantum quench). Such a change, which could be either fast or slow, is particularly interesting when it takes the system through a quantum phase transition involving macroscopic changes in the state of the many-body system at the initial and the final point. Seminal work in this direction includes groundbreaking experiments [Greiner *et al.*(2002a)Greiner, Mandel, Esslinger, Hänsch, and Bloch, Greiner *et al.*(2002b)Greiner, Mandel, Hansch, and Bloch] showing both the feasibility of observing a quantum phase transition in cold atoms and the possibility of observing quantum coherent dynamics. Following this work, a number of different experiments explored the dynamics of cold atom systems driven across BCS-BEC crossover [Regal(2006)], polar and ferromagnetic phases of spinor condensates [Sadler *et al.*(2006)Sadler, Higbie, Leslie, Vengalattore, and Stamper-Kurn], insulating and superfluid phases of ultracold bosons [Tuchman *et al.*(2006)Tuchman, Orzel, Polkovnikov, and Kasevich] and many others (see Ref. [Bloch *et al.*(2008)Bloch, Dalibard, and Zwerger] for a review).

These experiments stimulated an active theoretical research in the relatively unexplored area of quantum dynamics in closed interacting systems. An interesting characteristic common to these systems is that despite of the absence of energy exchange with an environment and of the consequent global relaxation, it nevertheless frequently possible to look at the long

time dynamics and characterize it in terms of an asymptotic state attained by physical (measurable) observables [Rigol *et al.*(2008)Rigol, Dunjko, and Olshanii, Reimann(2008), Linden *et al.*(2009)Linden, Popescu, Short, and Winter, Gogolin *et al.*(2011)Gogolin, M ller, and Eisert, Cramer *et al.*(2008)Cramer, Dawson, Eisert, and Osborne, Flesch *et al.*(2008)Flesch, Cramer, McCulloch, Schollwoeck, and Eisert]. In connection to this, it is possible to categorize recent research on the subject of this Colloquium in two main questions:

- What is universal in the dynamics of a system following a quantum quench ?
- What are the characteristics of the asymptotic, steady state reached after a quench ? When is it thermal ?

In this Colloquium we will discuss both of these questions extensively. We shall outline our current level of understanding of these issues and chart out the outstanding open questions in the field. In Sec. 14.1 we will focus on the first question and describe, from various points of view, the universal aspects of nearly adiabatic dynamics near quantum critical points as well as in generic gapped and gapless systems. We will argue that the proximity to the adiabatic limit allows us to make specific universal predictions of scaling of various quantities such as the defect density and heat with the quench rate.

In Sec. 14.2, we will discuss recent progress in understanding thermalization of a quantum system following a quench. In classical systems active interest in this topic was stimulated by the celebrated work of Fermi Pasta and Ulam on the dynamics of a one-dimensional (1D) anharmonic chain [Fermi *et al.*(May 1955)Fermi, Pasta, and Ulam, Campbell *et al.*(2005)Campbell, Rosenau, and Zaslavsky, Porter *et al.*(2009)Porter, Zabusky, Hu, and Campbell] which demonstrated the absence of such thermalization. It was realized much later that the nonlinearity of the interaction is not sufficient for thermalization which occurs, in this system, only if the initial amplitude of interaction exceeds a certain threshold [Izrailev and Chirikov(1966)]. Below this threshold, the solution splits into solitons and retains its quasi-periodic nature [Zabusky and Kruskal(1965)] which is a consequence of the Kolmogorov-Arnold-Moser (KAM) theorem [Tabor(1989)]. In quantum systems, the question of sufficient criteria for thermalization has remained largely unaddressed so far. Some experimental progress in this direction has been made by a recent experiment from Kinoshita *et al.* [Kinoshita *et al.*(2006)Kinoshita, Wenger, and Weiss] on non-thermalizing dynamics of 1D bosons with short range interactions. This experiment constitutes the first clear demonstration of the fact that a nearly integrable quantum interacting many-particle system does not thermalize for a very long time. Currently, the question of extension of KAM theorem to quantum systems is a subject of active theoretical debate (see e.g. Ref. [Olshanii and Yurovsky(2009)]).

Finally, we note that many important topics concerning the physics of closed interacting systems did not find space in this Colloquium. Most important among these are the tools that are being developed to describe theoretically the physics of interacting systems out of equilibrium. Among such methods we mention density-matrix renormalization group (DMRG) and time-evolving block decimation (TEBD) for analyzing equilibrium and nonequilibrium 1D systems [White(1992), Schollwöck(2005), Schollwöck and White(2006), Vidal(2003), Vidal(2004)] and higher dimensional ones [Verstraete *et al.*(2008)Verstraete, Murg, and Cirac], the Keldysh technique [Kamenev and Levchenko(2009)] which is particularly helpful for deriving quantum kinetic equations, and closely related functional integral methods [Plimak *et al.*(2001)Plimak, Fleischhauer, Olsen, and Collett, Gasenzer(2009), Rey *et al.*(2005)Rey, Hu, Calzetta, and Clark]. Cold atom experiments also prompted rapid developments in phase space methods, where quantum dynamics is represented as an evolution in the classical phase space [Blakie *et al.*(2008)Blakie, Bradley, Davis, Ballagh, and Gardiner, Polkovnikov(2010)]. These methods were originally developed and applied to various problems in single-particle dynamics [Hillery

et al.(1984)Hillery, O’Connell, Scully, and Wigner, Zurek(2003)] and independently in quantum optics in the context of coherent states [Walls and Milburn(1994), Gardiner and Zoller(2004)]. There are other reviews available in literature (see the references above) which specifically target these areas.

Outlook

One of the ultimate goals of the new field of quantum dynamics is to develop a systematic understanding of nonequilibrium phenomena in strongly interacting quantum many-body systems. A few of the most significant open questions along this avenue are readily identified: How can we classify nonequilibrium behavior in closed many-body systems? What is the general relation between integrability and dynamics? What is the dynamical effect of a gradual breaking of integrability? What are the effects of dissipation on these nonequilibrium processes? Can we understand time evolution of interacting systems through the renormalization group? Answering these and other questions allied with systematic, quantitative studies of possible nonequilibrium quantum phase transitions and the extraction of dynamical critical exponents, are just a few of the many tantalizing programs to be pursued. The rapidly developing sophistication and precision of ultracold atomic experiments and other experimental systems should allow for close and direct comparison between theoretical predictions and *ad hoc* experiments.

The realization of robust techniques for the experimental study of such systems and the development of theoretical tools to describe nonequilibrium many-body processes should bode for tantalizing opportunities in this nascent field, potentially leading to a deeper understanding of the principles governing nonequilibrium many-body phenomena and establishing robust connections between microscopic dynamics and statistical physics.

14.1 Nearly adiabatic dynamics in quantum systems

14.1.1 Universality in a nutshell

Universality (or insensitivity to microscopic details) is one of the crucial concepts of modern condensed matter physics. It naturally emerged from one of the milestones of modern physics: the renormalization group. In condensed matter physics universality is a very powerful tool for the understanding of continuous (second order) phase transitions, both classical [Landau and Lifshitz(1980), Chaikin and Lubensky(1995)] and quantum [Sachdev(1999), Sondhi *et al.*(1997)Sondhi, Girvin, Carini, and Shahar, Vojta(2003)]. As a consequence of the divergence of the correlation length, a system undergoing such a continuous phase transition is typically scale invariant in the vicinity of the critical point and can be characterized by relatively simple massless field theories, which permit a classification of perturbations driving the system away from the critical point. Consequently, universality manifests itself in the scaling behavior of various quantities such as the order parameter, (free) energy, susceptibilities and correlations functions near the critical point. In this review we will focus mostly on quantum phase transitions occurring at zero temperature upon the variation of a control parameter λ through a critical point λ_c . A standard example of universality is the fact that the exponent ν characterizing the divergence of the correlation length $\xi \sim 1/|\lambda - \lambda_c|^\nu$ near the quantum critical point (QCP) is insensitive to the microscopic details of the system and depends only on the *universality class* of the transition, determined by the dimensionality, overall symmetries and range of the interactions. For classical (thermal) phase transitions similar universality manifests in the divergence of the relaxation time $\tau_{rel} \sim 1/|\lambda - \lambda_c|^{z\nu}$, where z is the dynamical critical exponent. For quantum phase transitions the exponent z can be associated with a vanishing energy scale $\Delta \sim |\lambda - \lambda_c|^{z\nu}$, which can be either a gap or a crossover scale where the spectrum changes qualitatively. By the uncertainty principle this energy scale corresponds to a divergent

time scale, which typically describes the crossover in the scaling behavior of unequal time correlation functions. Phase transitions can be also characterized by singular susceptibilities, which are in turn connected through the fluctuation-dissipation theorem to the correlation functions of conjugate variables (e.g., the magnetic susceptibility is related to the correlation function of the magnetization). At critical points these correlation functions have often power law scaling behavior at long distances, e.g. $\langle m(x)m(x') \rangle \approx 1/|x - x'|^{2\alpha}$. The exponent α sets the scaling dimension of the corresponding operator $m(x)$: $\dim[m(x)] = \alpha$. Because similar correlation functions can enter different susceptibilities not all the scaling exponents are independent but must satisfy scaling relations [Chaikin and Lubensky(1995), Vojta(2003)].

As mentioned in the introduction, the idea of universality makes it possible to interpret experimental data obtained in real systems in terms of effective models with a few parameters. Universality can be ultimately understood using the renormalization group, which shows that as a system is coarse grained to lower energies and longer length scales, more and more parameters of its original, *ab initio* description become unimportant (irrelevant), while the remaining few (relevant) parameters define an effective low energy model. A standard example of universality in this context is the scaling relation between energy and momentum of elementary excitations, $\epsilon \propto k^z$, controlled by the dynamical exponent z which depends on the symmetries of the system. In particular, $z = 1$ in most phases characterized by a continuous broken symmetry (crystals, superfluids, anti-ferromagnets), $z = 2$ in ferromagnets, where there is an additional conservation law of the order parameter.

Universality is well established and understood in equilibrium. It is, however, crucial for many experimentally relevant situations to understand the extent to which this concept can be extended to out of equilibrium physics. Can irrelevant interactions turn out to be important away from equilibrium? Since there are many ways to take a system out of equilibrium, for which specific protocols will universality emerge and which details of the protocol are potentially important? Below we will focus on recent studies addressing these important issues in closed interacting quantum systems, and in particular on the dynamics of a system whose parameters are dynamically tuned either through a quantum critical point, or in general within a gapless/gapped phase.

14.1.2 Universal dynamics near quantum critical points

Let us start by considering the simplest nonequilibrium protocol [Polkovnikov(2005), Zurek *et al.*(2005)Zurek, Dorner, and Zoller, Dziarmaga(2005)]: the system is prepared in its ground state and is then driven through a QCP by changing an external parameter λ in time. As long as the rate change of the gap in the spectrum Δ ¹ caused by changing λ is smaller than the square of the gap one can expect the system to approximately follow the ground state adiabatically (we will revisit this statement in the next section). However, the vanishing of the gap at $\lambda = \lambda_c$ implies that the system will always violate adiabaticity close to the quantum critical point, no matter how slowly the parameters are changed. It is then natural to ask how many excitations will be generated while passing through the critical point and how their density as well as generated entropy and energy will depend on the rate of change of λ .

A similar question known under the name of the Kibble-Zurek mechanism (KZ) [Kibble(1976), Zurek(1985), Zurek(1996), Kibble(2007)] has been addressed in the past decades for classical phase transitions. In that case the excitation density of defects is described by a simple scaling argument [Zurek(1985), Zurek(1996)]. Suppose that the tuning parameter, for example external temperature T , slowly decreases in time across the critical value T_c : $T = T_c - vt$. The system will respond adiabatically (quasi-statically if the system is not thermally insulated)

¹We use the word “gap” for brevity. However, the system can be gapless on one or both sides of the transition (e.g. superfluid-insulator transition). Then Δ would denote a crossover energy scale vanishing at the QCP.

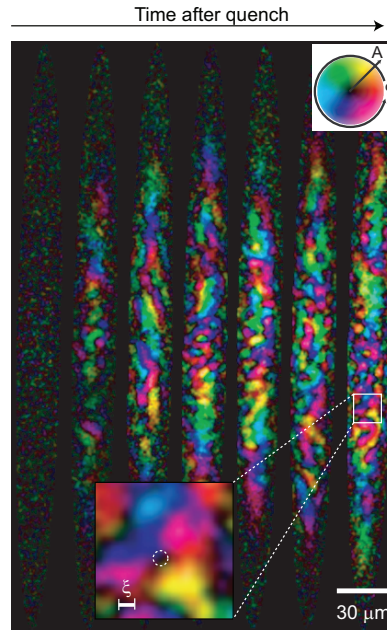


Figure 14.1: **Defect generation after a quench in a spinor condensate** - These images show the transverse magnetization density of spinor condensates for variable evolution times after a quench to a ferromagnetic state, revealing a spatially inhomogeneous formation of ferromagnetic domains. The orientation ϕ and amplitude A are depicted by the color and brightness according to the color wheel shown. Inset: An instance of a spin vortex spontaneously created during the quench. For reference, the length scale corresponding to the characteristic healing length ξ is also shown. (Adapted from Ref. [Sadler *et al.*(2006)Sadler, Higbie, Leslie, Vengalattore, and Stamper-Kurn]. See Sec. 14.3 for more details.)

up to some close vicinity of the critical point, where adiabaticity will be violated as a result of the divergence of the relaxation time ($\tau_{rel} \sim 1/|T - T_c|^{z\nu}$) and the dynamics will become diabatic (sudden). The adiabatic response is once again resumed after the system moves out of the vicinity of the critical point. Zurek suggested a very simple criterion for separating such adiabatic and diabatic (impulse) regimes: the time to reach the critical point $t = |T - T_c|/\nu$ should be equal to the relaxation time. This immediately introduces the time and length scales characterizing the adiabatic to diabatic crossover: $t^* \sim 1/|\nu|^{z\nu/(z\nu+1)}$, $\xi^* \sim 1/|\nu|^{\nu/(z\nu+1)}$. The violation of adiabaticity implies that order can not form on distances larger than ξ^* leading to the formation of a domain structure with a characteristic distance ξ^* between the domain boundaries. In two and three dimensional systems, when the order parameter is characterized by a continuous broken symmetry, the points where several domains meet correspond to vortices or vortex rings. These are robust topological excitations with a very long life time (see Fig. 14.1). Since ξ^* determines the average distance between the defects their density is given by a simple universal expression

$$n_{ex} \sim (\xi^*)^d \sim |\nu|^{d\nu/(z\nu+1)}. \quad (14.1)$$

The universality of the KZ prediction above is manifest in the appearance of the universal critical exponents z and ν in the scaling law. This scaling was confirmed in experiments in liquid crystals [Ducci *et al.*(1999)Ducci, Ramazza, González-Viñas, and Arecchi]. Experiments in other systems (superconductors [Maniv *et al.*(2003)Maniv, Polturak, and Koren], arrays of Josephson junctions [Monaco *et al.*(2006)Monaco, Aaroe, Mygind, Rivers, and Koshelets]) observed the production of topological defects with a power law scaling on the quench rate but gave a different exponent. The KZ scaling was also confirmed theoretically using stochastic dynamics (Ginzburg-Landau dynamics with Langevin noise or Glauber dynamics)

where temperature changes in time [Laguna and Zurek(1997), Yates and Zurek(1998), Krapivsky(2010), Rivers(2001)], though there are also works suggesting various modifications [Biroli *et al.*(2010)Biroli, Cugliandolo, and Sicilia, Hindmarsh and Rajantie(2000)]. One can also interpret Eq.(14.1) as a measure of non-adiabaticity near the critical point. It is naturally expected that other measures like non-adiabatic energy production and entropy generation will display similar universality. These measures might be preferable over n_{ex} in situations where it is difficult to identify defects. Finding the scaling of these quantities remains an open question.

The arguments above were recently generalized to the crossing of quantum phase transitions [Polkovnikov(2005), Zurek *et al.*(2005)Zurek, Dorner, and Zoller, Dziarmaga(2005)] (for recent reviews on this subject see Refs. [Dziarmaga(2010), Gritsev and Polkovnikov(2010)]. As discussed before in the quantum case the parameter to be varied is not temperature T but rather the coupling λ tuning the system through the quantum critical point. In order to obtain the scaling for the number of excitations produced in the quantum case let us first recall the Landau-Zener analysis of the crossover between adiabatic and nonadiabatic dynamics in a simple driven two-level system:

$$\mathcal{H}_{\text{LZ}} = g(t)\sigma_z + \Delta\sigma_x, \quad (14.2)$$

where $g(t) = vt$. If the system was initially prepared in the ground state at $t \rightarrow -\infty$, the probability of transition to the excited state at $t \rightarrow +\infty$ is [Landau(1932), Zener(1932), Majorana(1932), Stückelberg(1932)]

$$p_{\text{ex}} = \exp[-\pi\gamma], \quad (14.3)$$

where we introduced the Landau-Zener parameter $\gamma = \Delta^2/v$. Notice that the limit $\gamma \gg 1$ corresponds to the adiabatic limit with an exponentially suppressed transition probability while $\gamma \ll 1$ corresponds to the diabatic limit where the transition happens with probability close to unity. Hence when the rate of change of the energy splitting between two levels becomes larger or comparable to the energy splitting squared one observes a crossover from adiabatic to diabatic dynamics. An alternative qualitative explanation of this result has been recently formulated [Damski and Zurek(2006)].

The Landau-Zener argument can be straightforwardly extended to the crossing of a QCP. The characteristic energy scale which changes in time is now the gap Δ . As we discussed earlier this gap universally depends on the tuning parameter λ : $\Delta(\lambda) \sim |\lambda - \lambda_c|^{z\nu} \sim |vt|^{z\nu}$, where we assumed that the dependence $\lambda(t)$ can be linearized near the QCP: $\lambda(t) \approx \lambda_c + vt$. Comparing the rate of change of the gap with its square, i.e. solving the equation $d\Delta/dt \approx \Delta^2$, we find the energy scale at which adiabaticity breaks down is $\Delta^* \sim |v|^{z\nu/(z\nu+1)}$. At this point the system is characterized by the length scale $\xi^* \sim |v|^{-\nu/(z\nu+1)}$, which can be interpreted as the typical length scale of fluctuations of the order parameter. Beyond this point the adiabatic approximation breaks down and fluctuations at longer scales cannot adiabatically follow the ground state. This results in the creation of defects with typical distance ξ between them and density $n_{\text{ex}} \sim |\xi^*|^d \sim |v|^{d\nu/(z\nu+1)}$. This scaling is identical to the classical one, Eq. (14.1) with $\lambda \rightarrow T$, and was proposed independently in Refs. [Polkovnikov(2005), Zurek *et al.*(2005)Zurek, Dorner, and Zoller]. There is a simple quasi-particle interpretation for this scaling: assuming that the excitations in the system are characterized by isolated quasi-particles then their density can be found from $n_{\text{ex}} \approx \int_0^{\Delta^*} d\epsilon \rho(\epsilon)$, where $\rho(\epsilon)$ is the single-particle density of states near the QCP. In uniform d-dimensional systems $\rho(\epsilon) \sim \epsilon^{d/z-1}$, which again reproduces Eq. (14.1).

The scaling in Eq.(14.1) was verified in a series of exact solutions of the dynamics across the QCP in integrable systems whose dynamics can be mapped into a series of Landau-Zener transitions of a few quasi-particle modes. In particular, it has been verified for various spin models in one and two dimensions which can be mapped to noninteracting fermions [Mukherjee *et al.*(2007)Mukherjee, Divakaran, Dutta, and Sen], for models where low

energy excitations near phase transitions can be described by bosonic Goldstone modes [Polkovnikov(2005), Lamacraft(2007), Dziarmaga *et al.*(2008) Dziarmaga, Meisner, and Zurek], the sine-Gordon model, where elementary excitations are solitons and breathers with fractional statistics [De Grandi *et al.*(2008) De Grandi, Barankov, and Polkovnikov, De Grandi *et al.*(2010b) De Grandi, Gritsev, and Polkovnikov], graphene [Dóra *et al.*(2010) Dóra, Castro, and Moessner, Dóra and Moessner(2010)]. This scaling was also extended to disordered systems, like a disordered Ising spin chain, where it was found that $n_{\text{ex}} \sim 1/\log^2(v)$ [Caneva *et al.*(2007) Caneva, Fazio, and Santoro, Dziarmaga(2006)], as expected from Eq. (14.1) due to the divergence of the exponent z near the critical point [Fisher(1995)].

The scaling in Eq. (14.1) can be generalized to the case of nonlinear dependence of the tuning parameter on time, $\lambda(t) \sim \lambda_c \pm v|t|^r$, where considerations similar to those leading to Eq. (14.1) give [Sen *et al.*(2008) Sen, Sengupta, and Mondal, Barankov and Polkovnikov(2008), De Grandi *et al.*(2010a) De Grandi, Gritsev, and Polkovnikov]:

$$n_{\text{ex}} \sim |v|^{d\nu/(z\nu r+1)}. \quad (14.4)$$

In all cases v in Eq. (14.4) plays the role of the adiabatic parameter: the limit $v \rightarrow 0$ corresponds to the adiabatic limit (this interpretation is valid even for instantaneous quenches $r = 0$, where v plays the role of the quench amplitude). This suggests the dynamics can be systematically analyzed using adiabatic perturbation theory [Polkovnikov(2005), Rigolin *et al.*(2008) Rigolin, Ortiz, and Ponce, De Grandi and Polkovnikov(2010)], i.e. expanding the transition amplitudes to the instantaneous eigenstates of the system in powers of v . Using such analysis in Refs. [De Grandi *et al.*(2010a) De Grandi, Gritsev, and Polkovnikov, De Grandi *et al.*(2010b) De Grandi, Gritsev, and Polkovnikov] it was shown that the scaling (14.4) can be derived from the scaling of the adiabatic fidelity, defined as the overlap of the time-dependent wave function with the instantaneous ground state:

$$F(t) = |\langle \psi(t) | \psi_{\text{gs}}(t) \rangle|. \quad (14.5)$$

In particular, for $\lambda(t) = \lambda_c + vt^r/r!\theta(t)$, where $\theta(t)$ is a step function,

$$P_{\text{ex}}(v) = 1 - F(t)^2 \approx L^d |v|^2 \chi_{2r+2}(\lambda_c), \quad (14.6)$$

where

$$\chi_{2r+2}(\lambda) = \frac{1}{L^d} \sum_{n \neq 0} \frac{|\langle n | V | 0 \rangle|^2}{(E_n - E_0)^{2r+2}}, \quad (14.7)$$

is the adiabatic (fidelity) susceptibility of the order $2r + 2$ (χ_2 is the conventional fidelity susceptibility [Gu and Lin(2009)]). Here E_n are the eigenenergies and V is the operator coupled to the parameter λ : $V = \partial_\lambda H(\lambda)|_{\lambda=\lambda_c}$. If the perturbation is local and spatially uniform, i.e. $V = \int d^d x u(x)$, then the scaling dimension of the adiabatic fidelity susceptibility is obtained from a straightforward generalization of the result of Refs. [Venuti and Zanardi(2007), Gu and Lin(2009)], i.e. $\dim[\chi_{2r+2}] = 2\Delta_u - 2z(r+1) - d$, where $\Delta_u \equiv \dim[u]$ is the scaling dimension of $u(x)$.

Let us now discuss from this general perspective the arguments leading to the generalized scaling relation Eq. (14.4). If the scaling dimension of the susceptibility is negative, this implies that χ_{2r+2} diverges at the critical point. In this case from Eq. (14.6) we find that asymptotically at $v \rightarrow 0$

$$P_{\text{ex}}(v) \sim |v|^2 L^{2d+2z(r+1)-2\Delta_u}. \quad (14.8)$$

From Eq. (14.8) we see that the probability of exciting the system becomes of order one when $L \sim 1/|v|^{1/(d+z(r+1)-\Delta_u)}$. This length scale can be interpreted as the typical distance between

elementary excitations (defects) and thus we find that instead of Eq. (14.8) we get

$$n_{\text{ex}} \sim |v|^{d/(d+z(r+1)-\Delta_u)}. \quad (14.9)$$

This expression reduces to Eq. (14.4) if $u(x)$ is a relevant operator driving the system to the new phase. Indeed, in this case $\lambda \int d^d x u(x)$ should have the same scaling dimension as the gap, i.e. z , which immediately implies that the scaling dimension of $u(x)$ is $\Delta_u = d + z - 1/\nu$ and that $\dim[\chi_{2r+2}] = d - 2zr - 2/\nu$ [De Grandi *et al.*(2010b)De Grandi, Gritsev, and Polkovnikov, Schwandt *et al.*(2009)Schwandt, Alet, and Capponi]. Notice finally that if the scaling dimension of χ_{2r+2} is positive then the asymptotics in Eq. (14.8) gives a subleading correction to the regular analytic part, $P_{\text{ex}} \approx \text{const } L^d v^2$, coming from the high energy (ultra-violet) contribution to the susceptibility. We will discuss its importance in the next section.

Other possible generalizations of the scaling law Eq.(14.1) involve studies of defect production in systems where the dynamics describes the passage through quantum critical lines. A concrete example of such a situation occurs in the transverse-field XY model [Mukherjee *et al.*(2008)Mukherjee, Dutta, and Sen, Divakaran *et al.*(2008)Divakaran, Dutta, and Sen]. Here the quench takes one through a gapless line where the critical point occurs at the same momenta ($\vec{k} = 0$ for the present case) at each point on the line. A detailed analysis shows that in such cases, for critical lines with $z = \nu = 1$, the defect density still obeys a universal scaling law albeit with a different power: $n \sim v^{1/3}$ [Mukherjee *et al.*(2008)Mukherjee, Dutta, and Sen, Divakaran *et al.*(2008)Divakaran, Dutta, and Sen, Mondal *et al.*(2009)Mondal, Sengupta, and Sen]. The second situation involves the 2D Kitaev model [Sengupta *et al.*(2008)Sengupta, Sen, and Mondal], where a quench once again involves the passage through a gapless line with an energy gap vanishing for different momenta at different points on the line. It can be shown that in such a case, the defect density scales as $\sqrt{v}$ for 2D Kitaev model instead of the expected $n \sim v$ behavior for 2D systems with $z = \nu = 1$ [Sengupta *et al.*(2008)Sengupta, Sen, and Mondal]. A generalization of these results for linear quenches through critical lines with arbitrary z and ν has also been worked out [Mukherjee *et al.*(2008)Mukherjee, Dutta, and Sen, Mondal *et al.*(2008)Mondal, Sen, and Sengupta, Mondal *et al.*(2009)Mondal, Sengupta, and Sen, Sengupta *et al.*(2008)Sengupta, Sen, and Mondal]. Many other situations involving anisotropic phase transitions and quenching through multi-critical points were analyzed in literature leading to various deviations from the scaling (14.4) [Deng *et al.*(2008)Deng, Ortiz, and Viola, Bermudez *et al.*(2009)Bermudez, Patanè, Amico, and Martin-Delgado, Sen and Vishveshwara(2010)].

In order to detect experimentally the density of excitations generated by passing through a QCP, it is evident that one should distinguish between situations where such excitations are long-lived quasi-particles (as for nearly integrable systems) or decay after being created (as for non-integrable systems). In the first case, the presence of excitations above the ground state could for example be detected by measuring correlation functions long after the quench. This has been shown for a Quantum Ising chain linearly tuned through its quantum critical point [Cherng and Levitov(2006)]. The presence of defects with respect to the ferromagnetic ground state lead to exponentially decaying correlations of the order parameter superimposed, for slow enough quenches, to characteristic oscillations with period scaling with the quench velocity. This second feature is observed for abrupt quenches as well [Sengupta *et al.*(2004)Sengupta, Powell, and Sachdev] and is a consequence of the integrability of the model [Rossini *et al.*(2010)Rossini, Silva, Mussardo, and Santoro]. If in turn we consider a generic non-integrable system, it is necessary to express deviations from adiabaticity in terms of quantities, such as the excess energy or the entropy generated by passing through the QCP, which are not sensitive to the decay of quasi-particles, but can still be related to the density of excitations created close to the quantum critical point. Energy can be unambiguously determined both experimentally and numerically for both integrable and non-integrable sys-

tems and its scaling with the rate of quench can be used to differentiate between different nonadiabatic regimes [Polkovnikov and Gritsev(2008), Eckstein and Kollar(2010), Moeckel and Kehrein(2010)]. The excess energy or equivalently heat (Q) [Polkovnikov(2008b)] generated during the quench process is in general universal if the process ends near the critical point. The scaling of Q is associated with the singularity of the susceptibility χ_{2r+1} at the critical point [De Grandi and Polkovnikov(2010)], which implies that for relevant perturbations in the thermodynamic limit

$$Q \sim |v|^{(d+z)\nu/(z\nu r+1)}. \quad (14.10)$$

Unless one considers cyclic processes, the drawback of using heat as a measure of non-adiabaticity is that it is hard to separate it from the adiabatic part of the energy change, corresponding to the limit $v \rightarrow 0$. Moreover, if the position of the QCP is not exactly known, the heat becomes sensitive to the nonuniversal details of the spectrum at the final point of the evolution. A way out could be to measure the higher moments of the energy or the whole distribution function of the energy, connected to the statistics of the work [Talkner *et al.*(2007)Talkner, Lutz, and Hänggi, Silva(2008)] in finite size systems. In particular, in the case of abrupt quenches close to critical points the statics of the work is characterized by sharp edge singularities [Silva(2008), Paraan and Silva(2009)]. A related natural measure of non-adiabaticity is obtained by focusing on the entropy since entropy is conserved only for slow (adiabatic) processes, while is expected to increase as the system passes through the QCP. Moreover entropy production can be detected experimentally in certain systems, e.g. in cold atoms by driving the system to the weakly interacting regime, where the relation between entropy and energy is known [Luo *et al.*(2007)Luo, Clancy, Joseph, Kinast, and Thomas]. Theoretically, the quantification of entropy production in a closed quantum system is rather subtle. Indeed, the von Neumann's entropy of the entire system, being conserved throughout unitary evolution [Landau and Lifshitz(1980)], cannot be a good characterization of deviations from adiabatic dynamics. However, the concept of diagonal-entropy [Polkovnikov(2008a)], defined as $S_d = -\sum_n \rho_{nn} \ln(\rho_{nn})$, where ρ_{nn} are the diagonal matrix elements of the density matrix in the instantaneous basis, avoids this difficulty. In stationary systems, the diagonal entropy is nothing but the von Neumann's entropy of the time averaged density matrix, also called diagonal ensemble. It is clear that the diagonal entropy is generated only due to nonadiabatic transitions and thus satisfies the key requirement of the thermodynamic entropy: it is conserved for adiabatic processes, and can only increase or stay constant in closed systems if the initial state is stationary [Polkovnikov(2008a)]. For initial equilibrium states the diagonal entropy also satisfies fundamental thermodynamic relation: $dE = TdS - Fd\lambda$, where $F = -\langle \partial_\lambda H \rangle$ is the generalized force. For particular noninteracting models, the scaling of the diagonal entropy was found to be the same as that of the density of quasi-particles (14.4) [De Grandi *et al.*(2010a)De Grandi, Gritsev, and Polkovnikov, De Grandi *et al.*(2010b)De Grandi, Gritsev, and Polkovnikov, Mukherjee *et al.*(2008)Mukherjee, Dutta, and Sen]. It is also possible to analyze the entanglement entropy [Vidal *et al.*(2003)Vidal, Latorre, Rico, and Kitaev, Refael and Moore(2004), Calabrese and Cardy(2004), Calabrese and Cardy(2005)], i.e. the von Neumann's entropy of the reduced density matrix of a part of the system, and in particular at its time evolution following a quench [Cincio *et al.*(2007)Cincio, Dziarmaga, Rams, and Zurek, Pollmann *et al.*(2010)Pollmann, Mukerjee, Green, and Moore, Sengupta and Sen(2009)]. For specific 1D spin systems it was found that the entanglement entropy scales logarithmically with the quench time [Cincio *et al.*(2007)Cincio, Dziarmaga, Rams, and Zurek, Pollmann *et al.*(2010)Pollmann, Mukerjee, Green, and Moore]. Notice however that, at the moment, it is unclear how one can measure entanglement in many body systems and the entanglement entropy in particular (see some suggestions in Refs. [Klich *et al.*(2006)Klich, Refael, and Silva, Klich and Levitov(2009)]) and what its relation with the thermodynamic entropy is.

Finally, another interesting question that has received attention is the connection between microscopic dynamics and thermodynamics in the semiclassical limit. In general, in classical systems there is no simple analogue to the instantaneous energy levels, the key concept in analysis of quantum systems. Such analogue, however, does exist in the case of periodic motion. Then in the semiclassical limit the stationary levels are found from the Bohr quantization (or more accurately from the WKB approximation [Landau and Lifshitz(1981)]), which states that the reduced action in the stationary orbit should be quantized. In classical mechanics it is known that the reduced action is an adiabatic invariant, i.e. it is conserved for the adiabatic evolution [Landau and Lifshitz(1982)]. From the previous discussion applied to quantum systems we can deduce that near singularities like second order phase transitions, conservation of adiabatic invariants should be violated and this is indeed the case [Landau and Lifshitz(1982)]. In Refs. [Altland *et al.*(2009)Altland, Gurarie, Kriecherbauer, and Polkovnikov, Itin and Törmä(2009a), Itin and Törmä(2009b)] slow dynamics was analyzed for a particular many-body generalization of the Landau-Zener model (closely related to the Dicke model) in the semiclassical limit. It was found that the nontrivial power law scaling of the number of excitations in this system (similar to Eq. (14.1)) follows from the changes of adiabatic invariants near the singularity, which in turn corresponds to a quantum critical point in the thermodynamic limit. It is interesting that quantum fluctuations in this problem entered only through the initial distribution of the adiabatic invariants but not through the equations of motion. The corresponding truncated Wigner approximation turned out to be very accurate in all regimes of the dynamics [Altland *et al.*(2009)Altland, Gurarie, Kriecherbauer, and Polkovnikov, Kiegel(2009)]. It would be very important to understand precise connections between transitions among microscopic energy levels in the quantum case and changes of suitable generalizations of adiabatic invariants in the classical limit.

14.1.3 Slow dynamics in gapped and gapless systems.

Up to now we have discussed the universal dynamics resulting from the variation of a control parameter λ through a quantum critical point. However the dynamics of interacting quantum systems has interesting regimes even when the system is fully gapped or gapless for the entire duration of the protocol. The classification of these regimes is important in order to understand dissipation and to develop optimal protocols minimizing non-adiabatic effects. Many of these questions are currently a subject of intense theoretical research in different contexts, from quantum computation to transport.

The general formulas Eq.(14.6)-(14.7), which describe the density of excitations $P_{ex}(v)$ generated by a variation of the control parameter, tell us that if the system remains fully gapped throughout the evolution, then P_{ex} and n_{ex} will have a quadratic scaling with v whenever the susceptibility χ_{2r+2} evaluated at the initial and final couplings is finite [De Grandi and Polkovnikov(2010), Rigolin *et al.*(2008)Rigolin, Ortiz, and Ponce]. A similar argument shows that the heat Q is also quadratic in v if χ_{2r+1} is finite. This quadratic scaling is characteristic of any quantum system. Let us point that in the standard Landau-Zener problem in the slow limit $\Delta^2 \gg v$ if we start in the ground state at $t \rightarrow -\infty$ and let the system evolve up $t \rightarrow +\infty$, the transitions to excited states are exponentially suppressed as a result of destructive interference between multiple transitions [Vitanov and Garraway(1996), Vitanov(1999)]. At the same time in the intermediate stages of the evolution the transition probability reaches much higher values which scale only quadratically with the rate v . For example, if one considers a process which starts at $t_0 \rightarrow -\infty$ the transition probability to the instantaneous excited state at the moment t in the slow limit $v/\Delta^2 \ll 1$ can be approximated by [Vitanov(1999)]:

$$p_{ex} \approx \frac{v^2 \Delta^2}{16(g(t)^2 + \Delta^2)^3}. \quad (14.11)$$

If $t > 0$ there is an additional exponential term which leads to Eq. (14.3) at $t \rightarrow +\infty$. If the process starts at $t_0 = 0$ exactly in the symmetric point, where $g(0) = 0$ the quadratic asymptotics (14.11) is also recovered [Cucchietti *et al.*(2007)Cucchietti, Damski, Dziarmaga, and Zurek]. This scaling occurs as a result of the discontinuity of the first derivative of $g(t)$ at the moment where the process starts or ends or following a discontinuity in any other point of the evolution (see e.g. Refs. [Damski and Zurek(2006), Divakaran *et al.*(2010)Divakaran, Dutta, and Sen] for particular cases). Likewise if there is a discontinuity in the second order derivative of $g(t)$ asymptotically the transition probability in the LZ problem scales quadratically with acceleration. More generally for the protocol $g(t) = g_0 + v(t - t_0)^r/r! \theta(t - t_0)$, where $\theta(t)$ is the step function, one can show that [De Grandi and Polkovnikov(2010)]

$$p_{\text{ex}}(t \rightarrow \infty) \approx \frac{v^2 \Delta^2}{16(g_0^2 + \Delta^2)^{2r+1}}. \quad (14.12)$$

As we discussed in the previous section this formula applies even to sudden transitions ($r = 0$) where it reduces to the result of the ordinary perturbation theory. The same expression applies to the reverse process. If both the initial and final couplings are finite then the resulting transition probability is asymptotically determined by the sum of probabilities associated with discontinuities of derivatives of $g(t)$ at the initial and final times of the evolution plus additional interference terms which highly oscillate in the slow limit. Let us point out that in the LZ problem (and in general in gapped systems) one can suppress power law asymptotics of the transition probability by starting and ending the protocol infinitely smoothly, e.g. $g(t) \sim g_0 + g_1 \exp[-\tau/(t - t_0)]\theta(t - t_0)$. In this case only the non-analytic term in the transition probability survives and we are back to Eq. (14.3) where v is the time derivative of $g(t)$ near the symmetric point where $g(t) = 0$.

In gapless systems the situation becomes qualitatively different. In this case the adiabatic susceptibilities can diverge leading to non-analytic dependence of the corresponding quantities on v , as in the case of the crossing of a quantum critical point. For example, it is straightforward to see that for marginal perturbations in a generic gapless phase the scaling dimension of the adiabatic susceptibility $\dim[\chi_{2r+2}] = d - 2zr$. It becomes negative in low dimensions $d < 2zr$ leading to a non-analytic scaling of the density of excitations with v . Thus depending on dimensionality in gapless systems one expects at least two different regimes of the response of the system to a slow external perturbation: analytic and non-analytic. These regimes were first suggested in Ref. [Polkovnikov and Gritsev(2008)] together with a third regime where adiabaticity is violated in the thermodynamic limit and Q or n_{ex} become proportional to a power of the system size or some other large length scale associated with some irrelevant operator. In this regime, which can be realized in low-dimensional bosonic systems, the scaling Eq. (14.1) is violated. At the moment it is unclear how generic it is and what sets the scaling of various quantities.

A close inspection of the adiabatic susceptibility shows that in general the analytic (quadratic) part of the heat and energy of excitations on v comes from the high energy (or ultra-violet) part of the spectrum, while the non-analytic part comes from low energies. This was indeed shown to be the case in several situations, from the sine-Gordon model [De Grandi *et al.*(2010b)De Grandi, Gritsev, and Polkovnikov], to the Falicov-Kimball model [Eckstein and Kollar(2010)] and the turning on interactions in a Fermi liquid [Moeckel and Kehrein(2010)]. As we pointed above the ultra-violet transitions can be suppressed by avoiding discontinuities in $\lambda(t)$ and its derivatives. However, this is not necessarily the case for the low energy non-analytic contribution. To see this we need to reexpress the excess energy (or density of excitations) in terms of the total time of the process τ . Doing this it was found that in an insulating, gapped phase, the details of the protocol are important and smoother protocols lead to a suppression of non-adiabatic effects, while in a gapless phase

making $\lambda(t)$ smoother does not affect the heating [Eckstein and Kollar(2010)]. This result can be again understood by analyzing the scaling dimension of the susceptibility χ_{2r+1} . According to our discussion for generic gapless systems its scaling dimension is negative when $d + z < 2zr$. Then $Q \sim v^{(d+z)/zr}$ (this result immediately follows from Eq. (14.10) by taking the limit $\nu \rightarrow \infty$). On the other hand, v is related to the total quench time as $v \sim 1/\tau^r$. Thus we see that in this case $Q \sim 1/\tau^{(d+z)/z}$, i.e. indeed independent on r . On the other hand for positive scaling dimension of χ_{2r+1} which is the case for $d + z > 2zr$ and which is always true in gapped systems we have $Q \sim v^2 \sim 1/(\tau)^{2r}$. Since in the adiabatic limit τ is large we see that indeed the heat can be suppressed by increasing r and making $\lambda(t)$ smoother. An interesting open question is finding an optimal protocol for minimizing the non-adiabatic effects within given time τ . It is plausible that the optimal power is determined by a vanishing scaling dimension of the corresponding adiabatic susceptibility χ_{2r+1} . The questions of finding protocols minimizing non-adiabatic effects for gapped systems (with possibility of crossing isolated quantum critical points) were also addressed by approximately minimizing the transition probability and identifying the Riemannian metric tensor underlying the adiabatic evolution [Rezakhani et al.(2009)Rezakhani, Kuo, Hamma, Lidar, and Zanardi, Rezakhani et al.(2010)Rezakhani, Abasto, Lidar, and Zanardi]. Studying the optimization of the protocol taking a system through a QCP it was found the optimal exponent of $\lambda(t) \sim |t|^r \text{sign}(t)$ near the QCP scales logarithmically with the quench time, $r \propto \ln(\tau)$ [Barankov and Polkovnikov(2008)]. This result was also extended to systems with external confining potential [Collura and Karevski(2010)] .

14.1.4 Effects of finite temperature.

In the discussion above we always implicitly assumed that the system is initially prepared in the ground state. An interesting and genuine question is how finite temperature effects modify the picture. In isolated systems temperature enters through initial conditions: the system is prepared in the initial finite temperature equilibrium state and is then dynamically driven out of equilibrium. How is the response of the system affected by the initial thermal fluctuations? One naturally expects that while the transitions to high energy states (quadratic in v) will not be affected by small temperatures in the system, the transitions to the low energy states, which determine the non-analytic contribution to heat and density of excitations, will be very sensitive to temperature. In Refs. [De Grandi et al.(2010a)De Grandi, Gritsev, and Polkovnikov, De Grandi et al.(2010b)De Grandi, Gritsev, and Polkovnikov] (see also Ref. [Gritsev and Polkovnikov(2010)]) studying a particular Sine-Gordon model in the two limits where it could be mapped to free bosons and free fermions, it was shown that the statistics of quasiparticles enters the scaling of both Q and n_{ex} making dynamics more adiabatic (compared to the zero temperature case) for fermions due to Pauli blocking and less adiabatic for bosons due to Bose enhancement. These results were not yet extended to generic interacting systems.

Another aspect of thermalization, the influence of the coupling to an environment setting the temperature on the slow dynamics near quantum critical points, has been studied in Refs. [Patanè et al.(2008)Patanè, Silva, Amico, Fazio, and Santoro, Patanè et al.(2009b)Patanè, Silva, Sols, and Amico, Patanè et al.(2009a)Patanè, Amico, Silva, Fazio, and Santoro, Mostame et al.(2007)Mostame, Schaller, and Schu tzhold, Fubini et al.(2007)Fubini, Falci, and Osterloh]. This setup allows one to analyze the effects of thermal smearing and of dephasing/dissipation on the dynamics of a quantum critical system. Using a combination of kinetic equations and scaling arguments it was found that in this situation the excess energy has two universal contributions, one still given by Eq. (14.10), while the second involving a universal power of temperature replacing the universal power of v [Patanè et al.(2008)Patanè, Silva, Amico, Fazio, and Santoro].

14.1.5 Open problems

While the physics described above is definitely an important example of the emergence of universality in the dynamics of interacting quantum systems, it is evidently a piece, albeit important, of the puzzle that has to be composed in order to understand to which extent the standard concepts of statistical physics can be applied to nonequilibrium problems. Understanding the meaning of *relevance or irrelevance* of a perturbation in generic nonequilibrium processes, extending the notion of universality to nonequilibrium systems, as well as the concept of renormalization group, is a task (or dream) that certainly requires the solution of many specific problems, and a close comparison between experiments and theory.

So far most of the theoretical research focused on analyzing slow dynamics for global quenches, where the external perturbation couples to the whole system. How these results can be extended to local or spatially nonuniform perturbations is an open question. At one extreme limit, one can imagine performing a quench only locally. Then the rest of the system could be seen as a thermal bath. The analysis of a special case of dynamics of a transverse field Ising model where the tuning parameter linearly depends both on time and space has shown that excitations are generally suppressed by nonuniformity of the tuning parameter [Dziarmaga and Rams(2010)]. This suggests that quantitative and qualitative differences may emerge when some of the symmetries of the system, e.g. translational, are broken in the quench process.

Another important issue concerns the connections between adiabaticity in thermodynamics and microscopic dynamics. One of the consequences of the thermodynamic adiabatic theorem is that no heat can be generated in an isolated system during an infinitesimally slow process. More generally according to the second law of thermodynamics in the Thompson's (Kelvin's) form for any cyclic process the system can only increase its energy, i.e. the heat should be always non-negative as long as one starts in equilibrium. This statement, which is obvious if the system is initially in the ground state, has been proven microscopically for a class of passive initial states [Thirring(2002), Allahverdyan and Nieuwenhuizen(2002), Allahverdyan and Nieuwenhuizen(2005), Boksenbojm *et al.*(2010)Boksenbojm, Wynants, and Jarzynski], whose initial density matrix is stationary (diagonal) and monotonically decreasing function of energy: $(\rho_n - \rho_m)(\epsilon_m - \epsilon_n) \geq 0$. This statement also directly follows from analyzing transitions between microscopic energy levels [Polkovnikov(2008b)]. Likewise many statements of thermodynamics related to behavior of entropy including the second law and fundamental thermodynamic relations are recovered using the concept of diagonal entropy [Polkovnikov(2008a)]. At the same time there are many open questions remaining: what are the time scales involved in the definition of adiabaticity? How one can microscopically define adiabatic time scales in interacting systems and why these time scales are much shorter than inverse distance between many-body levels (see e.g. discussion in Ref. [Balian(1991)])? And finally, what is the role of integrability in nonequilibrium thermodynamics? These questions are closely connected to the microscopic origin of conventional dissipation, which in turn is also very likely related to the combination of nonadiabatic creation of the elementary excitations and their following relaxation or dephasing. From the discussion above, we can anticipate anomalous dissipation near critical points and in gapless low-dimensional systems.

14.2 Effects of Integrability and its breaking: ergodicity and thermalization.

Let us now turn to one of the most natural questions to be addressed when studying the dynamics of a closed many-body quantum system: are interactions within the system sufficient to make the system behave ergodically? If we focus on local degrees of freedom, e.g. a few spins in a spin chain, can the rest of the system be always thought as an effective

thermal bath? And if this is not possible, are there some observable effects on the system dynamics? While these questions are definitely connected to quantum ergodicity [Goldstein *et al.*(2010)Goldstein, Lebowitz, Tumulka, and Zanghi], a topic with a long history dating back to the early days of quantum mechanics [von Neumann(1929), Pauli and Fierz(1937), Mazur(1968), Suzuki(1971), Peres(1984), Deutsch(1991), Srednicki(1994)], the past few years have brought a great deal of progress in the context of closed many-body systems. The main motivation came from recent experiments on low dimensional cold atomic gases described in some detail in Sec. 14.3 in this Colloquium [Greiner *et al.*(2002b)Greiner, Mandel, Hansch, and Bloch, Kinoshita *et al.*(2006)Kinoshita, Wenger, and Weiss]. The experimental availability of essentially closed (on the time scales of experiments) strongly correlated systems together with the awareness of the conceptual importance of these issues in a number of areas (e.g. transport problems, many-body localization, integrable and non-integrable dynamics) have stimulated a lot of interest on *quantum thermalization*. Below we will give a synthetic view on a number of recent important developments on this subject, starting with the discussions of the general concepts of ergodicity and thermalization, and then moving to the discussion of many-body systems and integrability.

14.2.1 Quantum and classical ergodicity.

While the idea of ergodicity is well defined in classical mechanics, the concept of *quantum ergodicity* is somewhat less precise and intuitive. Classically, an interacting system of N particles in d dimensions is described by a point X in a $(2dN)$ -dimensional phase space. The intuitive content of the word "ergodic", i.e. the equivalence of phase space and time averages, can be then formalized by requiring that if we select an initial condition X_0 having initial energy $H(X_0) = E$, where H is the Hamiltonian of the system, then

$$\overline{\delta(X - X(t))} \equiv \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T dt \delta(X - X(t)) = \rho_{\text{mc}}(E), \quad (14.13)$$

where $\rho_{\text{mc}}(E)$ is the microcanonical density of the system on the hyper-surface of the phase space of constant energy E , and $X(t)$ is the phase space trajectory with initial condition X_0 . Of course if this condition is satisfied by all trajectories, then it is also true for every observable. We immediately see that in order to have ergodicity, the dynamics cannot be arbitrary: the trajectories $X(t)$ have to cover uniformly the energy hyper-surface for almost every initial condition X_0 .

The most obvious quantum generalization of this notion of ergodicity is arduous [von Neumann(1929)]. Let us first of all define a quantum microcanonical density matrix: given a Hamiltonian with eigenstates $|\Psi_\alpha\rangle$ of energies E_α , a viable definition of the microcanonical ensemble is obtained by coarse graining the spectrum on energy shells of width δE , sufficiently big to contain many states but small on macroscopic scales. Denoting by $\mathcal{H}(E)$ the set of eigenstates of H having energies between E and $E + \delta E$, we define $\hat{\rho}_{\text{mc}}(E) = \sum_{\alpha \in \mathcal{H}(E)} 1/\mathcal{N} |\Psi_\alpha\rangle\langle\Psi_\alpha|$, where $\mathcal{N}$ is the total number of states in the micro-canonical shell. Let us now ask the most obvious question: given a generic initial condition made out of states in a microcanonical shell, $|\Psi_0\rangle = \sum_{\alpha \in \mathcal{H}(E)} c_\alpha |\Psi_\alpha\rangle$, is the long time average of the density matrix of the system given by the microcanonical density matrix? The answer to this question for a quantum system is, unlike in the classical case, almost always no, as J. von Neumann realized already in 1929 [von Neumann(1929)]. More precisely, if we assume the eigenstates of the system not to be degenerate, the time average is

$$\overline{|\Psi(t)\rangle\langle\Psi(t)|} = \sum_{\alpha} |c_\alpha|^2 |\Psi_\alpha\rangle\langle\Psi_\alpha| = \hat{\rho}_{\text{diag}}, \quad (14.14)$$

where $|\Psi(t)\rangle$ is the time evolved of $|\Psi_0\rangle$. This object is known in the modern literature as the *diagonal ensemble* [Rigol *et al.*(2007)Rigol, Dunjko, Yurovsky, and Olshanii, Rigol *et al.*(2008)Rigol, Dunjko, and Olshanii, Rigol(2009)]. Notice now that the most obvious definition of ergodicity, i.e. the requirement $\rho_{\text{mc}} = \rho_{\text{diag}}$, implies that $|c_\alpha|^2 = 1/\mathcal{N}$ for every α , a condition that can be satisfied only for a very special class of states. Quantum ergodicity in the strict sense above is therefore almost never realizable [von Neumann(1929), Goldstein *et al.*(2010)Goldstein, Lebowitz, Tumulka, and Zanghi].

Our common sense and expectations, which very frequently fail miserably in the quantum realm, make us nevertheless believe that, in contrast with the arguments above, macroscopic many-body systems should behave ergodically almost always, unless some very special conditions are met (e.g. integrability). The key to understand ergodicity is therefore to look at quantum systems in a different way, shifting the focus on *observables* rather than on the states themselves [von Neumann(1929), Peres(1984), Mazur(1968)]. Given a set of *macroscopic observables* $\{M_\beta\}$ a natural expectation from an ergodic system would be for every $|\Psi_0\rangle$ on a microcanonical shell $\mathcal{H}(E)$

$$\langle \Psi(t) | M_\beta(t) | \Psi(t) \rangle \rightarrow_{t \rightarrow +\infty} \text{Tr}[M_\beta \hat{\rho}_{\text{mc}}] \equiv \langle M_\beta \rangle_{\text{mc}}, \quad (14.15)$$

i.e. that looking at macroscopic observables long after the time evolution started makes the system appear ergodic for every initial condition we may choose in $\mathcal{H}(E)$. One needs a certain care in defining the infinite time limit here, since literally speaking it does not exist in finite systems because of quantum revivals. A proper way to understand this limit is to require that Eq. (14.15) holds in the long time limit at almost all times. Mathematically this means that the mean square difference between the LHS and RHS of Eq. (14.15) averaged over long times is vanishingly small for large systems [Reimann(2008)]. To avoid dealing with these issues ergodicity can be defined using the time average, i.e. requiring that

$$\overline{\langle \Psi(t) | M_\beta(t) | \Psi(t) \rangle} = \text{Tr}[M_\beta \hat{\rho}_{\text{diag}}] = \langle M_\beta \rangle_{\text{mc}}. \quad (14.16)$$

Notice that if the expectation value of M_β relaxes to a well defined state in the sense described above, this state will coincide with the time averaged state and the two definitions of ergodicity Eq.(14.15)-(14.16) will be equivalent. If the conditions above are satisfied then in loose terms $\hat{\rho}_{\text{mc}}$ can be considered as equivalent to $\hat{\rho}_{\text{diag}}$. J. von Neumann proved that if the system satisfies some very natural requirements (e.g. absence of resonances), and the set $\{M_\beta\}$ is constructed in such a way as to define *macrostates* of the system, which obviously requires the observables to be coarse grained on the various microcanonical shells $\mathcal{H}(E)$ and mutually commuting, then a form of ergodicity is observed (sometimes referred to a *normal typicality*). In particular, for every $|\Psi_0\rangle$ and *almost* every set $\{M_\beta\}$ the diagonal and microcanonical ensembles are equivalent [Goldstein *et al.*(2010)Goldstein, Lebowitz, Tumulka, and Zanghi, von Neumann(1929)]. More recently it was proven that the whole density matrix of a small subsystem of a bigger system which is placed initially in a typical eigenstate is described by the canonical ensemble [Popescu *et al.*(2006)Popescu, Short, and Winter]. In Ref. [Gogolin *et al.*(2011)Gogolin, Mller, and Eisert] these results were further extended to the problem of measurement and decoherence. Particular care is nevertheless needed in relating these statements to the dynamics and thermalization of actual many body systems, since physical initial conditions in quenched system almost never correspond to eigenstates of a new Hamiltonian.

14.2.2 Nonergodic behavior in integrable systems: the generalized Gibbs ensemble

While the statements above are very general, their application to specific systems is not at all straightforward. Looking at a concrete many-body system, it is of primary interest

not just to find out whether in principle a set of macroscopic observables that behave ergodically exists, but whether specific and natural observables, such as the magnetization for spin chains, density for cold atomic gases, or various correlation functions behave ergodically or not. In this respect, experiments tell us that ergodicity is not at all guaranteed [Kinoshita *et al.*(2006)Kinoshita, Wenger, and Weiss] if the closed system is integrable or nearly integrable. While this fact was expected [Mazur(1968), Suzuki(1971), Girardeau(1969), Girardeau(1970), Barouch *et al.*(1970)Barouch, McCoy, and Dresden] recent research on the dynamics of integrable systems has focused on finding ways to predict the asymptotical states taking into account integrability, i.e. the presence of many constants of motion.

Let us discuss how this can be done qualitatively using the simplest example of integrable system, a periodic harmonic chain of finite length described by the Hamiltonian

$$H = \sum_{j=1}^{M-1} \left[\frac{p_j^2}{2m} + \frac{m\nu^2}{2}(x_j - x_{j+1})^2 \right], \quad (14.17)$$

where x_j are deviations of particles from the equilibrium positions and p_j are their momenta; we use the identification $x_M \equiv x_0$. Let us imagine that initially we deform the system in a particular way and ask how this deformation evolves with time. We note that since this is a harmonic system described by linear equations of motion the following analysis also applies to quantum systems. From elementary physics we know that the initial deformation splits into normal modes characterized by the quasi-momenta $q_n = 2\pi n/M$, where n is integer $n \in [0, M-1]$, and the dispersion $\omega_q = 2\nu \sin q/2$. This system obviously does not thermalize even at long times because there is no energy exchange between modes. This does not imply though that it can not reach a well defined asymptotic state in the long time limit [Barthel and Schollwöck(2008), Cramer and Eisert(2010)]. To illustrate this point consider for example the displacement of the j -th atom at time t after some initial displacement:

$$x_j(t) = \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_{n=0}^{M-1} x_{q_n}(t) e^{iq_n j}. \quad (14.18)$$

$x_q(t) = A_q \cos[\omega_q t]$, where A_q is a complex amplitude determined by initial conditions (for simplicity we assumed an initial stationary state). Let us now analyze qualitatively the dynamics of this system. At short times, provided that the initial modulation is smooth and only modes with small momenta ($q \ll \pi$) are excited we can linearize the spectrum $\omega_q \approx \nu q$. Clearly in this case we recover periodic motion of the wave-packet with a period equal to the ratio of the system size and sound velocity: $T = M/\nu$. This persistent motion is characteristic of the absence of any relaxation. However, as time gets longer deviations of the dispersion from linear become more important. In particular, when $t^*(\omega_{\bar{n}+1} + \omega_{\bar{n}-1} - 2\omega_{\bar{n}}) \sim 1$, where $\omega_{\bar{n}}$ is the central frequency of the wavepacket, correlations between phases among the different modes are lost and they can be treated as essentially random numbers. For our model $t^* \sim M^2/\omega_{\bar{n}}$. At long times $t \gg t^*$ the different momentum modes become uncorrelated and the system reaches the asymptotic stationary state in a sense we defined earlier (it can be found close to that state at almost all times). For this asymptotic state the only relevant information about the initial conditions is encoded in the M mode amplitudes $|A_q|$ or equivalently in their squares $|A_q|^2$ proportional to the occupancies of the modes of energy E_q , which are the integrals of motion. Note though that there are special modes corresponding to momenta q and $-q$ which are exactly degenerate. The correlations between A_q and $A_{-q}^* = A_q^*$ thus never disappear and in general one needs to fix M additional constraints representing the relative phases of the complex amplitudes. For example, if the initial configuration is symmetric $x_j = x_{-j}$ then A_q is real, meaning that the phases of all modes are identical. Then it is easy to check that with this constraint $\langle x_j^2(t) \rangle$ acquires spatial dependence on j even in the long time limit. This dependence can not be

recovered by fixing only mode occupancies. Only when these phases are unimportant e.g. they average to zero or if there are no degeneracies between the normal modes the asymptotic state is fully fixed by the integrals of motion. Thus in contrast with ergodic systems where only the energy needs to be fixed, the long time behavior of our integrable model can be reproduced by fixing the M integrals of motion and possibly $\sim M$ other constraints if there are degeneracies. While the number of commuting (local) integrals of motion is large, equal to the system size M , it is vastly smaller than the total number of states which scales with M exponentially.

Let us now see how these considerations are transposed in many-body systems, focusing on another simple integrable model, the Quantum Ising chain [Sachdev(1999)] described by the Hamiltonian: $H_0 = -\sum_i \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + g \sigma_i^z$. Here $\sigma_i^{x,z}$ are the spin operators at site i and g is the strength of the transverse field. This model gives one of the simplest examples of quantum phase transition, with a quantum critical point at $g_c = 1$ separating two mutually dual gapped phases, a quantum paramagnet ($g > g_c$) and a ferromagnet ($g < g_c$).

In the Quantum Ising chain the *local* transverse magnetization, $M^x = \sum_i \sigma_i^x$ is a non-ergodic operator [Mazur(1968), Girardeau(1969), Girardeau(1970), Barouch *et al.*(1970) Barouch, McCoy, and Dresden]. To see this, it is useful to employ a Jordan-Wigner transformation that reduces the problem to a free fermion model [Sachdev(1999)]. In terms of the fermionic operators c_k relative to modes of momentum $k = 2\pi n/L$ the Hamiltonian takes the form

$$H = 2 \sum_{k>0} (g - \cos(k)) (c_k^\dagger c_k - c_{-k} c_{-k}^\dagger) + i \sin(k) (c_k^\dagger c_{-k}^\dagger - c_{-k} c_k), \quad (14.19)$$

Under this mapping the transverse magnetization becomes $M^x = -2 \sum_{k>0} (c_k^\dagger c_k - c_{-k} c_{-k}^\dagger)$. The eigenmodes γ_k of energy $E_k = 2\sqrt{(g - \cos(k))^2 + \sin(k)^2}$ diagonalizing the Hamiltonian are related to the fermionic operators c_k by a Bogoliubov rotation, $c_k = \cos(\theta_k) \gamma_k - i \sin(\theta_k) \gamma_{-k}^\dagger$, with $\tan(2\theta_k) = \sin(k)/(g - \cos(k))$. In Heisenberg representation the operators γ_k acquire simple time dependence: $\gamma_k(t) = \gamma_k(0) \exp[-iE_k t]$. As in the previous problem of a harmonic chain if the energies E_k are incommensurate, at sufficiently long times different momentum modes become statistically independent from each other. This statement does not apply to modes with opposite momenta k and $-k$ which have identical energies. However, if these correlations are not important then in the long time limit (see below) each mode can be characterized by the conserved quantity $n_k = \langle \gamma_k^\dagger \gamma_k \rangle$. Let us now consider unitary dynamics of the transverse magnetization starting with a generic initial condition $|\Psi_0\rangle$. The time evolution of the operator $M^x(t)$ expressed in terms of the eigenmodes of the Hamiltonian is

$$M^x(t) = -2 \sum_{k>0} \cos(2\theta_k) (\gamma_k^\dagger \gamma_k - \gamma_{-k} \gamma_{-k}^\dagger) + i \sin(2\theta_k) (\gamma_{-k} \gamma_k e^{-2iE_k t} - \gamma_k^\dagger \gamma_{-k}^\dagger e^{2iE_k t}) \quad (14.20)$$

In the long time limit only the diagonal terms in the sum survive, while the off diagonal ones, describing creation or destruction of two fermions average to zero. Therefore for any initial condition $|\Psi_0\rangle$ the asymptotic value attained by the transverse magnetization is

$$\overline{\langle M^x(t) \rangle} = -2 \sum_{k>0} \cos(2\theta_k) (\langle \gamma_k^\dagger \gamma_k \rangle - \langle \gamma_{-k} \gamma_{-k}^\dagger \rangle). \quad (14.21)$$

This asymptotic value is therefore perfectly described by the set of the occupation numbers n_k .

The result above leads one to conjecture that the asymptotic state is described by a Gibbs-like statistical ensemble of the type [Rigol *et al.*(2007) Rigol, Dunjko, Yurovsky, and Olshanii]

$$\rho_G = \frac{e^{-\sum_k \lambda_k \gamma_k^\dagger \gamma_k}}{Z}, \quad (14.22)$$

where the Lagrange multipliers λ_k are fixed by requiring that $n_k \equiv \langle \Psi_0 | \gamma_k^\dagger \gamma_k | \Psi_0 \rangle = \text{Tr}[\rho_G \gamma_k^\dagger \gamma_k] = \langle \gamma_k^\dagger \gamma_k \rangle_G$. The ensemble defined above in Eq. (14.22) can be seen as a particular case of the ensemble

$$\hat{\rho}_G = \frac{e^{-\sum_\alpha \lambda_\alpha I_\alpha}}{Z}, \quad (14.23)$$

known as the generalized Gibbs ensemble (GGE) or the maximum entropy ensemble and introduced by Jaynes [Jaynes(1957)] to describe the equilibrium state of a system possessing N constant of motions I_k . A recent conjecture [Rigol *et al.*(2007)Rigol, Dunjko, Yurovsky, and Olshanii] proposed to use the GGE to describe the asymptotic state of a generic quantum integrable model. This proposal had however to face two obvious subtleties. It is first of all to be specified how to choose the I_k in Eq.(14.23). Indeed, if all constants of motion would be admissible, including non-local ones, then one would obviously and tautologically describe the asymptotic state (both for integrable and non-integrable systems), as one can easily see by choosing as I_k the projectors onto the eigenstates of the Hamiltonian. The way out comes however by observing that in standard thermodynamics the Gibbs ensemble emerges for small subsystems from the assumption of statistical independence between sufficiently big subsystems. In this derivation the additivity of a conserved quantity - energy - plays a crucial role. This is the reason why the probability of a given configuration is exponential in energy and not e.g. in energy squared [Kardar(2007)]. Similar arguments apply to any additive integrals of motion so that statistical independence and invariance of the ensemble to the choice of a subsystem of an integrable system puts strong constraints on the choice of the integrals of motion in GGE when the latter is applied to subsystems of an integrable system. In this respect the average occupation numbers of different momentum modes used in Eq. (14.22) become approximately additive for small subsystems. This approximate additivity of integrals of motion was recently discovered in Ref. [Cassidy *et al.*(2011)Cassidy, Clark, and Rigol] for another integrable system of one-dimensional hard-core bosons. In particular, it was noticed that the integrals of motion I_α and the lagrange multipliers λ_α in that case can be written as a smooth functions of α/N implying that in large systems the argument of the exponent entering Eq. (14.23) can be written in the extensive (additive) form: $\sum_\alpha \lambda_\alpha I_\alpha \approx L \int_0^1 d\xi, I(\xi)\lambda(\xi)$, where $\xi = \alpha/L$. This suggests that GGE can be defined through a smooth function $\lambda(\xi)$, which replaces the temperature in the ergodic systems.

There is a second subtlety in applying the GGE to quantum systems. Here the most natural definition of integrability is based on requirement that the system has well defined quasi-particles that maintain their identity upon scattering (see Ref. [Caux and Mossel(2011)] for a more detailed discussion), i.e. scattering is purely elastic and there is no production of particles or dissipation associated to it [Sutherland(2004), Mussardo(2009)]. This notion can be made precise in continuum integrable models, such as the Luttinger liquid or the Sinh-Gordon model, which can emerge as low energy descriptions of other integrable models, such as the critical XXZ chain and the Lieb-Liniger gas. In these systems it is natural to associate the $\hat{I}_\alpha$ to the occupation numbers of the quasi-particle states. More specifically, considering a generic one dimensional relativistically invariant integrable system with say a single species of quasi-particles of mass m , energy $E = m \cosh(\theta)$ and momentum $p = m \sinh(\theta)$ (θ is the rapidity), the quasi-particles can be described by annihilation operators $\hat{A}(\theta)$ satisfying the algebra $\hat{A}(\theta_i)\hat{A}(\theta_j) = S(\theta_i - \theta_j)\hat{A}(\theta_j)\hat{A}(\theta_i)$, where S is the S-matrix of the two particle scattering. Similar relations are valid for the products of creation, and creation-annihilation operators [Mussardo(2009)]. Since the Hamiltonian is by definition diagonal in $\hat{A}(\theta)$, $H = \int d\theta E(\theta) \hat{A}^\dagger(\theta) \hat{A}(\theta)$, and every eigenstate can be written as $|\theta_1, \dots, \theta_n\rangle = \hat{A}^\dagger(\theta_1) \cdots \hat{A}^\dagger(\theta_n)|0\rangle$, with $\theta_1 > \dots > \theta_n$, in this case it is rather natural to postulate the form

$$\hat{\rho}_G = \frac{e^{-\int d\theta \lambda(\theta) \hat{A}^\dagger(\theta) \hat{A}(\theta)}}{Z}, \quad (14.24)$$

for the generalized Gibbs ensemble [Fioretto and Mussardo(2010)]. This ensemble is a direct generalization of the GGE for the Quantum Ising Model, where $S = -1$. For this general class of integrable systems and a specific class of *translationally invariant* initial states it was indeed shown the long-time limit of the *average* of local operators is well described by this ensemble [Fioretto and Mussardo(2010)]. Such initial states can be written as

$$|\Psi_0\rangle = \mathcal{N} e^{-\int d\theta K(\theta) A^\dagger(\theta) A^\dagger(-\theta)}, \quad (14.25)$$

which in turn are similar to the so-called *integrable boundary states* in statistical field theory [Ghoshal and Zamolodchikov(1994)]. Such states naturally emerge in experimentally relevant systems, for example when studying dephasing in split quasi-1d condensates [Gritsev *et al.*(2007)Gritsev, Demler, Lukin, and Polkovnikov] or in the Quantum Ising model, when studying a quantum quench from a transverse field γ_i to a transverse field γ_f [Silva(2008)].

A very interesting idea related to the GGE was suggested by Gurarie [Gurarie(1995)] to explain the steady state of a driven nearly integrable system. It was shown that the steady state distribution of the wave amplitudes corresponding to different momenta (see Ref. [Zakharov *et al.*(1992)Zakharov, L'vov, and Falkovich] for details) can be obtained by taking the probability density $\rho \propto \exp[-F]$, where F is a (complex) combination of the approximate integrals of motion found perturbatively. In terms of this ensemble one recovers the correct power law distribution of the amplitudes of waves with the momentum and other observables.

Another view towards elucidating the validity of the generalized Gibbs ensemble has been pursued for special quenches in a 1D Bose-Hubbard model [Cramer *et al.*(2008)Cramer, Dawson, Eisert, and Osborne] and in integrable systems with free quasiparticles [Barthel and Schollwöck(2008)]. It was shown that, upon tracing all degrees of freedom of the system outside a small region of space and under specific conditions, the local density matrix tends asymptotically to $\hat{\rho}_G$. More recently a series of recent theoretical [Flesch *et al.*(2008)Flesch, Cramer, McCulloch, Schollwöck, and Eisert] and experimental [Trotzky *et al.*(2011)Trotzky, Chen, Flesch, McCulloch, Schollwöck, Eisert, and Bloch] works on the dynamics of Bose-Hubbard models has proven the relaxation of local observables in these system to a maximum entropy ensemble consistent with the constraints of the dynamics. A hint towards the generalization of $\hat{\rho}_G$ for Bethe Ansatz integrable systems was proposed in Ref. [Barthel and Schollwöck(2008)]. The GGE was also tested in a number of models, from Luttinger liquids [Cazalilla(2006), Iucci and Cazalilla(2009)] and free bosonic theories [Calabrese and Cardy(2007)], to integrable hard-core boson models [Rigol *et al.*(2007)Rigol, Dunjko, Yurovsky, and Olshanii] and Hubbard-like models [Eckstein and Kollar(2008), Kollar and Eckstein(2008)]. In all cases, it was shown to correctly predict the asymptotic momentum distribution functions for a variety of systems and quantum quenches.

At this point it should be stressed that as we discussed before the GGE does not always give complete description of the asymptotic state of the system. In the simple example of the harmonic chain we saw that for generic initial conditions it is necessary to specify $2N$ real constants or N complex amplitudes in order to correctly describe the asymptotic state even if we focus exclusively on local observables. For a quantum Ising chain, moreover, ρ_G can be interpreted as a grand-canonical distribution with an energy dependent chemical potential $\mu_k = E_k - \lambda_k$. It is evident now that if we consider the correlations of $\delta n_k = \gamma_k^\dagger \gamma_k - \langle \gamma_k^\dagger \gamma_k \rangle$, the occupation numbers of different eigenmodes, the GGE necessarily predicts $\langle \delta n_k \delta n_{k'} \rangle = 0$. Likewise the GGE predicts the correlators of the type $\langle \gamma_k^\dagger(t) \gamma_{-k}(t) \rangle$ are always equal to zero. For a generic initial state $|\Psi_0\rangle$ both statements are not necessarily true: by e.g. breaking translational invariance in the initial state one could have $\langle \Psi_0 | \delta n_k \delta n_{k'} | \Psi_0 \rangle \neq 0$ and $\langle \Psi_0 | \gamma_k^\dagger \gamma_{-k} | \Psi_0 \rangle \neq 0$. Notice that the mere survival of off-diagonal correlations of this type when the evolution starts with a non-translationally invariant state signals in a sense the integrability of the model, i.e. the existence of well defined quasiparticles γ_k . Indeed, following the argument of Gangardt and

Pustilnik [Gangardt and Pustilnik(2008)], if the Hamiltonian of the system is translationally invariant but integrability is broken, the off-diagonal correlators are expected to decay to zero for any initial condition, thereby restoring the translational invariance in the asymptotic state. Finally, notice that off-diagonal correlations might influence the asymptotics of physically relevant observables: a simple example is the asymptotic value of $\langle (M^x(t))^2 \rangle$, which for a generic non-translationally invariant condition $|\Psi_0\rangle$ cannot be predicted using the GGE.

A very important open question is to understand under which general circumstances the GGE can be applied. For free fermionic and bosonic systems the GGE was argued to hold for local observables [Cramer *et al.*(2008)Cramer, Dawson, Eisert, and Osborne, Barthel and Schollwöck(2008)]. For more general integrable systems this is not evident at all. For example in the case of the Quantum Ising chain the two significant observables, the transverse magnetization σ_i^x and the order parameter σ_j^z , are local in the spin representation. However, this locality does not translate directly to their representation in terms of the quasiparticles of the model: while σ_i^x retains a local character in terms of γ_i , σ_i^z does not. Will the asymptotic dynamics of any local operator be represented by the GGE, or just that of local operators in the quasi-particle fields? Do the symmetries of the initial state play any role in this? Answering these questions appears to be crucial to understand the role of integrability in the dynamics of many-body systems.

Another very important question is whether all natural observables of an integrable system behave necessarily nonthermally. The answer to it appears to be no, as pointed out recently [Rossini *et al.*(2009)Rossini, Silva, Mussardo, and Santoro]. The key to understand this issue seems to be again *locality* with respect to the quasi-particles diagonalizing the model. Thus in the Quantum Ising Model it was shown that while the transverse magnetization is non-ergodic, the correlators of the order parameter σ_z following a quench of the transverse field relax as in a thermal state with an effective temperature T_{eff} set by the initial energy of the system $E = \langle \Psi_0(g_i) | H(g_f) | \Psi_0(g_i) \rangle$. At low T_{eff} this relaxation appears to be universal, i.e. determined only by the low energy scattering properties of quasi-particles [Rossini *et al.*(2009)Rossini, Silva, Mussardo, and Santoro]. Analogous studies for an XXZ chain hint towards a different behavior of local and non-local operators with respect to quasi-particles [Canovi *et al.*(2011)Canovi, Rossini, Fazio, Santoro, and Silva]. The situation is much less clear for quenches with high effective temperatures, where the universal character of the low energy theory is lost [Barmettler *et al.*(2009)Barmettler, Punk, Gritsev, Demler, and Altman].

14.2.3 Breaking integrability: eigenstate thermalization.

When integrability is explicitly broken with a strong enough perturbation one naturally expects ergodic behavior to emerge for all observables [Kollath *et al.*(2007)Kollath, Läuchli, and Altman, Manmana *et al.*(2007)Manmana, Wessel, Noack, and Muramatsu, Rigol *et al.*(2008)Rigol, Dunjko, and Olshanii, Rigol(2009), Roux(2009), Roux(2010)]. The quest for the necessary conditions for thermalization to occur (i.e. how strongly should integrability be broken, which spectral properties should the system display) is an important problem in many different fields, from mathematical and statistical physics to quantum chaos [Peres(1984), Deutsch(1991), Srednicki(1994), Srednicki(1999), Rigol *et al.*(2008)Rigol, Dunjko, and Olshanii]. In classical systems the intense research on this subject was stimulated by the study of dynamics of a nonlinear chain of coupled oscillators by Fermi Pasta and Ulam (FPU) [Fermi *et al.*(May 1955)Fermi, Pasta, and Ulam], where instead of thermalization regular quasi-periodic oscillations were observed. Later it was realized that the FPU problem is nearly integrable and that there is a finite threshold for the chaotic behavior [Campbell *et al.*(2005)Campbell, Rosenau, and Zaslavsky]. In quantum systems the situation was far less clear: while different views on this issue emerged from time to time, the

key towards a clear understanding of quantum thermalization appears to be linked to the emergence of quantum chaotic behavior [Peres(1984)]. In particular, it has been proposed that the emergence of thermal behavior is linked to the pseudo-random form of natural observables once represented in the eigenbasis of the Hamiltonian [Peres(1984)]. This observation has been made more precise by conjecturing that thermalization in quantum chaotic systems occurs eigenstate-by-eigenstate, i.e. the expectation value of a natural observable $\langle \Psi_\alpha | A | \Psi_\alpha \rangle$ on an eigenstate $|\Psi_\alpha\rangle$ is a smooth function of its energy E_α being essentially constant on each microcanonical energy shell [Deutsch(1991), Srednicki(1994), Srednicki(1999)]. If this happens, then ergodicity and thermalization in the asymptotic state follow for every initial condition sufficiently narrow in energy (e.g. localized in a microcanonical shell), as one can easily understand using the diagonal ensemble. This hypothesis is known as *eigenstate thermalization* (ETH).

In order to understand how *eigenstate thermalization* can emerge, let us consider a quantum gas of N particles of mass m with hard-core interactions [Srednicki(1994)]. Srednicki pointed out that in the time evolution of this system starting with an initial condition $|\Psi_0\rangle$ sufficiently narrow in energy, the momentum distribution will always relax to the Maxwell-Boltzmann distribution $f_{MB}(p)$ as long as the eigenstates of the system $|\Psi_\alpha\rangle$ can be considered as pseudo-random superpositions of plane waves, i.e. have a diffusive nature in phase space. This requirement should be satisfied as a result of the chaoticity of the system, the so-called Berry's conjecture. Calling $\mathbf{X} = (\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N)$ the coordinates of the particles and $\mathbf{P} = (\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{p}_N)$ their momenta, Berry's conjecture states that the eigenstates have the form

$$\Psi_\alpha(\mathbf{X}) = \mathcal{N} \int d\mathbf{P} A_\alpha(\mathbf{P}) \delta(\mathbf{P}^2 - 2mE_\alpha) e^{i\mathbf{P} \cdot \mathbf{X}}, \quad (14.26)$$

with $A_\alpha(\mathbf{P})$ being pseudo-random variables with gaussian statistics, $\langle A_\alpha(\mathbf{P}) A_\beta(\mathbf{P}') \rangle = \delta_\alpha^\beta \delta^{(3N)}(\mathbf{P} + \mathbf{P}') / \delta(\mathbf{P}^2 - \mathbf{P}'^2)$. Notice that we are disregarding the symmetrization of the wave function, see [Srednicki(1994)] for a discussion of this aspect. If the properties above are assumed it is easy to prove that on average in the thermodynamic limit the momentum distribution function is

$$\begin{aligned} \langle f(\mathbf{p}) \rangle &= \int d\mathbf{p}_2 d\mathbf{p}_3 \dots \langle |\Psi_\alpha(\mathbf{p}, \mathbf{p}_2, \dots)|^2 \rangle \\ &= \frac{e^{-\frac{\mathbf{p}^2}{2mkT}}}{(2\pi mkT)^{3/2}} = f_{MB}(p), \end{aligned} \quad (14.27)$$

where the temperature is set by the equipartition law as $E_\alpha = 3/2NkT$. Notice that this is expected to happen for every eigenstate of energy close to E_α , as required by the ETH. Hence thermal behavior will follow for every initial condition sufficiently narrow in energy.

For generic many-body systems, such as Hubbard-like models and spin chains, the close relation between breaking of integrability and quantum chaotic behavior is a known fact [Poilblanc *et al.*(1993) Poilblanc, Ziman, Bellissard, Mila, and Montambaux]. In particular, finite size many-body integrable systems are characterized by the Poisson spectral statistics while the gradual breaking of integrability by a perturbation leads to a crossover to the Wigner-Dyson statistics. The latter is typically associated, in mesoscopic systems or billiards, with diffusive behavior and can be taken as a signature of quantum chaos [Imry(1997)]. In many-body disordered systems the emergence of the Wigner-Dyson statistics was argued to be an indicator of the transition between metallic (ergodic) and insulating (non-ergodic) phases [Mukerjee *et al.*(2006) Mukerjee, Oganesyan, and Huse, Oganesyan and Huse(2007)]. Inspired by these close analogies, recent studies gave a boost to our understanding of the crossover from non-ergodic to thermal behavior as integrability is gradually broken and of

the origin of ergodicity/thermalization in systems sufficiently far from integrability [Kollath *et al.*(2007)Kollath, Läuchli, and Altman, Manmana *et al.*(2007)Manmana, Wessel, Noack, and Muramatsu, Rigol *et al.*(2008)Rigol, Dunjko, and Olshanii, Biroli *et al.*(2010)Biroli, Cugliandolo, and Sicilia, Rigol(2009)]. In particular, a careful study of the asymptotics of density-density correlators and momentum distribution function for hard-core bosons in 1d showed that the transition from non-thermal to thermal behavior *in finite size* systems takes the form of a crossover controlled by the strength of the integrability breaking perturbation and the system size [Rigol(2009)]. Moreover there is a universality in state to state fluctuations of simple observables in this crossover regime [Neuenhahn and Marquardt(2010)], which goes hand-by-hand with an analogous transition from Poisson to Wigner-Dyson level statistics [Santos and Rigol(2010a), Rigol and Santos(2010)]. When integrability is broken by sufficiently strong perturbation ergodic behavior emerges [Rigol(2009), Rigol and Santos(2010), Neuenhahn and Marquardt(2010)], which in turn appears to be related to the validity of the ETH [Rigol *et al.*(2008)Rigol, Dunjko, and Olshanii]. In this context, the anomalous, non-ergodic behavior of integrable models has been reinterpreted as originating from wide fluctuations of the expectation value of natural observables around the microcanonical average [Biroli *et al.*(2010)Biroli, Cugliandolo, and Sicilia].

All these statements apply to the asymptotic (or time averaged) state. So far the relaxation in time, in particular in the thermodynamic limit, has received much less attention. In a series of studies of relaxation in fermionic Hubbard models subject to quenches in the interactions strength it has been argued that for sufficiently rapid quenches relaxation towards thermal equilibrium occurs through a pre-thermalized phase [Moeckel and Kehrein(2008), Moeckel and Kehrein(2010)]. Similar two step dynamics occurs in quenches of coupled superfluids where initial fast “light cone” dynamics leads to a pre-thermalized steady state, which then slowly decays to the thermal equilibrium through the vortex-antivortex unbinding [Mathey and Polkovnikov(2010)]. In Ref. [Burkov *et al.*(2007)Burkov, Lukin, and Demler] a very unusual sub-exponential in time decay of correlation functions was predicted and later observed experimentally [Hofferberth *et al.*(2007)Hofferberth, Lesanovsky, Fischer, Schumm, and Schmiedmayer] for relaxational dynamics of decoupled 1d bosonic systems.

14.2.4 Outlook and open problems

The arguments above clearly pointed to the connection between thermalization in strongly correlated systems and in chaotic billiards. This analogy however, rather than being the end of a quest, opens an entire new kind of questions, which are a current focus of both theoretical and experimental research. In particular, we do know that in a number of models of strongly correlated particles eigenstate thermalization is at the root of thermal behavior [Rigol *et al.*(2008)Rigol, Dunjko, and Olshanii]. What is the cause of eigenstate thermalization in a generic many-body system, i.e. the analogue of the diffusive eigenstates in phase space of Berry’s conjecture? And most importantly, while in a finite size system the transition from non-ergodic to ergodic behavior takes the form of a crossover, what happens in the thermodynamic limit? Is the transition from ergodic to non-ergodic behavior still a crossover or it is sharp (a *quantum KAM threshold*)?

At present, research on these questions has just started. An interesting idea that has recently emerged is that the study of the transition from integrability to non-integrability in quantum many-body systems is deeply connected to another important problem at the frontier of condensed matter physics: the concept of many-body localization [Altshuler *et al.*(1997)Altshuler, Gefen, Kamenev, and Levitov, Basko *et al.*(2006)Basko, Aleiner, and Altshuler], which extends the original work of Anderson on single-particle localization [Anderson(1958)]. We note that related ideas were put forward in studying energy transfer in interacting harmonic systems in

the context of large organic molecules [Logan and Wolynes(1990), Leitner and Wolynes(1996)]. More specifically, it has been noticed that a transition from localized to delocalized states either in real space [Pal and Huse(2010)] or more generally in quasi-particle space [Canovi *et al.*(2011)Canovi, Rossini, Fazio, Santoro, and Silva] is closely connected to a corresponding transition from thermal to non-thermal behavior in the asymptotics of significant observables. For weakly perturbed integrable models, the main characteristic of the observables to display such transition appears to be again their locality with respect to the quasiparticles [Canovi *et al.*(2011)Canovi, Rossini, Fazio, Santoro, and Silva]. This connection with many-body localization becomes more clear on the basis of a recently proposed way to quantify the transition from non-ergodic to ergodic behavior in many body systems [Olshanii and Yurovsky(2009)]. The authors consider an integrable Hamiltonian H_0 with a weak non-integrable perturbation λV . Formulating essentially a generalization of the Berry's conjecture and making some additional assumptions they showed that the deviations from thermal behavior in the expectation value of observables can be quantified according to the formula

$$\overline{\langle \Psi(t) | A | \Psi(t) \rangle} - \langle A \rangle_{\text{mc}} \approx \eta (\overline{\langle \Psi_0(t) | A | \Psi_0(t) \rangle_0} - \langle A \rangle_{\text{mc}}),$$

where $|\Psi_0(t)\rangle = \exp[-i\mathcal{H}_0 t]|\Psi_0\rangle$ is the time evolved state with respect to the integrable Hamiltonian, while $|\Psi(t)\rangle = \exp[-i(\mathcal{H}_0 + \lambda V)t]|\Psi_0\rangle$ evolves with the non-integrable one. The key ingredient in this formula is the parameter η , defined as the average over the microcanonical shell of the inverse participation ratio $\eta_\alpha = \sum_n |\langle \varphi_n | \Psi_\alpha \rangle|^4$, where $|\varphi_n\rangle$ are the eigenstates of the integrable Hamiltonian $\mathcal{H}_0$ and $|\Psi_\alpha\rangle$ are the eigenstates of $\mathcal{H}_0 + \lambda V$. Notice that when the system is close to integrability $\eta \simeq 1$ but as the strength of V increases, η is roughly proportional to the inverse of the number of states $\mathcal{N}$ hybridized by the perturbation.

Using this formula it is now possible to understand how many-body localization enters the scenario [Pal and Huse(2010), Canovi *et al.*(2011)Canovi, Rossini, Fazio, Santoro, and Silva]: an abrupt transition at a certain λ_c from localized to delocalized states in quasi-particle space corresponds to a sharp decrease of the inverse participation ratio η from a value $O(1)$ to a value negligibly small and tending to zero in the thermodynamic limit, essentially $O(1/\mathcal{N}(\lambda))$, where $\mathcal{N}(\lambda)$ is the total number of states in an energy window of width of the order of the matrix elements of the perturbation. This would lead to an abrupt transition from non-thermal to thermal behavior at λ_c , a transition qualitatively corresponding to the physics of a quantum KAM threshold. Notice that on the delocalized side of this transition the eigenstates are expected to be of diffusive nature (in quasi-particle space), i.e. a natural generalization of the form postulated by Berry's conjecture. Such transition have been studied extensively in confined electronic system, following a seminal paper by Altshuler, Kamenev, Levitov and Gefen [Altshuler *et al.*(1997)Altshuler, Gefen, Kamenev, and Levitov] and on interacting electron systems with localized single particle states [Basko *et al.*(2006)Basko, Aleiner, and Altshuler]. While the dependence $\eta(\lambda)$ was analyzed numerically in certain small systems [Canovi *et al.*(2011)Canovi, Rossini, Fazio, Santoro, and Silva, Santos and Rigol(2010a), Santos and Rigol(2010b), Neuenhahn and Marquardt(2010)], eventual emergence of a sharp KAM-like threshold in the thermodynamic limit remains an open question.

The ETH also suggested a new way on looking at quantum relaxational dynamics as dephasing in the many-body basis. In particular, the information about the asymptotic state is fully contained in the diagonal elements of the density matrix, which do not change in time if the Hamiltonian is constant. So the process of time evolution in this picture is equivalent to averaging of oscillating off-diagonal elements of the density matrix to zero. In a way this picture is different from conventional thinking based on kinetic theory of thermalization through collisions between quasi-particles and the time evolution of their distribution function. This apparent difference is hidden in the complicated structure of the many-body eigenstates. Our intuition is based on thinking about dynamics in the approximate basis, e.g. a basis of inde-

pendent quasi-particles. The precise relation between the many-body and kinetic approaches to thermalization is still an open question. Another potentially intriguing possibility is understanding thermalization as a renormalization group process, where time evolution results in averaging over high-energy degrees of freedom. If one deals with approximate noninteracting basis then because of interactions the process of eliminating high energy states affects dynamics of low energy modes and hence in renormalization of the low energy dynamics. In Ref. [Mathey and Polkovnikov(2010)] it was shown that such renormalization process indeed can explain real time dynamics in a two-dimensional sine Gordon model and the emerging nonequilibrium Kosterlitz-Thouless transition. In Ref. [Moeckel and Kehrein(2009)] similar ideas were put forward to analyze dynamics of interacting fermions using the flow equation method. At the moment it is unclear whether using such real time renormalization group one can analyze relaxational long time dynamics in generic interacting systems.

14.3 Experimental progress in quantum dynamics in cold atoms and other systems

As we mentioned before, the study of nonequilibrium dynamics of quantum many-body systems has been increasingly motivated by a series of advances in the field of ultracold atomic and molecular gases. Due to the confluence of various features, these mesoscopic quantum systems are in many ways near-ideal systems for the study of nonequilibrium quantum phenomena.

Firstly, quantum gases can exhibit a remarkably high degree of isolation from environmental sources of decoherence and dissipation. Thus, to an excellent approximation, during duration of experiments they can be regarded as closed quantum systems. Further, the dilute nature of these gases and exceptionally low temperatures result in long timescales of dynamical effects (typically on the order of milliseconds or longer) allowing for time-resolved studies of nonequilibrium processes resulting from phase-coherent many-body dynamics. Such studies are hardly possible in conventional condensed matter systems.

Secondly, an array of techniques have been developed to dynamically tune various parameters of the Hamiltonian governing these quantum gases. This has made it possible to realize various prototypical nonequilibrium processes such as quantum quenches discussed above. Quenches across phase transitions have been realized to investigate the onset and formation of long range order and the mechanism underlying the spontaneous formation of topological defects. The latter is closely related to the KZ mechanism described earlier in the text. A quantitative experimental study of the defect, entropy and energy production resulting from such quantum quenches should allow for an accurate comparison with the theoretical predictions.

Lastly, the ability to engineer and experimentally realize model Hamiltonians of archetypal correlated systems coupled with a detailed knowledge of the microscopic interactions make ultracold atomic gases a tantalizing system for applications ranging from the quantum simulation of strongly correlated systems to the adiabatic quantum computation. In addition to the form of the model Hamiltonian, experimental control can also be achieved over the effective dimensionality of the ultracold gas making it possible to investigate the nontrivial interplay between fluctuations, interactions and dimensionality.

From a technological perspective, there is an increasing thrust towards engineering ultracold atomic many-body systems for applications in quantum metrology [Estève *et al.*(2008)Estève, Gross, Weller, Giovanazzi, and Oberthaler, Leroux *et al.*(2010)Leroux, Schleier-Smith, and Vuletić, Riedel *et al.*(2010)Riedel, Böhi, Li, Hänsch, Sinatra, and Treutlein, Appel *et al.*(2009)Appel, Windpassinger, Oblak, Hoff, Kjaergaard, and Polzik, Meiser *et al.*(2008)Meiser, Ye, and Holland, Vengalattore *et al.*(2007)Vengalattore, Higbie, Leslie, Guzman, Sadler, and Stamper-Kurn]. A deeper understanding of the dynamics of interacting many-body systems and the mechanisms of decoherence and dissipation in these

systems is of crucial importance in this context.

Motivated by these factors, a number of experiments have been performed in recent years using ultracold quantum gases to investigate topics including quantum coherent dynamics in optical lattices, quenches across quantum phase transitions and thermalization in low dimensional systems. For the purposes of this colloquium, we distinguish between classes of nonequilibrium experiments both in terms of the general protocol as well as the questions being addressed by these experiments. (i) *Nonequilibrium states* of many body atomic systems wherein the high degree of isolation of the atomic system from the environment allows for the creation of metastable or highly excited many-body states with long lifetimes, (ii) *Quantum quench* experiments in which one or more parameters of the Hamiltonian are changed rapidly to create an out-of-equilibrium state of the many-body system and (iii) *Dynamical tuning* of the Hamiltonian in order to study quantum coherent dynamics of an interacting many-body system.

These experimental advances have stimulated a very active theoretical research in the area of nonequilibrium quantum dynamics in interacting many-body systems. Among the issues most debated in recent literature is the relation between thermalization in isolated quantum systems and quantum integrability. In this regard, a recent pioneering study on thermalization in 1D Bose gases was performed in Ref. [Kinoshita *et al.*(2006)Kinoshita, Wenger, and Weiss]. In this experiment, a blue detuned 2D optical lattice was used to create arrays of tightly confined tubes of ultracold ^{87}Rb atoms. The depth of the lattice potential far exceeded the energy of the ultracold gas ensuring negligible tunneling among the tubes. The array of tubes was then placed in a superposition of states of momentum $\pm 2p_0$ by the application of a transient optical phase grating. The imparted kinetic energy was small compared to the energy required to excite the atoms to the higher transverse states and the gases remained one-dimensional. This out-of-equilibrium system was then allowed to evolve for variable durations before the momentum distribution was probed by absorption imaging of the gas (see Fig. 14.2).

It was found that, while the initial momentum distributions exhibit some dephasing on account of trap anharmonicities, the dephased distribution remains non-gaussian even after thousands of collisions. This is in distinct contrast to the gaussian distributions observed when the 2D optical lattice is adiabatically imposed on an equilibrium 3D Bose gas. This remarkable observation that the nonequilibrium Bose gases do not equilibrate on the timescales of the experiment appears consistent with the fact that this system is a very close experimental realization of a Lieb-Liniger gas with point-like collisional interactions - an integrable quantum system in which only elastic pairwise interactions can occur. Apparently the experimental technicalities such as anharmonicities or the axial potential are insufficient to sufficiently lift integrability in this system.

In addition to unambiguously showing the absence of thermalization within experimental timescales in this model realization of the Lieb-Liniger gas, this study also points the way towards addressing more general questions on integrability and ergodicity. Starting from an integrable system, modifications such as the addition of finite range interactions, tunneling between the 1D tubes or the imposition of axial potentials one can tunably lift integrability and analyze emergence of irreversibility and thermalization. This experiment largely motivated much of the theoretical work discussed in the previous section.

Another issue that has attracted a lot of attention is the search for universal effects either in the nonequilibrium dynamics following a quantum quench or in the adiabatic dynamics near a quantum critical point which we described earlier in the text. In particular, the issue of non-adiabatic dynamics near quantum phase transitions has been the focus of recent experimental studies on condensate formation in a dilute, weakly interacting Bose gas that is rapidly cooled past the BEC phase transition [Weiler *et al.*(2008)Weiler, Neely, Sherer, Bradley, Davis, and Anderson]. This process was found to be accompanied by the spontaneous formation of topological defects, i.e. vortices, in the nascent superfluid. This can be phenomenologically

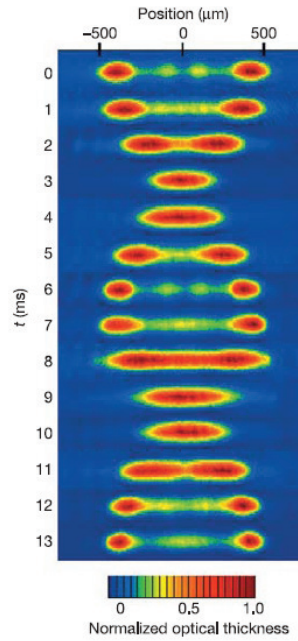


Figure 14.2: **Time-of-flight absorption images of an ensemble of 1D Bose gases** - Ultracold atoms are confined in arrays of 1D optical traps. Optical pulses are used to place the atoms in a superposition of $\pm 2\hbar k$ momentum states. The gas is then allowed to evolve for variable durations before being released from the trap and photographed to reveal the momentum distribution. The false color in each image is rescaled to show detail. The non-gaussian nature of the momentum distribution clearly indicates an absence of thermalization. (*Adapted from [Kinoshita et al.(2006)Kinoshita, Wenger, and Weiss]*)

understood as being due to the formation of isolated superfluid regions of a characteristic size ξ , each with a random relative phase. These isolated regions then gradually merge to give rise to global phase coherence. In this process, regions which enclose phase loops of 2π are constrained by the nature of the superfluid, i.e. the continuity of the wavefunction, to have a vanishing superfluid density at the core. Thus, the KZ mechanism predicts a density of vortices that scales as $1/\xi^2$.

In this experiment, a magnetically trapped thermal gas of ^{87}Rb atoms was cooled by radiofrequency (rf) evaporation to temperatures below the BEC transition temperature. The quench rate, i.e. the rate of cooling, was controlled by varying the rate at which the rf frequency was ramped down. Following a brief duration of equilibration, vortices are detected by absorption imaging of the gas after ballistic expansion. Allowing for some uncertainty in the ability to discern a vortex due to line-of-sight integration in these images, it was found that about a quarter of the images showed at least one vortex core.

The rate of cooling during the quench was limited by the collision rate between atoms in the trapped gas during evaporative cooling. This resulted in a limited dynamic range for the quench rate. Also, the rapid decrease of the thermal fraction following the formation of the condensate led to a low damping rate for the vortices. A faster quench rate, realized through a trap with tighter confinement or increased density or via sympathetic cooling with another species, could result in the observation of an increased number of vortices during the quench. In turn, this would potentially allow for quantitative tests of the predicted scaling of vortex number with the quench rate and the extraction of dynamic critical exponents.

While the formation of a superfluid by quenching the temperature is seeded by thermal fluctuations, ultracold atomic gases also potentially allow for the realization of phase transitions initiated purely by quantum fluctuations [Greiner et al.(2002a)Greiner, Mandel, Esslinger,

Hänsch, and Bloch, Sadler *et al.*(2006)Sadler, Higbie, Leslie, Vengalattore, and Stamper-Kurn].

A particularly intriguing study of a quench past such quantum phase transitions was carried out in a degenerate $F = 1$ spinor Bose gas of ^{87}Rb [Sadler *et al.*(2006)Sadler, Higbie, Leslie, Vengalattore, and Stamper-Kurn]. These gases, with a spin degree of freedom arising from a non-zero hyperfine spin F , are quantum fluids that may simultaneously exhibit the phenomena of magnetism and superfluidity, both of which result from symmetry breaking and long range order. Owing to rotational symmetry, the contact interactions between two atoms can be characterized by the total spin of the colliding pair. In the case of a $F = 1$ spinor gas, these interactions give rise to a mean field energy given by $n(c_0 + c_2\langle\mathbf{F}\rangle^2)$ where the coupling strengths $c_{0,2}$ are related to the s -wave scattering lengths in the total spin $f = 0, 2$ channels [Ho(1998), Ohmi and Machida(1998)]. In addition to the mean field interactions, a finite external magnetic field B imposes a quadratic Zeeman energy (QZE) that scales as $q\langle F_z^2 \rangle$ with $q = (\mu_B B)^2 / 4\Delta_{hf}$ where μ_B is the Bohr magneton and Δ_{hf} is the energy splitting between the ground state hyperfine manifolds.

For a $F = 1$ condensate of ^{87}Rb , the competing influences of the spin-dependent interaction and the QZE give rise to a continuous quantum phase transition between a ‘polar’ and a ferromagnetic phase. Rapidly tuning the external magnetic field from large values ($q \gg |c_2 n|$) to small values ($q \ll |c_2 n|$) quenches the spinor gas from the polar phase to the ferromagnetic phase. The ensuing growth of ferromagnetic domains was directly detected by *in situ* imaging (see Fig. 14.1). It was found that the resulting texture of ferromagnetic domains was spatially inhomogeneous can characterized by a typical length scale that was related to the spin healing length $\xi = \hbar / \sqrt{2m|c_2 n|}$. Concurrent with the appearance of these domains, the spin textures revealed the spontaneous formation of polar-core spin vortices. These topological defects are characterized by a non-zero spin current but no mass current. The origin of these spin vortices is also rooted in the KZ mechanism. It was shown that, for slow quenches, the number of such vortices is expected to scale as $\tau^{-1/6}$ where τ is the time over which the spinor gas is swept into the ferromagnetic state [Saito *et al.*(2007)Saito, Kawaguchi, and Ueda].

The weak spin-dependent interactions inherent to this spinor gas also allow for nondestructive detection of the vortices and studies of their dynamics. In addition, the weak coupling between the spin and mass degrees of freedom make it straightforward to realize extremely low spin temperatures to examine the role of quantum fluctuations in seeding this phase transition [Klempt *et al.*(2010)Klempt, Topic, Gebreyesus, Scherer, Henninger, Hyllus, Ertmer, Santos, and Arlt]. These features make spinor quantum fluids a rich system to investigate the quench dynamics and KZ mechanism past quantum phase transitions between different magnetically ordered phases. In addition, corrections to the KZ scaling imposed by long range interactions [Vengalattore *et al.*(2008)Vengalattore, Leslie, Guzman, and Stamper-Kurn], conservation laws and finite temperature effects can also be studied.

Yet another range of experimental studies is made possible by the tunability of atomic interactions using a Feshbach resonance. This technique allows the rapid dynamic control of the s -wave scattering length by means of a time-varying external magnetic field. This ability was utilized in a recent study of a strongly interacting two-component Fermi mixture [Jo *et al.*(2009)Jo, Lee, Choi, Christensen, Kim, Thywissen, Pritchard, and Ketterle]. Starting from an initially weak, repulsive interaction between the two Fermionic species, the interactions were rapidly increased by tuning the magnetic field to the vicinity of the Feshbach resonance. The subsequent decrease in the atomic loss rate, the increase in the size of the trapped gas and the increase in kinetic energy as measured in time-of-flight images were interpreted as an indication of the Stoner transition to a ferromagnetic state. However, in a later theoretical work this interpretation was questioned and an alternative explanation based on rapid molecule formation was suggested (Ref. [Babadi *et al.*(2009)Babadi, Pekker, Sensarma, Georges, and Demler]). Thus, a direct in-situ measurement of local magnetization is necessary to understand

whether ferromagnetism plays a role in this experiment.

In addition to the thermalization dynamics across phase transitions, the long coherence times inherent to ultracold gases also makes it possible to study the quantum coherent dynamics of many-particle systems. A particularly dramatic instance of such coherent many-body dynamics was illustrated in the collapse and revival of the matter wave field of a Bose condensate [Greiner *et al.*(2002b)Greiner, Mandel, Hansch, and Bloch]. Here, the interaction-induced dynamical evolution of a matter wave field was clearly revealed in the multiple matter wave interference patterns obtained after releasing the gas from the lattice. This work has also been extended to the time-resolved observation of superexchange processes in optical ‘superlattice’ potentials [Trotzky *et al.*(2008)Trotzky, Cheinet, Fölling, Feld, Schnorrberger, Rey, Polkovnikov, Demler, Lukin, and Bloch]. Similar demonstrations of collisional coherence have also been shown in spinor Bose gases [Chang *et al.*(2005)Chang, Qin, Zhang, You, and Chapman, Kronjäger *et al.*(2005)Kronjäger, Becker, Brinkmann, Walser, Navez, Bongs, and Sengstock]. Due to the internal degrees of freedom in a spinor gas, the dynamics in this fluid is due to coherent spin-mixing collisions. In a trapped gas that is well described by the single mode approximation (SMA), these coherent collisions can lead to the periodic and reversible formation of condensates in initially unpopulated spin states.

Further, in certain situations, coherent interactions can also lead to quantum correlations [Sorensen *et al.*(2001)Sorensen, Duan, Cirac, and Zoller]. Schemes that might realize such entangled many-particle states have received attention due to potential applications in quantum information processing and metrology. The dynamical evolution of such entangled states in the presence of quantum or thermal fluctuations is obviously of great interest. A recent experiment investigated this evolution in low dimensional two-component Bose gases with adjustable interactions [Widera *et al.*(2008)Widera, Trotzky, Cheinet, Fölling, Gerbier, and Bloch], finding that quantum fluctuations play a crucial role in the phase diffusion dynamics of low dimensional systems. More recently, the dynamical control of a Bose-Einstein condensate confined in a strongly driven optical lattice was demonstrated [Lignier *et al.*(2007)Lignier, Sias, Ciampini, Singh, Zenesini, Morsch, and Arimondo]. By periodically modulating the lattice potential, the tunneling parameter J was shown to be suppressed in a phase coherent manner opening the possibility of driving quantum phase transitions using this technique.

The isolation of ultracold atomic gases from external sources of dissipation also makes it possible to study relaxation dynamics driven purely by intrinsic mechanisms. Such mechanisms should set the timescales for adiabatic quantum computing or the simulation of strongly correlated lattice models. A recent experiment along these lines investigated the evolution of excited states of the repulsive Fermi-Hubbard system [Strohmaier *et al.*(2010)Strohmaier, Greif, Jördens, Tarruell, Moritz, and Esslinger]. Here, doubly occupied lattice sites (doublons) were created by modulating the lattice and the subsequent decay of the system to thermal equilibrium was monitored over time. It was shown that the lifetime of these doublons scales exponentially with the ratio of the interaction energy to kinetic energy, in fair agreement with theoretical predictions. It was argued that the dominant mechanism driving this relaxation was a high-order scattering process involving several fermions [Sensarma *et al.*(2010)Sensarma, Pekker, E. Altman, Demler, Strohmaier, Greif, Jördens, Tarruell, Moritz, and Esslinger].

While this colloquium places an emphasis on experiments involving ultracold atomic gases, there is a range of other mesoscopic quantum systems which also lend themselves to studies on quantum nonequilibrium dynamics. For the sake of completeness, we briefly review a few of these systems here. Defect formation following a quench was first studied in the context of vortices in liquid crystals [Chuang *et al.*(1991)Chuang, Durrer, Turok, and Yurke]. This has since been followed by similar studies in various mesoscopic systems including isolated superconducting loops where the defects assume the form of spontaneous fluxoids [Monaco *et al.*(2009)Monaco, Mygrind, Rivers, and Koshelets], superconducting thin films [Maniv

et al.(2003)Maniv, Polturak, and Koren] and multi-Josephson junction loops [Monaco *et al.*(2002)Monaco, Mygind, and Rivers, Monaco *et al.*(2006)Monaco, Aaroe, Mygind, Rivers, and Koshelets]. A cumulative view of these studies would indicate that the influence of finite size effects, thermal fluctuations and dimensionality on the production of topological defects by the KZ mechanism is as yet unclear and a topic that warrants further study.

Another potential system for the study of nonequilibrium dynamics of many-particle states arises from rapid advances in the field of photonics. There have been several proposals [Chang *et al.*(2008)Chang, Gritsev, Morigi, Vuletić, Lukin, and Demler, Greentree *et al.*(2006)Greentree, Tahan, Cole, and Hollenberg] for the dynamical creation of strongly correlated photonic states using photon-photon interactions mediated by a nonlinear optical medium. The realization of states such as a Tonks gas of photons have been proposed using hollow-core optical fibers, tapered optical fibers, photons in coupled cavities and surface plasmons on conducting nanowires. Such strongly correlated photon states should have applications in metrology, sub-shot noise interferometry and the quantum emulation of exotic spin models.

Part V

Kinetics of Gases, Liquids and Plasma

15 Main Models

Обсудим кинетические явления в сплошных средах.

15.1 I Kinetic Theory of Gases by Landau

15.1.1 §7. Thermal conduction in the gas

To calculate the thermal conductivity of the gas, we have to solve the transport equation with a temperature gradient. Retaining only the first term on the left of (6.19), we have

$$\frac{\epsilon(\Gamma) - c_p T}{T} \mathbf{v} \cdot \nabla T = I(\chi). \quad (7.1)$$

The solution is to be sought in the form

$$\chi = \mathbf{g} \cdot \nabla T \quad (7.2)$$

where the vector $\mathbf{g}$ depends only on the quantities Γ , since a factor ∇T results on both sides of (7.1) when this substitution is made. Since the equation must be valid for any vector ∇T , the coefficients of this on the two sides must be equal, and so we obtain for g the equation

$$\mathbf{v} \frac{\epsilon(\Gamma) - c_p T}{T} = I(\mathbf{g}), \quad (7.3)$$

which does not involve ∇T (nor therefore any explicit dependence on the coordinates).

The function χ must also satisfy the conditions (6.3). With χ in the form (7.2), the first two of these are necessarily satisfied, as is evident from the fact that (7.3) contains no vector parameters which might give the direction of the constant vector integrals $\int f_0 g d\Gamma$ and $\int f_0 \in g d\Gamma$. The third condition imposes on the solution of (7.3) the further condition

$$\int f_0 \mathbf{v} \cdot \mathbf{g} d\Gamma = 0 \quad (7.4)$$

If the transport equation has been solved and the function χ is known, the thermal conductivity can be determined by calculating the energy flux, or rather its dissipative part that is not due simply to convective energy transfer, which we shall denote by $\mathbf{q}'$. In the absence of macroscopic motion in the gas, $\mathbf{q}'$ is equal to the total energy flux q given by the integral (5.9). When $f = f_0$, this integral is zero identically, because of the integration over the directions of $\mathbf{v}$. On substitution of f from (6.1), there thus remains

$$\begin{aligned} \mathbf{q} &= \frac{1}{T} \int \mathbf{v} f_0 \chi \epsilon d\Gamma \\ &= \frac{1}{T} \int f_0 \epsilon \mathbf{v} (\mathbf{g} \cdot \nabla T) d\Gamma \end{aligned}$$

or in components

$$q_\alpha = -\kappa_{\alpha\beta} \partial T / \partial x_\beta, \quad \kappa_{\alpha\beta} = -\frac{1}{T} \int f_0 \epsilon v_\alpha g_\beta d\Gamma \quad (7.5)$$

Since a gas in equilibrium is isotropic, there are no preferred directions in it, and the tensor $\kappa_{\alpha\beta}$ can only be expressible in terms of the unit tensor $\delta_{\alpha\beta}$, i.e. it reduces to a scalar:

$$\kappa_{\alpha\beta} = \kappa \delta_{\alpha\beta}, \quad \kappa = \frac{1}{3} \kappa_{\alpha\alpha}$$

Thus the energy flux is

$$\mathbf{q} = -\kappa \nabla T \quad (7.6)$$

where the scalar thermal conductivity is

$$\kappa = -\frac{1}{3T} \int f_0 \mathbf{v} \cdot \mathbf{g} d\Gamma \quad (7.7)$$

The transport equation necessarily makes this quantity positive (see §9): the flux $\mathbf{q}$ must be in the opposite direction to the temperature gradient.

In monatomic gases, the velocity v is the only vector on which the function g depends; it is therefore clear that this function must have the form

$$g = (v/v)g(v) \quad (7.8)$$

In polyatomic gases, $\mathbf{g}$ depends on two vectors: the velocity $\mathbf{v}$ and the angular momentum $\mathbf{M}$. If the symmetry of the molecules does not allow stereoisomerism, the collision integral, and therefore equation (7.3), are invariant under inversion; the solution χ must be similarly invariant. In other words, $\chi = \mathbf{g} \cdot \nabla T$ must be a true scalar, and, since the gradient ∇T is a true vector, so must be the function $\mathbf{g}$. For instance, in a diatomic gas, where the quantities Γ are just the vectors $\mathbf{v}$ and $\mathbf{M}$, the function $\mathbf{g}(\Gamma)$ has the form

$$\mathbf{g} = \mathbf{v}g_1 + \mathbf{M}(\mathbf{v}, \mathbf{M})g_2 + (\mathbf{v} \times \mathbf{M})g_3, \quad (7.9)$$

where g_1, g_2, g_3 are scalar functions of the scalar arguments $\mathbf{v}^2, \mathbf{M}^2, (\mathbf{v} \cdot \mathbf{M})^2$; this is the most general form of a true vector that can be constructed from the true vector $\mathbf{v}$ and the pseudovector $\mathbf{M}$. †

If, however, the substance is stereoisomeric, there is no invariance under inversion: as already mentioned in §2, inversion then "transforms" the gas into what is essentially a different substance. Accordingly, the function χ may also contain pseudoscalar terms, and the function $\mathbf{g}$ may contain pseudovector terms, e.g. one of the form $g_4 \mathbf{M}$.

The condition for the above method of solving the transport equation (based on the assumption that f is close to f_0) to be valid can be ascertained by estimating the collision integral from (3.12). The mean energy of a molecule is $\bar{\epsilon} \sim T$, and so an estimate of the two sides of (7.3) gives $\bar{v} \sim g/\tau \sim g\bar{v}/l$, whence $g \sim l$. The condition $\chi/T \sim g|\nabla T|/T \ll 1$ (equivalent to $\delta f < f_0$) therefore signifies that the distances L over which the temperature undergoes a considerable change ($|\nabla T| \sim T/L$) must be large in comparison with l . That is, a function having the form (6.1) constitutes the leading terms in an expansion of the solution of the transport equation in powers of the small ratio l/L .

An estimate of (7.7) with $g \sim l$ gives

$$\kappa \sim cNl\bar{v}, \quad (7.10)$$

where c is the specific heat per molecule of the gas. This is a well-known elementary formula in the kinetic theory of gases (cf. the last footnote to §11). Putting $l \sim 1/N\sigma$, $c \sim 1$ and $\bar{v} \sim \sqrt{T/m}$, we have

$$\kappa \sim (1/\sigma) \sqrt{T/m}. \quad (7.11)$$

In this estimate, the cross-section σ relates to the mean thermal speed of the molecules, and in that sense is to be regarded as a function of temperature. As the speed increases, the cross-section in general decreases; accordingly, σ is a decreasing function of the temperature. When the temperature is not too low, the gas molecules behave qualitatively as hard elastic particles which interact only when they actually collide. This type of interaction corresponds to a collision cross-section varying only slightly with the speed (and therefore with the temperature). Under such conditions, κ is approximately proportional to $\sqrt{T}$.

At a given temperature, the thermal conductivity is seen from (7.11) to be independent of the gas density, i.e. of the gas pressure. It must be emphasized that this important property is not related to the assumptions used in making the estimate, but is an exact consequence of the Boltzmann transport equation. It arises because this equation takes account only of collisions between pairs of molecules (for which reason the mean free path is inversely proportional to the gas density).

15.1.2 §8. Viscosity in the gas

The viscosity of a gas is calculated by means of the transport equation in the same way as the thermal conductivity. The only difference is that the deviation from equilibrium is due not to the temperature gradient but to the non-uniformity of the gas flow as regards the macroscopic velocity $\mathbf{V}$. It is again assumed that the characteristic dimensions of the problem $L \gg l$.

There are, as we know, two kinds of viscosity, the corresponding coefficients being usually denoted by η and ζ . They are defined as the coefficients in the viscous stress tensor $\sigma'_{\alpha\beta}$ which forms part of the momentum flux tensor:

$$\Pi_{\alpha\beta} = P\delta_{\alpha\beta} + \rho V_{\alpha}V_{\beta} - \sigma'_{\alpha\beta}, \quad (8.1)$$

$$\sigma'_{\alpha\beta} = 2\eta(V_{\alpha\beta} - 3\delta_{\alpha\beta} \operatorname{div} V) + \zeta\delta_{\alpha\beta} \operatorname{div} V, \quad (8.2)$$

where $V_{\alpha\beta}$ is defined by (6.12); see *FM*, § 15. In an incompressible fluid, only the viscosity η occurs. The "second viscosity" ζ appears in motion such that $\operatorname{div} \mathbf{V} \neq 0$. It is convenient to calculate the two coefficients separately.

Omitting the temperature-gradient term from the general transport equation (6.19), we can write

$$mv_{\alpha}v_{\beta} \left(V_{\alpha\beta} - \frac{1}{3}\delta_{\alpha\beta} \operatorname{div} V \right) + \left[\frac{1}{3}mv^2 - \epsilon(\Gamma^{\top})/c_t \right] \operatorname{div} V = I(\chi), \quad (8.3)$$

where the terms containing the first and second viscosities have been separated on the left-hand side. In calculating the first viscosity, we have to assume that $\operatorname{div} V = 0$. The resulting equation can be identically rewritten as

$$m \left(v_{\alpha}v_{\beta} - \frac{1}{3}\delta_{\alpha\beta}v^2 \right) V_{\alpha\beta} = I(\chi), \quad (8.4)$$

where the two tensor factors on the left have zero trace.

The solution of this equation is sought in the form

$$\chi = g_{\alpha\beta}V_{\alpha\beta}, \quad (8.5)$$

where $g_{\alpha\beta}(\Gamma)$ is a symmetric tensor; since the trace $V_{\alpha\alpha} = 0$, by adding a term in $\delta_{\alpha\beta}$ to $g_{\alpha\beta}$ we can always ensure that $g_{\alpha\alpha} = 0$, without altering χ . The equation for $g_{\alpha\beta}$ is

¹†The solution of the Boltzmann equation for a gas of rotating molecules was first discussed by Yu. M. Kagan and A. M. Afanas'ev (1961).

$$m \left(v_\alpha v_\beta - \frac{1}{3} \delta_{\alpha\beta} v^2 \right) = I(g_{\alpha\beta}). \quad (8.6)$$

The extra conditions (6.3) are necessarily satisfied.

The momentum flux is calculated from the distribution function as the integral (5.8). The required part of this, namely the viscous stress tensor, is

$$\sigma'_{\alpha\beta} = -(m/T) \int v_\alpha v_\beta f_0 \chi d\Gamma = \eta_{\alpha\beta\gamma\delta} V_{\gamma\delta} \quad (8.7)$$

$$\eta_{\alpha\beta\gamma\delta} = -(m/T) \int f_0 v_\alpha v_\beta g_{\gamma\delta} d\Gamma \quad (8.8)$$

The quantities $\eta_{\alpha\beta\gamma\delta}$ form a tensor of rank four, symmetric in the suffixes α, β and γ, δ and giving zero on contraction with respect to the pair γ, δ . Because the gas is isotropic, this tensor can only be expressed in terms of the unit tensor $\delta_{\alpha\beta}$. An expression satisfying these conditions is

$$\eta_{\alpha\beta\gamma\delta} = \eta \left[\delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta} + \delta_{\alpha\delta} \delta_{\beta\gamma} - \frac{2}{3} \delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\delta} \right].$$

Then $\sigma'_{\alpha\beta} = 2\eta V_{\alpha\beta}$, so that η is the required scalar viscosity coefficient. It is determined by contracting the tensor with respect to the pairs of suffixes α, γ and β, δ :

$$\eta = -(m/10T) \int v_u v_\beta g_{\alpha\beta} f_0 d\Gamma. \quad (8.9)$$

In a monatomic gas, $g_{\alpha\beta}$ is a function only of the vector v . The general form of such a symmetric tensor with zero trace is

$$g_{\alpha\beta} = \left(v_\alpha v_\beta - \frac{1}{3} \delta_{\alpha\beta} v^2 \right) g(v), \quad (8.10)$$

with a single scalar function $g(v)$. In polyatomic gases, the tensor $g_{\alpha\beta}$ is composed of a large number of variables, including the two vectors $\mathbf{v}$ and $\mathbf{M}$. In the absence of stereoisomerism, $g_{\alpha\beta}$ can include only true tensor terms; in a stereoisomeric gas, pseudotensor terms also are possible.

An estimate of the viscosity coefficient, similar to (7.10) for the thermal conductivity, gives a well-known elementary formula in the kinetic theory of gases,

$$\eta \sim m \bar{v} N l; \quad (8.11)$$

see the last footnote to §11. The thermometric conductivity and the kinematic viscosity are found to be of the same order:

$$\kappa / N c_p \sim \eta / N m \sim \bar{v} l. \quad (8.12)$$

Putting in (8.11) $l \sim 1/N\sigma$ and $\bar{v} \sim (T/m)^{1/2}$, we obtain

$$\eta \sim \sqrt{(mT)}/\sigma. \quad (8.13)$$

The description of the pressure and temperature dependence of κ in §7 is entirely valid for the viscosity η also.

In order to calculate the second viscosity coefficient, we must take the second term on the left of the transport equation (8.3) to be non-zero:

$$\left[\frac{1}{3}mv^2 - \epsilon(\Gamma)/c_v \right] \operatorname{div} \mathbf{V} = I(\chi). \quad (8.14)$$

We shall seek the solution in the form

$$\chi = g \operatorname{div} \mathbf{V} \quad (8.15)$$

and obtain for g the equation

$$\frac{1}{3}mv^2 - \epsilon(\Gamma)/c_v = I(g). \quad (8.16)$$

Calculation of the stress tensor and comparison with the expression $\zeta \delta_{\alpha\beta} \operatorname{div} \mathbf{V}$ gives the viscosity coefficient as

$$\zeta = -(m/3T) \int v^2 g f_0 d\Gamma \quad (8.17)$$

In monatomic gases $\epsilon(\Gamma) = \frac{1}{2}mv^2$, $c_v = 3/2$, and the left-hand side of (8.16) is zero. The equation $I(g) = 0$ then shows that $g = 0$, and therefore $\zeta = 0$. We reach, therefore, the interesting conclusion that the second viscosity of monatomic gases is zero. †

PROBLEM

Show that a gas of ultra-relativistic particles has zero second viscosity (I. M. Khalatnikov, 1955).

Solution. The energy ϵ of a relativistic particle in a frame of reference K in which the gas moves with a (non-relativistic) velocity V is related to its energy ϵ' in the frame K' in which the gas is at rest by $\epsilon' = \epsilon - \mathbf{p} \cdot \mathbf{V}$, where $\mathbf{p}$ is the momentum of the particle in the frame K ; this is the Lorentz transformation formula with the terms above the first order in V omitted. The distribution function in the frame K is $f_0(\epsilon - p \cdot V)$, where $f_0(\epsilon')$ is the Boltzmann distribution.

Considering only the viscosity, we can immediately assume that the gradients of all macroscopic quantities are zero except that of the velocity V ; then $\partial V / \partial t = 0$, and the last term in (6.10) vanishes. ‡ In (6.11), the first two terms are also absent, and the third becomes

$$v \cdot \Gamma(p, V) = v_\alpha p_\beta \partial V_\beta / \partial x_\alpha = v_\alpha p_\beta V_{\alpha\beta};$$

the directions of v and p are the same, and so $p_\alpha v_\beta = p_\beta v_\alpha$. The equations of continuity and entropy conservation in the form used in §6 remain valid in the motion of a relativistic gas (with small velocities V). The formulae (6.16) therefore remain valid also. The transport equation thus becomes

$$(v_\alpha p_\beta - \delta_{\alpha\beta} \epsilon / c_r) V_{\alpha\beta} = I(\chi)$$

In the second-viscosity problem, we must put $V_{\alpha\beta} = 1 \delta_{\alpha\beta} \operatorname{div} V$, and then

$$(v p - \epsilon / c_0) \operatorname{div} V = I(\chi).$$

In an ultra-relativistic gas, $v \approx c$, $\epsilon = cp$, and the specific heat $c_r = 3$ (see SP 1, §44, Problem); the left-hand side of the equation, and therefore χ , are then zero.

15.1.3 §9. Symmetry of the kinetic coefficients

The thermal conductivity and the viscosity are among the quantities which govern relaxation processes in systems slightly departing from equilibrium. These kinetic coefficients satisfy Onsager's symmetry principle, which may be established

† It must be emphasized that these gases are being treated in the approximation with respect to the gaseousness parameter Nd^3 which corresponds to the Boltzmann equation (and in which η is independent of the density). In higher approximations (the subsequent terms in the "virial expansion": see § 18), a non-zero viscosity ζ does appear. Another important point is the quadratic dependence of the particle energy on the momentum; in a relativistic "monatomic" gas, the second viscosity is not zero (although it vanishes in another limiting case, the ultra-relativistic case; see the Problem).

‡ To avoid misunderstandings, it may be mentioned that in a relativistic gas the pressure gradient makes a contribution to the thermal-conduction energy flux; see FM, § 126.

in a general form without discussing specific mechanisms of relaxation. However, in a specific calculation of kinetic coefficients from the transport equations, the symmetry principle does not yield any extra conditions to be imposed on the solution of the equations. In such a calculation the requirements of the principle are necessarily satisfied. It is useful to see how this occurs.

In the general formulation of Onsager's principle (see SP 1, § 120), there appears a set of quantities x_a which describe the deviation of the system from equilibrium, and a set of quantities "thermodynamically conjugate" to these, $X_a = -\partial S/\partial x_a$ (where S is the entropy of the system). The relaxation process of a system slightly departing from equilibrium is described by equations which determine the rates of change of the x_a as linear functions of the X_a :

$$\dot{x}_a = - \sum_b \gamma_{ab} X_b, \quad (9.1)$$

where the γ_{ab} are the kinetic coefficients. According to Onsager's principle, if x_a and x_b behave in the same way under time reversal, then

$$\gamma_{ab} = \gamma_{ba}. \quad (9.2)$$

The rate of change of the entropy is given by the quadratic form

$$\dot{S} = - \sum_a X_a \dot{x}_a = \sum_{a,b} \gamma_{ab} X_a X_b \quad (9.3)$$

The first of these expressions is often convenient for establishing the correspondence between the $\dot{x}_a$ and the X_a .

For thermal conductivity, we take as the rates $\dot{x}_a$ the components q'_α of the dissipative heat flux vector (at any given point in the medium); the suffix a is then the same as the vector suffix α . The corresponding quantities X_a are the derivatives $T^{-2}\partial T/\partial x_\alpha$; cf. SP 2, §88. Equations (9.1) correspond to $q'_\alpha = -\kappa_{\alpha\beta}\partial T/\partial x_\beta$, so that the kinetic coefficients γ_{ab} are the quantities $T^2\kappa_{\alpha\beta}$. According to Onsager's principle, we should have $\kappa_{\alpha\beta} = \kappa_{\beta\alpha}$.

Similarly, for the viscosity, we take as the $\dot{x}_a$ the components $\sigma'_{\alpha\beta}$ of the viscous momentum flux tensor; the corresponding X_a are $-V_{\alpha\beta}/T$ (the suffix a here answering to the pair of tensor suffixes $\alpha\beta$). Equations (9.1) correspond to $\sigma'_{\alpha\beta} = \eta_{\alpha\beta\gamma\delta}V_{\gamma\delta}$, and the kinetic coefficients are $T\eta_{\alpha\beta\gamma\delta}$. According to Onsager's principle, we must have $\eta_{\alpha\beta\gamma\delta} = \eta_{\gamma\delta\alpha\beta}$.

In the problems of thermal conduction and viscosity of gases, considered in §§7 and 8, the symmetry of the tensors $\kappa_{\alpha\beta}$ and $\eta_{\alpha\beta\gamma\delta}$ was a necessary consequence of the isotropy of the medium, independent of the solution of the transport equation. We shall show, however, that it would also follow from this solution, independently of the isotropy of the gas.

The procedure for problems of thermal conduction and viscosity in a slightly inhomogeneous gas was to seek the correction to the equilibrium distribution function in the form

$$\chi = \sum_a g_a(\Gamma) X_a \quad (9.4)$$

obtaining for the functions g_a equations of the form

$$L_a = I(g_a) \quad (9.5)$$

The quantities L_a are components of the vector

$$T[\epsilon(\Gamma) - c_p T] v_\alpha$$

for thermal conduction, or the tensor

$$-T \left[m v_\alpha v_\beta - \frac{\epsilon(\Gamma)}{c_v} \delta_{\alpha\beta} \right]$$

for viscosity; cf. (6.19). The solutions of equations (9.5) must satisfy the further conditions

$$\int f_0 g_a d\Gamma = 0, \quad \int f_0 g_a \epsilon d\Gamma = 0, \quad \int f_0 g_a p d\Gamma = 0$$

With these conditions, the kinetic coefficients γ_{ab} can be written as the integrals

$$T^2 \gamma_{ab} = - \int f_0 L_a g_b d\Gamma \quad (9.6)$$

The proof of the symmetry $\gamma_{ab} = \gamma_{ba}$ thus reduces to that of the equation

$$\int f_0 L_a g_b d\Gamma = \int f_0 L_b g_a d\Gamma \quad (9.7)$$

It is based on the property that the linearized operator I is "self-conjugate", which may be arrived at as follows.

Let us consider the integral

$$\int f_0 \varphi I(\psi) d\Gamma = \int f_0 f_{01} w' \varphi (\psi' + \psi'_1 - \psi - \psi_1) d^4\Gamma$$

where $\psi(\Gamma)$ and $\varphi(\Gamma)$ are any two functions of the variables Γ . Since the integration is over all the variables $\Gamma, \Gamma_1, \Gamma', \Gamma'_1$, we can rename these in any way (as was done in §4) without affecting the value of the integral. We make the change $\Gamma, \Gamma' \leftrightarrow \Gamma_1, \Gamma'_1$, and then in each of the two resulting forms the further change $\Gamma, \Gamma_1 \leftrightarrow \Gamma', \Gamma'_1$. The sum of all four expressions gives

$$\int f_0 \varphi I(\psi) d\Gamma = \frac{1}{4} \int f_0 f_{01} [w'(\varphi + \varphi_1) - w(\varphi' + \varphi'_1)] [(\psi' + \psi'_1) - (\psi + \psi_1)] d^4\Gamma \quad (9.8)$$

the notation w and w' is as in (3.5). Let us now consider a similar integral in which $\psi(\Gamma)$ and $\varphi(\Gamma)$ are replaced by $\varphi(\Gamma^T)$ and $\psi(\Gamma^T)$ respectively (without changing w and w'). With the change $\Gamma^\Gamma, \Gamma_1^T, \dots \rightarrow \Gamma, \Gamma_1, \dots$ in this integral, and the principle of detailed balancing (2.3), we have

$$\begin{aligned} & \int f_0 \psi^T I(\varphi^T) d\Gamma \\ &= \frac{1}{4} \int f_0 f_0 [w(\psi + \psi_1) - w'(\psi' + \psi'_1)] [(\varphi' + \varphi'_1) - (\varphi + \varphi_1)] d^4\Gamma \end{aligned} \quad (9.9)$$

where the equation $f_{10}(\Gamma) = f_0(\Gamma)$ has also been used. Expanding the square brackets in (9.8) and (9.9), and comparing corresponding terms, we see that the two integrals are equal. In making the comparison, it is necessary to take account of the unitarity relation (2.9), which gives, for example,

$$\int f_0 f_{01} w(\psi + \psi_1)(\varphi + \varphi_1) d^4\Gamma = \int f_0 f_{01} w'(\psi + \psi_1)(\varphi + \varphi_1) d^4\Gamma$$

the relation (2.9) is applied here to the integration over the variables Γ' and Γ'_1 , on which only w and w' depend in the integrand.

Thus we reach the equation

$$\int f_0 \varphi I(\psi) d\Gamma = \int f_0 \psi^T I(\varphi^T) d\Gamma \quad (9.10)$$

If the principle of detailed balancing is valid in its simple form (2.8), $w = w'$, then (9.10) reduces to a literal self-conjugacy of the operator I :

$$\int f_0 \varphi I(\psi) d\Gamma = \int f_0 \psi I(\varphi) d\Gamma \quad (9.11)$$

where both integrals contain functions φ and ψ of the same variables Γ ; this is immediately evident when $w = w'$, from the expression (9.8).

Returning to the kinetic coefficients, we make in the first integral (9.7) the change $\Gamma \rightarrow \Gamma^T$, and note that

$$L_a(\Gamma^T) = \pm L_a(\Gamma) \quad (9.12)$$

the upper and lower signs relating to viscosity and thermal conduction respectively. We now use the relations (9.5) and (9.10). In the latter, we can integrate over Γ^T in place of Γ ; this clearly does not affect the value of the integral. We have

$$\begin{aligned} \int f_0 g_b L_a d\Gamma &= \pm \int f_0 g_b^T I(g_a) d\Gamma^T \\ &= \pm \int f_0 g_a^T I(g_b) d\Gamma^T \\ &= \pm \int f_0 g_a^T L_b(\Gamma) d\Gamma^T \end{aligned}$$

Now, changing $\Gamma^T \rightarrow \Gamma$ on the right-hand side, and using (9.12), we have the required result (9.7).

The kinetic coefficients must also satisfy conditions which follow from the law of increase of entropy; in particular, the "diagonal" coefficients γ_{aa} must be positive. Since the transport equation guarantees the increase of entropy, these conditions are of course necessarily satisfied when the kinetic coefficients are calculated from that equation.

The increase of entropy is expressed by the inequality

$$- \int \log f C(f) d\Gamma > 0$$

see §4. Substituting

$$f = f_0(1 + \chi/T), \quad C(f) = (f_0/T) I(\chi),$$

we have

$$-\int \log f_0 C(f) d\Gamma - \frac{1}{T} \int f_0 \log(1 + \chi/T) I(\chi) d\Gamma > 0$$

The first integral is identically zero; in the second integral, since χ is small, $\log(1 + \chi/T) \approx \chi/T$, and so we find

$$-\int f_0 \chi I(\chi) d\Gamma > 0 \quad (9.13)$$

This inequality ensures the necessary properties of the kinetic coefficients. In particular, when $\chi = g_a$ it expresses the fact that γ_{aa} is positive.

15.1.4 §10. Approximate solution of the transport equation

Because of the complexity of the law of interaction of molecules (especially polyatomic ones), which determines the function w in the collision integral, the Boltzmann equation cannot really be even written down in an exact form for specific gases. However, even with linearization and some simple assumptions about the nature of the molecular interaction, the complexity of the mathematical structure of the transport equation makes it generally impossible to solve in an exact analytical form. Fairly efficient methods for the approximate solution of the Boltzmann equation are therefore of particular significance in the kinetic theory of gases. The principle as applied to a monatomic gas is as follows (S. Chapman 1916).

Let us first take the problem of thermal conduction. For a monatomic gas, the specific heat $c_p = 5/2$, and the linearized equation (7.3) becomes

$$-v \left(\frac{5}{2} - \beta v^2 \right) = I(g) \quad (10.1)$$

where $\beta = m/2T$; the linear integral operator $I(g)$ is defined by

$$I(g) = \iint v_{\text{rel}} f_{01} (g' + g'_1 - g - g_1) d^3 p_1 d\sigma \quad (10.2)$$

corresponding to the collision integral (3.9), and the equilibrium distribution function is †

$$f_0(v) = \left(N \beta^{3/2} / m^3 \pi^{3/2} \right) e^{-\beta v^2} \quad (10.3)$$

An efficient method of approximately solving equation (10.1) is based on expanding the required functions in terms of a complete set of mutually orthogonal functions, which may with especial advantage be taken as the Sonine polynomials (D. Burnett 1935). These are defined by ‡

$$S_r^s(x) = \frac{1}{s!} e^x x^{-r} \frac{d^s}{dx^s} (e^{-x} x^{r+s}) \quad (10.4)$$

where r is any number and s is a positive integer or zero. In particular,

$$S_r^0 = 1, \quad S_r^1(x) = r + 1 - x \quad (10.5)$$

The orthogonality property of these polynomials for a given r and different s is

$$\int_0^\infty e^{-x} x^r S_r^s(x) S_r^{s'}(x) dx = \Gamma(r + s + 1) \delta_{ss} / s! \quad (10.6)$$

We shall seek the solution of (10.1) as the expansion

$$\mathbf{g}(\mathbf{v}) = (\beta/N) \mathbf{v} \sum_{i=1}^{\infty} A_s S_{3/2}^s(\beta v^2) \quad (10.7)$$

By omitting the term with $s = 0$, we automatically satisfy the condition (7.4), the integral being zero because the polynomials with $s = 0$ and $s \neq 0$ are orthogonal. The expression in parentheses on the left of (10.1) is the polynomial $S_{3/2}^1(\beta v^2)$, and this equation therefore becomes

$$-v S_{3/2}^1(\beta v^2) = (\beta/N) \sum_{s=1}^x A_s I(v S_{3/2}^s) \quad (10.8)$$

Multiplying both sides scalarly by $v f_0(v) S_{3/2}^1(\beta v^2)$ and integrating over d^3p , we obtain a set of algebraic equations

$$\sum_{l=1}^5 a_{15} A_s = \frac{15}{4} \delta_{11}, \quad l = 1, 2, \dots, \quad (10.9)$$

with

$$\begin{aligned} a_{ts} &= -(\beta^2/N^2) \int f_0 \mathbf{v} \cdot S_{3/2}^1 \Pi(v S_{3/2}^5) d^3p \\ &= (\beta^2/4N^2) \{ \mathbf{v} S_{3/2}^1, \mathbf{v} S_{3/2}^s \} \end{aligned} \quad (10.10)$$

the notation being

$$\begin{aligned} \{F, G\} &= \int f_0(v) f_0(v_1) |\mathbf{v} - \mathbf{v}_1| \Delta(F) \Delta(G) d^3p d^3p_1 d\sigma, \\ \Delta(F) &= F(\mathbf{v}') + F(\mathbf{v}_1') - F(\mathbf{v}) - F(\mathbf{v}_1) \end{aligned} \quad (10.11)$$

There is no equation with $l = 0$ in (10.9), since $a_{0s} = 0$ because of the conservation of momentum: $\Delta(\mathbf{v} S_{3/2}^0) = \Delta(\mathbf{v}) = 0$. The thermal conductivity is calculated by substituting (10.7) in the integral (7.7). The condition (7.4) shows that this integral (with $\epsilon = \frac{1}{2}mv^2$) can be put in the form

$$\kappa = -\frac{1}{3} \int f_0 S_{3/2}^1(\beta v^2) \mathbf{v} \cdot \mathbf{g} d^3p$$

and the result is

$$\kappa = 5A_1/4. \quad (10.12)$$

The advantage of expanding in Sonine polynomials is shown by the simplicity of the right-hand side of equations (10.9) and the expression (10.12).

The calculations are entirely similar for the viscosity. The solution of (8.6) is sought in the form

^{1†} The distribution function is everywhere taken to be defined in momentum space. This, however, does not prevent it from being expressed for convenience in terms of the velocity $v = p/m$.

[‡] They differ only in normalization and affix numbering from the generalized Laguerre polynomials:

$$S_r^s(x) = \frac{(-1)^r}{(r+s)!} L_{r+s}^r(x)$$

$$g_{\alpha\beta} = -(\beta^2/N^2) \left(v_\alpha v_\beta - \frac{1}{3} v^2 \delta_{\alpha\beta} \right) \sum_{s=0}^{\infty} B_s S_{s/2}^s(\beta v^2). \quad (10.13)$$

Substitution in (8.6), multiplication by

$$f_0(v) S_{5/2}^1(\beta v^2) \left(v_\alpha v_\beta - \frac{1}{3} v^2 \delta_{\alpha\beta} \right)$$

and integration over d^3p leads to the set of equations

$$\sum_{s=0}^{\infty} b_{1s} B_s = 5\delta_{10}, \quad l = 0, 1, 2, \dots \quad (10.14)$$

where

$$b_{Is} = (\beta^3/N^2) \left\{ \left(v_\alpha v_\beta - \frac{1}{3} v^2 \delta_{\alpha\beta} \right) S_{S/2}^1, \quad \left(v_\alpha v_\beta - \frac{1}{3} v^2 \delta_{\alpha\beta} \right) S_{S/2}^s \right\}. \quad (10.15)$$

The viscosity is found from (8.9) as

$$\eta = \frac{1}{4} m B_0 \quad (10.16)$$

The infinite set of equations (10.9) or (10.14) is approximately solved by retaining only the first few terms in the expansion (10.7) or (10.13), i.e. by artificially terminating the set. The approximation converges extremely rapidly as the number of terms increases: in general, retaining just one term gives the value of κ or η with an accuracy of $1 - 2\%$.†

We shall show that the approximate solution of the linearized transport equation for monatomic gases by the above method gives values of the kinetic coefficients that are certainly less than would follow from the exact solution of the equation.

The transport equation may be written in the symbolic form

$$I(g) = L \quad (10.17)$$

where the functions g and L are vectors in the thermal conduction problem, and tensors of rank two in the viscosity problem. The corresponding kinetic coefficient is determined from the function g as a quantity proportional to the integral

$$- \int f_0 g I(g) d^3p \quad (10.18)$$

see §9. The approximate function g , however, satisfies not equation (10.17) itself but only the integral relation

$$\int f_0 g I(g) d^3p = \int f_0 L g d^3p \quad (10.19)$$

as is evident from the way in which the coefficients in the expansions of g are determined.

The statement made above follows immediately from the "variational principle" Whereby the solution of (10.17) gives a maximum of the functional (10.18) within the class of functions that satisfy the condition (10.19). The validity of this principle is easily shown by considering the integral

$$- \int f_0 (g - \varphi) I(g - \varphi) d^3p$$

where g is the solution of (10.17), and φ any trial function that satisfies the condition (10.19). This integral is positive, by the general property (9.13) of the operator I . Expanding the parentheses, we write

$$- \int f_0 \{gI(g) + \varphi I(\varphi) - \varphi I(g) - gI(\varphi)\} d^3p$$

† The convergence is, however, some what less good in problems of diffusion. and especially of thermal diffusion.

Since for a monatomic gas the principle of detailed balancing is valid in the form (2.8), the operator I has the self-conjugacy property (9.11). † Hence the integrals of the last two terms in the braces are equal. Then substitution of $I(g) = L$ gives

$$- \int f_0 \{gI(g) + \varphi I(\varphi) - 2\varphi I(g)\} d^3p = - \int f_0 \{gI(g) + \varphi I(\varphi) - 2L\varphi\} d^3p > 0$$

Finally, transforming the integral of the last term by means of (10.19), we find

$$- \int f_0 g I(g) d^3p > - \int f_0 \varphi I(\varphi) d^3p$$

as was to be proved.

There is a case that is of formal interest though having no direct physical significance, namely a gas of particles interacting according to $U = \alpha/r^4$.‡ This has the property that the collision cross-section for such particles (determined by classical mechanics) is inversely proportional to the relative speed v_{rel} , and so the product $v_{\text{rel}} d\sigma$ which appears in the collision integral depends only on the scattering angle θ , not on v_{rel} . The property in question is easily proved by dimensional arguments: the cross-section depends only on three parameters, namely the constant α , the particle mass m , and the velocity v_{rel} , and from these we can form no dimensionless combination, and only one combination $v_{\text{rel}}^{-1}(\alpha/m)^{1/2}$ having the dimensions of area, which must therefore be proportional to the cross-section. This property of the cross-section greatly simplifies the structure of the collision integral, and it becomes possible to find exact solutions of the linearized transport equations for the thermal conduction and viscosity problems. These solutions are found to be just the first terms in the expansions (10.7) and (10.13).§

PROBLEMS

Problem 1. Find the thermal conductivity of a monatomic gas, retaining only the first term in the expansion (10.7).

Solution. With one term of the expansion, equations (10.9) reduce to $A_1 = 15/4a_{11}$. To calculate the integral (10.10) with $l = s = 1$, we express v, v_1, v', v'_1 in terms of the velocity of the centre of mass and the relative velocities of the two atoms:

$$\begin{aligned} V &= \frac{1}{2}(v + v_1) = \frac{1}{2}(v' + v'_1) \\ v_{\text{rel}} &= v - v_1, \quad v'_{\text{rel}} = v' - v'_1 \\ v^2 + v_1^2 &= 2V^2 + \frac{1}{2}v_{\text{rel}}^2 \\ d^3p d^3p_1 &= m^6 d^3V d^3v_{\text{rel}}. \end{aligned}$$

† It must be emphasized that the variational principle as stated above is dependent on this, and is not valid when the principle of detailed balancing has only its most general form (2.3).

‡ The transport properties of this gas model were first discussed by J. C. Maxwell (1866).

§ A detailed account of the theory for this case is given in §§38-40 of L. Waldmann's article in *Handbuch der*

A simple calculation gives

$$\Delta(vS_2^1) = \Delta(\beta v^2 v) = \beta [(V \cdot v'_{\text{rel}}) v'_{\text{rel}} - (V \cdot v_{\text{rel}}) v_{\text{rel}}].$$

Squaring and averaging over the directions of V , we obtain

$$i\beta^2 [v_{\text{rel}}^4 - (v_{\text{rel}} \cdot v'_{\text{rel}})^2] V^2 = \frac{2}{3} \beta^2 v_{\text{rel}}^4 V^2 \sin^2 \theta.$$

Integration over $4\pi V^2 dV$ and over the directions of v_{rel} (the latter reducing to a multiplication by 4π) gives finally

$$a_{\text{II}} = \frac{1}{4} \beta^+ (\beta/2\pi)^{t/2} \int_0^\pi \int_0^x \exp\left(-\frac{1}{2} \beta v_{\text{rel}}^2\right) v_{\text{rel}}^7 \sin^2 \theta \frac{d\sigma}{d\theta} dr_{\text{rel}} d\theta; \quad (1)$$

the thermal conductivity is

$$\kappa = 75/16 a_{11} \quad (2)$$

Problem 2. The same as Problem 1, but for the viscosity.

Solution. We find in a similar manner

$$B_0 = 5/b_{00}, \quad \eta = 5 m/4b_{00}$$

In the integral (10.15) with $I = s = 0$,

$$\Delta\left(v_a v_\beta - \frac{1}{3} v^2 \delta_{a\beta}\right) = \frac{1}{3} (v_{\text{rel},\alpha} v_{\text{rel},\beta} - v_{\text{rel},\alpha} v_{\text{rel},\beta}).$$

The square of this is

$$\frac{1}{2} x_{\text{rel}}^4 \sin^2 \theta$$

Integration over d^3V and over the directions of v_{rel} shows that $b_{00} = a_{11}$. so that

$$\eta = 4m_\kappa/15. \quad (3)$$

For a monatomic gas, the specific heat $c_p = S/2$; hence the ratio of the kinematic viscosity $\nu = \eta/Nm$ to the thermometric conductivity $\chi = \kappa/Nc_p$. Called the Prandtl number, is, in this approximation

$$\nu/X = 2/3 \quad (4)$$

whatever the law of interaction of the atoms. †

Problem 3. In the same approximation, find the thermal conductivity and viscosity of a monatomic gas when the atoms are regarded as hard elastic spheres with diameter d .

SOLUTION. The scattering of one sphere by another is equivalent to that of a point particle by an impenetrable sphere of radius d : the cross-section is therefore $d\sigma = (d)^2 d\omega$. Calculation of the integral (1) gives the results ‡

$$\kappa = \frac{75}{64\sqrt{\pi}d^2} \sqrt{\frac{T}{m}} = \frac{0.66}{d^2} \sqrt{\frac{T}{m}} \quad (5)$$

$$\eta = \frac{5}{16\sqrt{\pi}d^2} \sqrt{(mT)} = 0.18 \frac{\sqrt{(mT)}}{d^2} \quad (6)$$

Physik 12, 295, 1958.

||Formulae (1)-(6) are due to Chapman and Enskog.

† For a gas with the interaction law $U = \alpha/r^4$, formulae (1)-(4) become exact, and lead to the values

$$\kappa = 3.04T(m\alpha)^{12}, \quad \eta = 0.81T(m/\alpha)^{1/2}.$$

‡ To illustrate the rapidity with which successive approximations converge, it may be mentioned that the inclusion of the second and third terms in the expansions (10.7) and (10.13) multiplies the expressions (5) and (6) by (1 + 0.015 + 0.001) and (1 + 0.023 + 0.002) respectively.

15.1.5 §11. Diffusion of a light gas in a heavy gas

The phenomenon of diffusion in a mixture of two gases will be studied here for some particular cases which allow a fairly extensive theoretical analysis.

Let N_1 and N_2 denote the particle number densities of the two components of the mixture, and let the concentration of the mixture be expressed by $c = N_1/N$, where $N = N_1 + N_2$. The total number density of particles is related to the pressure and temperature by $N = P/T$. The gas pressure is constant throughout the volume; let the concentration and the temperature vary along the x -axis (by allowing a temperature variation, we include thermal diffusion in the problem).

Let us consider diffusion in a mixture of gases of which one (the "heavy" gas) consists of molecules whose mass is much larger than that of the particles of the other (the "light" gas). The latter will be assumed monatomic. Since the mean thermal energy of translational motion is the same for all particles (at a given temperature), the mean speed of the heavy molecules is much less than that of the light ones, and they can be approximately regarded as being at rest. When a light and a heavy particle collide, the latter may be assumed to remain fixed, while the velocity of the light particle changes direction but remains unaltered in magnitude.

In this section we shall take the case where the concentration of the light gas (gas 1) in the mixture is small. Then collisions between its atoms are relatively rare and we may suppose that the light particles collide only with the heavy ones. †

In the general case of an arbitrary gas mixture, a separate transport equation has to be set up for the distribution function of the particles of each component, the right-hand side containing the sum of the collision integrals between the particles of each component and those of that and every other component. In the particular case under discussion, however, it is convenient to derive the simplified transport equation *ab initio*.

The required equation is to determine the distribution function for the particles of the light gas, which we denote by $f(p, x)$. With the assumptions made, collisions between light and heavy particles do not affect the distribution of the latter, and in the diffusion problem this distribution can be taken as given.

Let θ be the angle between the direction of the momentum $p = m_1v$ of a light particle and the x -axis. It is evident from the symmetry of the conditions of the problem that the distribution function will depend only on θ (and on the variables p and x). Let $d\sigma = F(p, \alpha)d\alpha$ denote the cross-section for collisions in which a light particle with momentum p acquires a momentum $p' = mv'$ directed into the solidangle element $d\alpha$; α is the angle between the vectors p and p' (whose magnitudes are equal). The probability per unit path length that the particle undergoes such a collision is $N_2 d\sigma$, where N_2 is the number density of heavy particles; the probability per unit time is found by multiplying by the speed of the particle: $N_2 v d\sigma$.

Let us consider particles in a given unit of volume having momenta in a given range dp of magnitudes and directed into the solid-angle element $d\alpha$. The number of such particles is $f d^3p = f(p, \theta, x) p^2 dp d\alpha$. Of these,

$$f(p, \theta, x) p^2 dp d\theta. N_2 v F(p, \alpha) d\alpha'$$

† The kinetic theory of this model was first developed by H. A. Lorentz (1905). particles per unit time acquire by collisions a momentum p' directed into $d\alpha'$. Thus the total number of particles whose momentum changes direction is

$$d^3p \int N_2 v f(p, \theta, x) F(p, \alpha) d\alpha'$$

Conversely, of the particles in $d^3p' = p'^2 dp' d\theta'$,

$$f(p', \theta', x) p'^2 dp' d\theta'. N_2 v' F(p', \alpha) d\alpha$$

acquire a velocity directed into $d\alpha$. Since $p' = p$, the total number of particles that acquire a velocity in d^3p as a result of collisions is

$$d^3p \int N_2 v f(p, \theta', x) F(p, \alpha) d\alpha'$$

Thus the change in the number of particles in d^3p is the difference

$$d^3p. N_2 v \int F(p, \alpha) [f(p, \theta', x) - f(p, \theta, x)] d\alpha'$$

This must equal the total time derivative

$$d^3p (df/dt) = d^3p \mathbf{v} \cdot \nabla f = d^3p (\partial f / \partial x) v \cos \theta.$$

Equating the two expressions gives the required transport equation

$$v \cos \theta \partial f / \partial x = N_2 v \int F(p, \alpha) [f(p, \theta', x) - f(p, \theta, x)] d\alpha' \equiv C(f) \quad (11.1)$$

The right-hand side is zero for any function f that does not depend on the direction of p , and not only for the Maxwellian function f_0 as in the case of the Boltzmann equation. This is because of the assumption that the magnitude of the momentum is unchanged in the scattering of light particles by heavy ones: such collisions evidently leave steady any energy distribution of light particles. In reality, equation (11.1) corresponds only to the zero-order approximation with respect to the small quantity m_1/m_2 , and energy relaxation occurs in the next approximation.

If the concentration and temperature gradients are not too large (these quantities varying only slightly over distances of the order of the mean free path), f may be sought as the sum

$$f = f_0(p, x) + \delta f(p, \theta, x)$$

where δf is a small correction to the local-equilibrium distribution function f_0 and is linear in the gradients of c and T . In turn, we seek δf in the form

$$\delta f = \cos \theta \cdot g(p, x) \quad (11.2)$$

where g is a function of p and x only. In substituting in (11.1), it is sufficient to retain the f_0 term on the left-hand side; in the collision integral, the f_0 term disappears:

$$C(f) = g N_2 v \int F(p, \alpha) (\cos \theta' - \cos \theta) d\alpha'$$

the function g , which is independent of the angles, has been taken outside the integral.

This integral may be simplified as follows. We take the direction of the momentum p as the polar axis for the measurement of angles. Let φ and φ' be the azimuths of the x -axis and the momentum p' relative to this polar axis. Then

$$\cos \theta' = \cos \theta \cos \alpha + \sin \theta \sin \alpha \cos (\varphi - \varphi')$$

The solid-angle element $d\sigma' = \sin \alpha d\alpha d\varphi'$, since α is the polar angle for the momentum $\mathbf{p}'$. The integral of the term in $\cos (\varphi - \varphi')$ gives zero from the integration over $d\varphi'$. The result is

$$C(f) = -N_2 \sigma_1(p) v g \cos \theta = -N_2 \sigma_t(p) v \delta f, \quad (11.3)$$

where

$$\begin{aligned} \sigma_t(p) &= 2\pi \int F(p, \alpha) (1 - \cos \alpha) \sin \alpha d\alpha \\ &= \int (1 - \cos \alpha) d\sigma \end{aligned} \quad (11.4)$$

is called the transport cross-section for collisions.

From (11.1), we now find

$$g(p, x) = -\frac{1}{N_2 \sigma_t} \frac{\partial f_0}{\partial x} \quad (11.5)$$

The diffusion flux i is, by definition, the flux of molecules of one component of the mixture (in this case, the light component). It is calculated from the distribution function as the integral

$$\mathbf{i} = \int f \mathbf{v} d^3p \quad (11.6)$$

or, since the vector $\mathbf{i}$ is along the x -axis,

$$i = \int \cos \theta \cdot f v d^3p = \int \cos^2 \theta \cdot g v d^3p \quad (11.7)$$

the f_0 term disappears on integration over angles. Substitution of (11.5) gives

$$\begin{aligned} i &= -\frac{1}{N_2} \frac{\partial}{\partial x} \int \frac{f_0 v \cos^2 \theta}{\sigma_1(p)} d^3p \\ &= -\frac{1}{3N_2} \frac{\partial}{\partial x} \int \frac{f_0 v}{\sigma_t} d^3p \end{aligned}$$

This expression may be written

$$i = -\frac{1}{3N_2} \frac{\partial}{\partial x} \{N_1 \langle v / \sigma_t \rangle\}$$

where the averaging is over the Maxwellian distribution. Lastly, we use the concentration $c = N_1/N \approx N_1/N_2$ (since by hypothesis $N_2 \gg N_1$), and replace N_2 approximately by $N = P/T$. The pressure being constant, we find the result

$$\begin{aligned} i &= -\frac{1}{3} T \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \frac{C}{T} \langle v / \sigma_t \rangle \right\} \\ &= -\frac{1}{3} \langle v / \sigma_t \rangle \frac{\partial C}{\partial x} - \frac{1}{3} c T \frac{\partial}{\partial T} \left[\frac{1}{T} \langle v / \sigma_t \rangle \right] \frac{\partial T}{\partial x}. \end{aligned} \quad (11.8)$$

This is to be compared with the phenomenological expression for the diffusion flux,

$$i = -ND \left(\nabla c + \frac{k_T}{T} \nabla T \right) \quad (11.9)$$

which defines the diffusion coefficient D and the thermal diffusion ratio k_T ; the product $D_T = Dk_T$ is the thermal diffusion coefficient (see *FM*, 58). [†] Thus we find

$$D = (T/3P) \langle v/\sigma_t \rangle \quad (11.10)$$

$$k_T = cT \frac{\partial}{\partial T} \log \frac{\langle v/\sigma_t \rangle}{T}. \quad (11.11)$$

In diffusion equilibrium in a non-uniformly heated gas, a concentration distribution is set up in which the diffusion flux $i = 0$. Equating to a constant the expression in the braces in (11.8), we obtain

$$c = \text{constant} \times \frac{T}{\langle v/\sigma_t \rangle^*} \quad (11.12)$$

Assuming that the cross-section σ_t is independent of the velocity, and noting that $\langle v \rangle \sim (T/m_1)^{1/2}$, we find that, in diffusion equilibrium of a mixture with a low concentration of the light gas, that concentration is proportional to $\sqrt{T}$, i.e. the light gas is concentrated in the regions where the temperature is high.

The diffusion coefficient is, in order of magnitude,

$$D \sim \bar{v}l, \quad (11.13)$$

where $\bar{v}$ is the mean thermal speed of the light-gas molecules and $l \sim 1/N\sigma$ the mean free path. There is a well-known elementary derivation of this formula. The number of molecules of gas 1 passing across unit area perpendicular to the x -axis from left to right per unit time is equal in order of magnitude to the product $N_1\bar{v}$, where the density N_1 must be taken at a distance l to the left of the area, i.e. at the points from which the molecules reach that area without undergoing collisions. We similarly find the number of molecules crossing the same area from right to left, and the difference between the two numbers gives the diffusion flux:

$$i \sim N_1(x-l)\bar{v} - N_1(x+l)\bar{v} \sim -l\bar{v}dN_1/dx$$

which gives (11.13). [†]

15.1.6 §12. Diffusion of a heavy gas in a light gas

Let us now consider the opposite limiting case, where the concentration of the heavy gas in the mixture is small. In this case, the diffusion coefficient may be calculated indirectly without using the transport equation, by finding the mobility of the heavy-gas particles, regarding this gas as being in an external field. The mobility b is related to the diffusion coefficient of the same particles by the familiar Einstein's relation

$$D = bT \quad (12.1)$$

see *FM*, §59.

The mobility is, by definition, the proportionality coefficient between the mean velocity $\mathbf{V}$

^{1†}The phenomenon of thermal diffusion was predicted by Enskog (1911) for precisely this model of a gas mixture.

acquired by a gas particle in the external field. and the force $\mathbf{f}$ exerted on the particle by the field:

$$\mathbf{V} = b\mathbf{f}. \quad (12.2)$$

The velocity $\mathbf{V}$ is determined from the condition that the force $\mathbf{f}$ balances the resistance $\mathbf{f}_r$ exerted on the moving heavy particle by the light particles; collisions between heavy particles may be neglected, because there are relatively few of them. The distribution function of the light particles is Maxwellian:

$$f_0 = \frac{N_1}{(2\pi m_1 T)^{3/2}} \exp\left(-\frac{m_1 v^2}{2T}\right)$$

where m_1 is the mass of a light particle.

Let us consider one particular heavy particle with velocity $\mathbf{V}$, and take coordinates moving with that particle; let $\mathbf{v}$ denote the velocities of the light particles in these coordinates. The distribution function of the light particles in these coordinates is $f_0(v+V)$; cf. (6.9). Assuming that V is small, we can write

$$f_0(v+V) \approx f_0(v) (1 - m_1 \mathbf{v} \cdot \mathbf{V}/T) \quad (12.3)$$

The required resistance $\mathbf{f}_r$ can be calculated as the total momentum transferred to the heavy particle by light particles colliding with it per unit time. The frame of reference is unchanged in a collision. The light particle carries momentum $m_1 \mathbf{v}$; after the collision, in which its momentum is turned through an angle α , it carries away an average momentum $m_1 v \cos \alpha$. The average momentum transferred to the heavy particle in such a collision is therefore $m_1 v (1 - \cos \alpha)$. Multiplying this by the flux of light particles with velocity v and by the cross-section do for such a collision, and integrating, we obtain the total momentum transferred to the heavy particle:

$$\mathbf{f}_r = m_1 \int f_0(\mathbf{v} + \mathbf{V}) \mathbf{v} \mathbf{v}_{\sigma_1} d^3 p$$

again with the notation (11.4). When $f_0(v+V)$ is substituted in the form (12.3), the first term gives zero in the integration over directions of v , leaving

$$\mathbf{f}_r = -\frac{m_1^2}{T} \int f_0(v) \mathbf{V} \cdot \mathbf{v} v v_{\sigma_1} d^3 p$$

or, averaging over directions of $\mathbf{v}$,

$$\begin{aligned} \mathbf{f}_r &= -\frac{m_1^2}{3T} \mathbf{V} \int f_0(v) \sigma_1 v^3 d^3 p \\ &= -N_1 \frac{m_1^2}{3T} \mathbf{V} \langle \sigma_1 v^3 \rangle \end{aligned}$$

where the angle brackets again denote averaging over the ordinary Maxwellian distribution. Lastly, since in this case $N_1 \gg N_2$, we write $N_1 \approx N = P/T$, so that

$$\mathbf{f}_r = -\frac{m_1^2 P}{3T^2} \langle \sigma_1 v^3 \rangle \mathbf{V}$$

¹† Diffusion, thermal conduction and viscosity are brought about by the same mechanism, namely direct molecular transport. The thermal conduction may be regarded as a "diffusion of energy" and the viscosity as a "diffusion of momentum". We may therefore assert that the diffusion coefficient D , the thermometric conductivity $\chi = \kappa/Nc_p$ and the kinematic viscosity $\nu = \eta/Nm$ are of the same order of magnitude; this leads to the formulae (7.10) for the thermal conductivity and (8.11) for the viscosity.

Equating to zero the sum of the resistance $\mathbf{f}_r$ and the external force $\mathbf{f}$, we find from (12.2) the mobility b , and thence the diffusion coefficient

$$D = bT = 3T^3/m_1^2 P \langle \sigma_t v^3 \rangle. \quad (12,4)$$

To calculate the thermal diffusion in this case, it would be necessary to know the distribution function of the light-gas particles in the presence of a temperature gradient. The thermal diffusion coefficient therefore cannot be calculated in a general form here.

In order of magnitude $D \sim \bar{v}/N\sigma$, where $\bar{v} \sim \sqrt{T/m_1}$ is, as in (11.13), the mean thermal speed of the light-gas molecules. Thus the order of magnitude of the diffusion coefficient is the same in each case:

$$D \sim T^{3/2}/\sigma P m_1^{1/2} \quad (12,5)$$

PROBLEM

Determine the diffusion coefficient in a mixture of two gases (one light and one heavy), regarding their particles as hard elastic spheres with diameters d_1 and d_2 .

Solution. The collision cross-section $d\sigma = \pi(d_1 + d_2)^2 d\omega/16\pi$, and so the transport cross-section $\sigma_1 = \frac{1}{4}\pi(d_1 + d_2)^2$, equal in this case to the total cross-section σ . The diffusion coefficient is

$$D = AT^{3/2}/(d_1 + d_2)^3 P m_1^{1/2}$$

where m_1 is the mass of a light particle and A is a numerical factor. When the concentration of the light gas is small, a calculation from (11.10) gives

$$A = 4(2/\pi)^{3/2} = 0.68$$

When the concentration of the heavy gas is small, (12.4) gives

$$A = 3/2\sqrt{2\pi} = 0.6$$

Note that the values of A in the two limiting cases are almost equal.

15.1.7 §13. Transport phenomena in a gas in an external field

The rotational degrees of freedom of molecules provide the mechanism whereby an external magnetic or electric field can affect transport phenomena in a gas. [†] The effect is of the same nature in the magnetic and electric cases; we shall first discuss a gas in a magnetic field.

A rotating molecule has in general a magnetic moment, whose average value (in the quantum-mechanical sense) will be denoted by μ . The magnetic field will be assumed so weak that μB is small in comparison with the intervals in the fine structure of molecular levels. [‡] We can then neglect the influence of the field on the

state of the molecule, so that the magnetic moment is calculated for the unperturbed state. For fairly high temperatures, the case we shall consider, μB is small in comparison with T also: this enables us to neglect the influence of the field on the equilibrium distribution function of the gas molecules.

^{††} This mechanism was pointed out by Yu. M. Kagan and L. A. Maksimov (1961), who also derived the results given in this section.

[‡] In macroscopic electrodynamics, the mean value (over physically infinitesimal volumes) of the magnetic field is called the magnetic induction and denoted by $\mathbf{B}$. When the density of the medium is low, as in a gas, the magnetization is negligible, and the vector B then coincides with the macroscopic field $\mathbf{H}$.

The magnetic moment is parallel to the rotational angular momentum $\mathbf{M}$ of the molecule, and may be written

$$\boldsymbol{\mu} = \gamma \mathbf{M}. \quad (13.1)$$

Classical rotation of the molecule corresponds to large rotational quantum numbers; we can then neglect in M the difference between the total angular momentum (including spin) and the rotational angular momentum. The value of the constant coefficient γ depends on the nature of the molecule and the nature of its magnetic moment. For example, with a diatomic molecule having non-zero spin S ,

$$\gamma \approx (2\sigma/M)\mu_B \quad (13.2)$$

where μ_B is the Bohr magneton, and the number $\sigma = J - K$ is the difference between the quantum numbers J of the total angular momentum and K of the rotational angular momentum (σ takes the values $S, S-1, \dots, -S$); in the denominator, the difference between J and K is not significant: $M \approx \hbar J \approx \hbar K$. In (13.2) it is assumed that the spin-axis interaction in the molecule is small in comparison with the intervals in the rotational structure of the levels (Hund's case b).[†]

In a magnetic field $\mathbf{B}$, the molecule is subjected to a torque $\boldsymbol{\mu} \times \mathbf{B}$. The vector $\mathbf{M}$ is then no longer constant during the "free" motion of the molecule, but varies according to

$$d\mathbf{M}/dt = \boldsymbol{\mu} \times \mathbf{B} = -\gamma \mathbf{B} \times \mathbf{M}; \quad (13.3)$$

the vector $\mathbf{M}$ precesses about the direction of the field with angular velocity $-\gamma \mathbf{B}$. The left-hand side of the transport equation thus has an added term $(\partial f / \partial \mathbf{M}) \cdot \dot{\mathbf{M}}$, and the equation becomes

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \gamma \mathbf{M} \times \mathbf{B} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{M}} = C(f). \quad (13.4)$$

The variables Γ on which the distribution function depends must also include the discrete variable σ , which determines the value of the magnetic moment, if there is such a variable, as in (13.2).

In problems of thermal conduction and viscosity, we again take a distribution close to the equilibrium one, and express it as

$$f = f_0(1 + \chi/T). \quad (13.5)$$

We shall first show that a term in $\partial f_0 / \partial M$ does not occur in the transport equation. Since f_0 depends only on the energy $\epsilon(\Gamma)$ of the molecule, and $\partial \epsilon / \partial M$ is equal to the angular velocity Ω , we have

$$\gamma \mathbf{M} \times \mathbf{B} \cdot \partial f_0 / \partial \mathbf{M} = \gamma \mathbf{M} \times \mathbf{B} \cdot \Omega \partial f_0 / \partial \epsilon. \quad (13.6)$$

For molecules of the rotator and spherical-top types, $\mathbf{M}$ and Ω are parallel, and the expression (13.6) is zero identically. In other cases, it becomes zero after averaging over the rapidly varying phases, the necessity for which has been explained in §1. When molecules of the symmetrical-top or asymmetrical-top type rotate, there is a rapid variation both of the direction of the axes of the molecule itself and of that of its angular velocity Ω . After the

[†]Formula (13.2) follows from the exact formula for case *b*, derived in *QM*, 8113, Problem 3, on taking the limit of large J and K with a fixed difference $J - K$. The contribution of the orbital angular momentum Λ is then negligible, being of the next order of smallness in $1/J$.

averaging mentioned, $\mathbf{\Omega}$ can retain only the component $\mathbf{\Omega}_M$ along the constant vector $\mathbf{M}$, and for this component the product $\mathbf{M} \cdot \mathbf{\Omega}_M = 0$.

The remaining terms in the transport equation are transformed in the same way as in §7 or §8. For instance, in the thermal conduction problem we find the equation

$$\frac{\epsilon(\Gamma) - c_p T}{T} \mathbf{v} \cdot \nabla T = -\gamma \mathbf{M} \times \mathbf{B} \cdot \frac{\partial \chi}{\partial \mathbf{M}} + I(\chi). \quad (13.7)$$

The solution of this equation is again to be sought in the form $\chi = g \cdot \nabla T$, but there are now three vectors $\mathbf{v}, \mathbf{M}, \mathbf{B}$, not two, available to construct the vector function $\mathbf{g}(\Gamma)$. The external field creates a distinctive direction in the gas. The process of thermal conduction therefore becomes anisotropic, and the scalar coefficient κ has to be replaced by $\cdot$, thermal conductivity tensor $\kappa_{\alpha\beta}$, which determines the heat flux by

$$q_\alpha = -\kappa_{\alpha\beta} \partial T / \partial x_\beta \quad (13.8)$$

The tensor $\kappa_{\alpha\beta}$ is calculated from the distribution function as the integral

$$\kappa_{\alpha\beta} = -\frac{1}{T} \int f_0 \epsilon v_\alpha g_\beta d\Gamma; \quad (13.9)$$

cf. (7.5).

The general form of a tensor of rank two depending on the vector $\mathbf{B}$ is

$$\kappa_{\alpha\beta} = \kappa \delta_{\alpha\beta} + \kappa_1 b_\alpha b_\beta + \kappa_2 e_{\alpha\beta\gamma} b_\gamma, \quad (13.10)$$

where $\mathbf{b} = \mathbf{B}/B$, $e_{\alpha\beta\gamma}$ is the antisymmetric unit tensor, and $\kappa, \kappa_1, \kappa_2$ are scalars depending on the field strength B . The tensor (13.10) obviously has the property [†]

$$\kappa_{\alpha\beta}(B) = \kappa_{\beta\alpha}(-B) \quad (13.11)$$

The expression (13.10) corresponds to the heat flux

$$\mathbf{q} = -\kappa \nabla T - \kappa_1 \mathbf{b}(\mathbf{b} \cdot \nabla T) - \kappa_2 \nabla T \times \mathbf{b}. \quad (13.12)$$

The last term is what is called an odd effect, changing sign with the field.

The integral term $I(X)$ on the right of (13.7) is given by (6.5). The integrand contains the function f_0 , which is proportional to the gas density N . Separating this factor and dividing both sides of the equation by it, we find that N appears only in the combinations B/N with the field and $\nabla T/N$ with the temperature gradient. It is therefore clear that the function $f_0 \chi = f_0 g \cdot \nabla T$ will depend on the parameters N and B only through the ratio B/N ; the integrals (13.9) will also depend only on this quantity, and therefore so will the coefficients $\kappa, \kappa_1, \kappa_2$ in (13.12). The density N is proportional (at a given temperature) to the gas pressure P . Thus the thermal conductivity of a gas in a magnetic field depends on the field and the pressure only through the ratio B/P .[†]

When B increases, the first term on the right of (13.7) increases, but the second term is unchanged. It is therefore clear that as $B \rightarrow \infty$ the solution of the equation must be a function depending only on the direction (not the magnitude) of the field, and this function must make identically zero the term $\mathbf{M} \times \mathbf{B} \cdot \partial \chi / \partial \mathbf{M}$ in the equation; accordingly, the coefficients $\kappa, \kappa_1, \kappa_2$ tend to constant limits independent of B , as $B \rightarrow \infty$.

The treatment of the viscosity of a gas in a magnetic field is similar. The corresponding transport equation is

^{††} This property expresses the symmetry of the kinetic coefficients in the presence of a magnetic field. In the present case, it necessarily follows from the existence of only the one vector $\mathbf{b}$ from which the tensor $\kappa_{\alpha\beta}$ can be constructed.

$$\left(mv_\alpha v_\beta - \frac{\epsilon(\Gamma)}{c_v} \delta_{\alpha\beta} \right) V_{\alpha\beta} = I(\chi) - \gamma \mathbf{M} \times \mathbf{B} \cdot \frac{\partial \chi}{\partial \mathbf{M}} \quad (13.13)$$

cf. (6.19). The solution is to be sought in the form $\chi = g_{\alpha\beta} V_{\alpha\beta}$. Instead of the two viscosity coefficients η and ζ , we must now use a tensor $\eta_{\alpha\beta\gamma\delta}$ of rank four which determines the viscous stress tensor

$$\sigma'_{\alpha\beta} = \eta_{\alpha\beta\gamma\delta} V_{\gamma\delta}; \quad (13.14)$$

by definition, the tensor $\eta_{\alpha\beta\gamma\delta}$ is symmetric in the pairs of suffixes α, β and γ, δ . With the known function χ , its components are calculated as

$$\eta_{\alpha\beta\gamma\delta} = - \int mv_\alpha v_\beta f_0 g_{\gamma\delta} d\Gamma \quad (13.15)$$

The viscosity tensor thus found will necessarily satisfy the condition

$$\eta_{\alpha\beta\gamma\delta}(\mathbf{B}) = \eta_{\gamma\delta\alpha\beta}(-\mathbf{B}), \quad (13.16)$$

which expresses the symmetry of the kinetic coefficients.

With the vector $\mathbf{b} = \mathbf{B}/B$ (and the unit tensors $\delta_{\alpha\beta}$ and $e_{\alpha\beta\gamma}$), we can construct the following independent tensor combinations having the symmetry properties of $\eta_{\alpha\beta\gamma\delta}$:

$$\left. \begin{aligned} (1) & \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta} + \delta_{\alpha\delta} \delta_{\beta\gamma}, \\ (2) & \delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\delta}, \\ (3) & \delta_{\alpha\gamma} b_\beta b_\delta + \delta_{\beta\gamma} b_\alpha b_\delta + \delta_{\alpha\delta} b_\beta b_\gamma + \delta_{\beta\delta} b_\alpha b_\gamma, \\ (4) & \delta_{\alpha\beta} b_\gamma b_\delta + \delta_{\gamma\delta} b_\alpha b_\beta, \\ (5) & b_\alpha b_\beta b_\gamma b_\delta, \\ (6) & b_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta} + b_{\beta\gamma} \delta_{\alpha\delta} + b_{\alpha\delta} \delta_{\beta\gamma} + b_{\beta\delta} \delta_{\alpha\gamma}, \\ (7) & b_{\alpha\gamma} b_\beta b_\delta + b_{\beta\gamma} b_\alpha b_\delta + b_{\alpha\delta} b_\beta b_\gamma + b_{\beta\delta} b_\alpha b_\gamma, \end{aligned} \right\} \quad (13.17)$$

where $b_{\alpha\beta} = -b_{\beta\alpha} = e_{\alpha\beta\gamma} b_\gamma$. In all these combinations except (4), the property (13.16) follows automatically from the symmetry with respect to the pairs of suffixes α, β and γ, δ ; in (4), the two terms are combined in order to satisfy the condition (13.16). [†]

In accordance with the number of tensors (13.17), a gas in a magnetic field in general has seven independent viscosity coefficients. These may be defined as the coefficients in the following expression for the viscous stress tensor:

$$\begin{aligned} \sigma'_{\alpha\beta} = & 2\eta \left(V_{\alpha\beta} - \frac{1}{3} \delta_{\alpha\beta} \operatorname{div} V \right) + \zeta \delta_{\alpha\beta} \operatorname{div} V \\ & + \eta_1 (2V_{\alpha\beta} - \delta_{\alpha\beta} \operatorname{div} V + \delta_{\alpha\beta} V_{\gamma\delta} b_\gamma b_\delta - 2V_{\alpha\gamma} b_\gamma b_\beta \\ & - 2V_{\beta\gamma} b_\gamma b_\alpha + b_\alpha b_\beta \operatorname{div} V + b_\alpha b_\beta V_{\gamma\delta} b_\gamma b_\delta) \\ & + 2\eta_2 (V_{\alpha\gamma} b_\gamma b_\beta + V_{\beta\gamma} b_\gamma b_\alpha - 2b_\alpha b_\beta V_{\gamma\delta} b_\gamma b_\delta) \\ & + \eta_3 (V_{\alpha\gamma} b_\beta b_\gamma + V_{\beta\gamma} b_\alpha b_\gamma - V_{\gamma\delta} b_{\alpha\gamma} b_\beta b_\delta - V_{\gamma\delta} b_{\beta\gamma} b_\alpha b_\delta) \\ & + 2\eta_4 (V_{\gamma\delta} b_{\alpha\gamma} b_\beta b_\delta + V_{\gamma\delta} b_{\beta\gamma} b_\alpha b_\delta) + \zeta_1 (\delta_{\alpha\beta} V_{\gamma\delta} b_\gamma b_\delta + b_\alpha b_\beta \operatorname{div} V); \end{aligned} \quad (13.18)$$

$V_{u\beta}$ is defined in (6.12). This is so constructed that $\eta, \eta_1, \dots, \eta_4$ are coefficients of tensors which give zero on contraction with respect to the suffixes α, β ; ζ and ζ_1 are coefficients of tensors with non-zero trace, and may be called second viscosity coefficients. Note that they

[†] The change in the thermal conductivity of a gas in a magnetic field is called the Senfileben effect.

contain not only the scalar $\text{div } \mathbf{V}$ but also $V_{\gamma\delta}b_{\gamma}b_{\delta}$. The first two terms in (13.18) correspond to the usual expression for the stress tensor, so that η and ζ are the ordinary viscosity coefficients.

The tensors $\kappa_{\alpha\beta}$ and $\eta_{\alpha\beta\gamma\delta}$ must be true tensors, since they satisfy the condition of symmetry under inversion. The abandonment of this condition (for a gas of stereoisomeric material) would therefore not lead to the presence of any new terms.

Such abandonment would, however, bring about new effects, with a heat flux $q^{(V)}$ due to the velocity gradients and viscous stresses $\sigma'^{(T)}$ due to the temperature gradient. These cross-effects are described by the formulae

$$q_{\gamma}^{(V)} = c_{\gamma,\alpha\beta}V_{\alpha\beta}, \quad \sigma'_{\alpha\beta}{}^{(T)} = -a_{\alpha\beta,\gamma}\partial T/\partial x_{\gamma}, \quad (13.19)$$

† It is unnecessary to write down combinations of terms with two factors $b_{a\beta}$: since the product of two tensors $e_{\alpha\beta\gamma}$ reduces to products of tensors $\delta_{\alpha\beta}$, such combinations would reduce to those already included in (13.17).

where $c_{\gamma,\alpha\beta}$ and $a_{\alpha\beta,\gamma}$ are tensors of rank three symmetric in the pair of suffixes separated by the comma. With $\dot{x}_a$ and X_a chosen as in § 9, the kinetic coefficients γ_{ab} and γ_{ba} are $Tc_{\gamma,\alpha\beta}$ and $T^2a_{\alpha\beta,\gamma}$. Onsager's principle thus shows that in the presence of a magnetic field we must have

$$Ta_{\alpha\beta,\gamma}(B) = c_{\gamma,\alpha\beta}(-B) \quad (13.20)$$

The general form of such tensors is

$$a_{\alpha\beta,\gamma} = a_1b_{\alpha}b_{\beta}b_{\gamma} + a_2b_{\gamma}\delta_{\alpha\beta} + a_3(b_{\alpha}\delta_{\beta\gamma} + b_{\beta}\delta_{\alpha\gamma}) + a_4(b_{\alpha\gamma}b_{\beta} + b_{\beta\gamma}b_{\alpha}). \quad (13.21)$$

All the terms here are pseudotensors, and so the relations (13.19) with these coefficients are not invariant under inversion.

Let us now briefly consider transport phenomena in a gas in an electric field. We take a gas consisting of polar molecules (i.e. having a dipole moment $\mathbf{d}$) of the symmetrical-top type. In an electric field, a polar molecule is acted on by a torque $\mathbf{d} \times \mathbf{E}$, so that the transport equation contains a term

$$\dot{\mathbf{M}} \cdot \partial f / \partial \mathbf{M} = \mathbf{d} \times \mathbf{E} \cdot \partial f / \partial \mathbf{M}.$$

The direction of $\mathbf{d}$ is along the axis of the molecule and is unrelated to that of the rotational angular momentum $\mathbf{M}$. However, as a result of averaging with respect to the rapid precession of the top's axis about the direction of the constant vector $\mathbf{M}$, there remains in the above term only the component d along $\mathbf{M}$, and it becomes

$$\gamma \mathbf{M} \times \mathbf{E} \cdot \partial f / \partial \mathbf{M}, \quad (13.22)$$

where $\gamma = \sigma d/M$; the variable σ (the cosine of the angle between $\mathbf{d}$ and $\mathbf{M}$) now takes a continuous series of values from -1 to +1. The expression (13.22) differs from the corresponding term in the magnetic case only in that $\mathbf{B}$ is replaced by $\mathbf{E}$. Thus all the above transport equations and the conclusions drawn from them remain valid. †

There is, however, a difference arising from the fact that the electric field $\mathbf{E}$ is a true vector, not a pseudovector, and is unaffected by time reversal. For this reason, Onsager's principle for the thermal conductivity and viscosity tensors is here expressed by

$$\kappa_{\alpha\beta}(\mathbf{E}) = \kappa_{\beta\alpha}(\mathbf{E}), \quad \eta_{\alpha\beta\gamma\delta}(\mathbf{E}) = \eta_{\gamma\delta\alpha\beta}(\mathbf{E}), \quad (13.23)$$

instead of (13.11) and (13.16). Correspondingly, $\kappa_2 \equiv 0$ and $\eta_3 = \eta_4 \equiv 0$ in (13.10) and (13.18) (where now $\mathbf{b} = \mathbf{E}/E$). ‡ On the other hand, cross-effects are possible not only in

a stereoisomeric gas, for which (13.21) is fully valid, but also in a gas of nonstereoisomeric molecules: the expression (13.21) with $a_4 \equiv 0$ is then a true tensor.

15.1.8 §14. Phenomena in slightly rarefied gases

The dynamical equations of motion of a gas, including thermal conduction and internal friction, contain the heat flux $\mathbf{q}'$ (the dissipative part of the energy flux $\mathbf{q}$) and the viscous stress tensor $\sigma'_{\alpha\beta}$ (the dissipative part of the momentum flux $\Pi_{\alpha\beta}$). These equations acquire real meaning when $\mathbf{q}'$ and $\sigma'_{\alpha\beta}$ have been expressed in terms of the temperature and velocity gradients in the gas. However, the usual expressions linear in these gradients are just the first terms of expansions in powers of the small ratio l/L of the mean free path to the characteristic dimensions of the problem (called the Knudsen number K). If this ratio is not very small, it may be reasonable to make corrections based on the terms of the next order of smallness in l/L . Such corrections arise both in the equations of motion themselves and in the boundary conditions on these equations at the surfaces of bodies in the gas flow.

The successive terms in the expansions of the fluxes $\mathbf{q}'$ and $\sigma'_{\mu\beta}$ are expressed by means of the spatial derivatives of temperature, pressure and velocity, of various orders and raised to various powers. These terms must in principle be calculated by going to further approximations in the solution of the transport equation. The zero-order approximation corresponds to the local-equilibrium distribution function f_0 and the dynamical equations of an ideal fluid. The first-order approximation corresponds to the distribution function $f = f_0 (1 + \chi^{(1)}/T)$ considered in §§6-8, and the Navier-Stokes equations of fluid dynamics, and the equation of thermal conduction. In the second-order approximation, the distribution function is to be sought in the form

$$f = f_0 \left[1 + \frac{1}{T} \chi^{(1)} + \frac{1}{T} \chi^{(2)} \right] \quad (14.1)$$

and the transport equation is to be linearized with respect to the second-order correction $\chi^{(2)}$. The resulting equation is

$$\begin{aligned} \frac{T}{f_0} \left(\frac{\partial_0}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \right) \frac{f_0 \chi^{(1)}}{T} + \frac{T}{f_0} \frac{\partial_1}{\partial t} f_0 \\ - \frac{1}{T^2} \int w' f_{01} \left[\chi^{(1)'} \chi_1^{(1)'} - \chi^{(1)} \chi_1^{(1)} \right] d\Gamma_1 d\Gamma' d\Gamma'_1 = \frac{1}{T} I \left(\chi^{(2)} \right) \end{aligned} \quad (14.2)$$

where I is again the linear integral operator (6.5). The symbol $\partial_0/\partial t$ signifies that the time derivatives of macroscopic quantities which appear as a result of differentiating $f_0 \chi^{(1)}/T$ are to be expressed in terms of spatial derivatives by means of the zero-order equations of fluid dynamics (Euler's equations). The symbol $\partial_1/\partial t$ signifies that the time derivatives are to be eliminated by means of the first-order terms in the Navier-Stokes equations and the equation of thermal conduction (the terms containing η, ζ and κ).

We shall not write out all the numerous terms in $\mathbf{q}'$ and $\sigma'_{\alpha\beta}$ that arise in the second approximation and are called Burnett terms (D. Burnett, 1935). In many cases these terms make a contribution to the solution that is small in comparison with the corrections in the boundary conditions, to be discussed below. In such

¹† Diatomic molecules rotate in a plane perpendicular to $\mathbf{M}$: hence $\sigma = 0$ for a diatomic polar molecule. In such a case the effect of the electric field on the motion of the molecules appears in the transport equation only in the quadratic approximation with respect to the field.

‡ In a gas of non-stereoisomeric molecules. the absence of the terms in κ_2, η_3, η_4 in an electric field is also required by the condition of invariance under inversion.

cases, the inclusion of corrections in the equations themselves would be an unjustifiable exaggeration of the attainable accuracy. We shall merely consider some typical correction terms and make estimates of them for motions of various kinds.

First of all, let us note that the small parameter $K = l/L$ is related in a certain way to two parameters which describe the fluid motion, namely the Reynolds number R and the Mach number M . The Reynolds number is defined as $R \sim VL/\nu$, where V is the characteristic scale of velocity of the flow and ν the kinematic viscosity; the Mach number $M \sim V/u$, where u is the speed of sound. In a gas, the order of magnitude of the speed of sound is the same as the mean thermal speed $\bar{v}$ of the molecules, and the kinematic viscosity $\nu \sim l\bar{c}$. Hence $R \sim VL/l\bar{c}$, $M \sim V/\bar{v}$ and the Knudsen number

$$K \sim M/R. \quad (14.3)$$

Hence it is clear that the condition $K \ll 1$ for the flow to be governed by the linear equations of fluid dynamics imposes a limitation on the relative order of magnitude of R and M . Let us first consider "slow" motions, with

$$R \leq 1, \quad M \leq 1. \quad (14.4)$$

Let us take any of the Burnett terms in the viscous stress tensor containing the product of two first derivatives of the velocity, for instance

$$\rho l^2 \frac{\partial V_\alpha}{\partial x_\gamma} \frac{\partial V_\beta}{\partial x_\gamma}; \quad (14.5)$$

the coefficient ρl^2 (where ρ is the gas density) is an order-of-magnitude estimate. This term gives a contribution $\sigma^{(2)} \sim \rho l^2 V^2/L^2$ to $\sigma'_{\alpha\beta}$. The order of magnitude of the principal (Navier-Stokes) terms in the viscous stresses is

$$\sigma^{(1)} \sim \eta \partial V / \partial x \sim \rho \bar{v} V / L,$$

and the ratio

$$\sigma^{(2)} / \sigma^{(1)} \sim IV / L\bar{v} \sim l^2 R / L^2.$$

Since $R \leq 1$, we see that the terms (14.5) give a correction to the viscous stresses whose relative order is $\leq (l/L)^2$; the correction in the boundary conditions (see below) gives much larger corrections ($\sim l/L$) to the motion.

The corrections are even smaller that arise from terms of the form $\dagger$

$$\frac{\rho l^2}{m^2 \bar{v}^2} \frac{\partial T}{\partial x_\alpha} \frac{\partial T}{\partial x_\beta}, \quad (14.6)$$

if the temperature gradients are those which result from the motion itself; this follows because the characteristic temperature differences $\Delta T \sim TV^2/u^2$. If,

Terms of this kind in the viscous stresses were first discussed by Maxwell (1879).

however, temperature differences are imposed from outside (e.g. by heated bodies immersed in the gas), the Burnett terms of the form (14.6) may cause a steady motion with characteristic velocities determined by the equilibrium equation

$$\frac{\partial}{\partial x_\beta} (\sigma_{\alpha\beta}^{(1)} + \sigma_{\alpha\beta}^{(2)}) = \frac{\partial P}{\partial x_\alpha}$$

An estimate of the speed of this motion is

$$V \sim l(\Delta T)^3 / Lm\bar{v}T^2 \quad (14.7)$$

(M. N. Kogan, V. S. Galkin and O. G. Fridlender 1970). In making the estimate, it must be remembered that the Laplacian of the temperature can be expressed, by means of the thermal conduction equation $\text{div}(\kappa \nabla T) = 0$, in terms of the square of the temperature gradient, and that the motion is caused only by the non-potential part $\partial \sigma_{\alpha\beta}^{(2)} / \partial x_\beta$ of the force; the potential part is balanced by the pressure.

Similar considerations apply to the correction terms in the heat flux $\mathbf{q}'$. It is impossible to construct a second-order correction term from the derivatives of the temperature alone; the first such correction term (after $-\kappa \nabla T$) is constant $\times \nabla \Delta T$ (where Δ is the Laplacian operator), and thus is of the third order. The terms which include velocity derivatives as well as temperature derivatives, such as

$$(\rho l^2 / m) \text{div } \mathbf{V} \cdot \nabla T,$$

again give corrections of relative order l^2 / L^2 .

Let us now go on to "fast" motions, with

$$R \gg 1, \quad M \leq 1. \quad (14.8)$$

In such cases, the gas motion takes place in two regions: the main volume, where the viscous terms in the equations of motion are unimportant, and a thin boundary layer, in which the gas velocity decreases rapidly.

Let us consider, for example, the flow of gas past a flat plate, taking the direction of flow as the x -axis. The thickness δ of the boundary layer on the plate is

$$\delta \sim (x\nu/V)^{1/2} \sim (x \mid \bar{v}/V)^{1/2}$$

where x is the distance from the leading edge; see *FM*, 839. The characteristic dimension for the variation of the velocity in the x -direction is given by the coordinate x itself, and that in the y -direction, perpendicular to the plate, is given by the thickness δ of the boundary layer. Here, by the equation of continuity, $V_y \sim V_x \delta / x$. The principal term in the Navier-Stokes viscous stress tensor is

$$\sigma'_{xy} \sim \rho \nu \partial V_x / \partial y \sim \rho \bar{v} l V / \delta.$$

Among the Burnett terms in σ'_{xy} , however, there is none containing $(\partial V_x / \partial y)^2$; it is easily seen that the derivatives $\partial V_a / \partial x_\beta$ do not yield a tensor of rank two quadratic in them whose xy -component contains that square. The largest terms in $\sigma_{xy}^{(2)}$ can only be those of the form

$$\rho l^2 (\partial V_x / \partial y) \text{div } V \sim \rho l^2 V^2 / x \delta.$$

Their ratio to $\sigma_{xy}^{(1)}$ is $\sigma^{(2)} / \sigma^{(1)} \sim IV / x \bar{v} \sim (I / \delta)^2$, which is again of the second order. We shall now show that the correction terms in the conditions at gas-solid boundaries yield effects of the first order in l/L . It follows that appreciable consequences of the rarefaction of the gas occur near solid surfaces.

In non-rarefied gases, the boundary condition at the surface of a solid is that the temperatures of the gas and the solid are equal. In reality, however, this is an approximate condition, and applies only if the mean free path may be regarded as infinitesimal. When the finite mean free path at the surface of contact between a solid and a non-uniformly heated gas is taken into

account, there is a difference of temperatures, which falls to zero, in general, only when there is complete thermal equilibrium and the gas temperature is constant. †

Near a solid surface (at distances from it that are small, but not too small), the temperature gradient of the gas may be assumed constant, so that the temperature varies linearly with the distance. In the immediate neighbourhood of the wall, however, at distances $\sim l$, the temperature variation is in general more complex and its gradient is not constant. The continuous curve in Fig. 1 shows the approximate form of the gas temperature near the surface.

However, this true form of the temperature in the vicinity of the wall, which relates to distances comparable with the mean free path, is not important when considering the temperature distribution throughout the gas. As regards the temperature distribution near a solid wall, we are mainly concerned with only the straight part of the curve in Fig. 1, which extends to distances large compared with

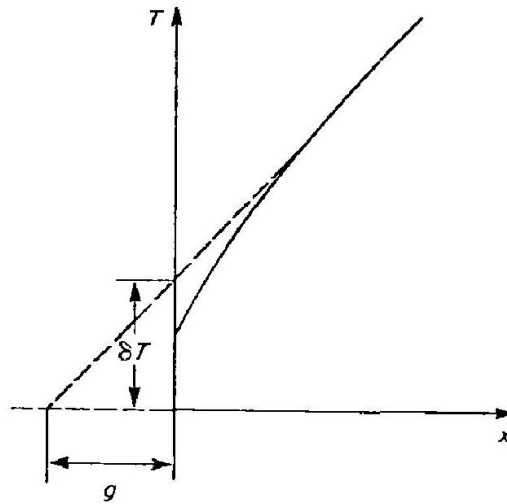


Fig. 1.

the mean free path. The equation of this straight line is determined by its slope and by the intercept on the ordinate axis. We are thus concerned not with the actual discontinuity of temperature at the wall, but with the discontinuity that results when the temperature gradient is assumed constant near the wall at all distances down to zero, as shown by the broken line in Fig. 1. Let δT denote this extrapolated temperature discontinuity, defined as the gas temperature minus the wall temperature (the latter being arbitrarily taken as zero in Fig. 1).

When the temperature gradient is zero, so is the discontinuity δT . Hence, for fairly small temperature gradients,

$$\delta T = g \partial T / \partial n; \quad (14.9)$$

the derivative is taken along the normal to the surface into the gas. The coefficient g may be called the temperature discontinuity coefficient. If the gas temperature increases into the volume ($\partial T / \partial n > 0$), we must also have $\delta T > 0$, and so the coefficient g is positive.

Similar effects occur at the boundary between a solid wall and a moving gas. Instead of "sticking" completely to the surface, a rarefied gas maintains a small but finite velocity near it, and slips along the surface. As in (14.9), we have as the speed of slip

†In referring to the temperature of a gas in regions whose size is of the order of the mean free path, it is necessary, strictly speaking, to define what is meant by temperature. In the present case it will be defined in terms of the mean energy of the molecules at a given point in the gas, the function which determines the temperature from that mean energy being taken as the same as for large volumes of gas.

$$v_0 = \xi \partial V_1 / \partial n, \quad (14.10)$$

where V_1 is the tangential component of the gas velocity near the wall. Like g , the slip coefficient ξ is positive. The same comments apply to v_0 as were made regarding the temperature discontinuity δT given by (14.9). This speed is, strictly speaking, not the actual speed of the gas at the wall itself, but the speed extrapolated on the assumption of a constant gradient $\partial V_1 / \partial n$ in the layer of gas along the wall.

The coefficients g and ξ have the dimensions of length, and are of the same order of magnitude as the mean free path:

$$g \sim l, \quad \xi \sim l. \quad (14.11)$$

The temperature discontinuity and the slip speed themselves are consequently quantities of the first order in l/L . To calculate the coefficients g and ξ , it would be necessary to solve the transport equation for the distribution function of the gas molecules near the surface. This equation would have to take account of collisions between the gas molecules and the wall, and it would therefore be necessary to know the law governing their scattering in such collisions.

If the broken line in Fig. 1 is continued to intersect the abscissa axis, it makes an intercept of length g . Thus we can say that the temperature distribution in the presence of a temperature discontinuity is the same as if there were no discontinuity but the wall were moved back a distance g . The same applies to the slip, with the wall moved back a distance ξ . Of course, with these changes only the first-order terms in g or ξ should be retained in the solutions of problems in fluid mechanics. Since taking account of the temperature or velocity discontinuities is

equivalent to moving the boundaries by distances of the order of l , the resulting corrections in the solutions are of the order of $ld/\partial x \sim l/L$, i.e. of the first order in l/L .

As well as the above corrections to the boundary conditions, there are other effects of the same order in l/L , which in many instances are more important, since some qualitatively new phenomena occur.

One of these is a movement of gas near a non-uniformly heated solid surface, called thermal slip. It bears some analogy to thermal diffusion in a mixture of gases. Just as, in the presence of a temperature gradient in a gas mixture, collisions with molecules of the other gas create a flux of particles, so in this case a flux results from collisions with the non-uniformly heated wall by molecules in a thin layer of gas at the wall, whose thickness $\sim l$.

Let V_1 denote the tangential velocity acquired by the gas near the wall as a result of thermal slip, and $\nabla_t T$ the tangential component of the temperature gradient. In the first approximation, we can suppose that V_t is proportional to $\nabla_t T$, i.e. for an isotropic surface

$$V_1 = \mu \nabla_1 T. \quad (14.12)$$

The coefficient μ must be proportional to the mean free path, since it is due to particles in a gas layer of that thickness. Then clearly, from dimensional arguments, $\mu \sim l/m\bar{v}$. Expressing the mean free path in terms of the collision cross-section and the gas density, we have $l \sim 1/N\sigma \sim T/\sigma P$, and, finally,

$$\mu \sim \frac{1}{\sigma P} \sqrt{\frac{T}{m}} \quad (14.13)$$

The sign of μ is not determined by thermodynamic requirements; experimental results show that usually $\mu > 0$.

One further first-order effect is the presence in a moving gas of an additional surface heat flux (i.e. restricted to a layer at the wall with thickness $\sim l$) q'_{surf} , proportional to the normal gradient of the tangential velocity:

$$\mathbf{q}'_{\text{surf}} = \varphi \partial \mathbf{V}_t / \partial n, \quad (14.14)$$

with the dimensions energy/length $\times$ time.

The coefficients μ and φ are connected by a relation which follows from Onsager's principle. To derive this, let us consider the "surface" part of the rate of increase of entropy $\dot{S}_{\text{surf}}$, due to the motion of the gas at the wall and taken per unit area of the wall surface. This quantity consists of two parts. The presence of the heat flux $\mathbf{q}'_{\text{surf}}$ contributes $-\mathbf{T}^{-2} \mathbf{q}'_{\text{surf}} \cdot \nabla \mathbf{T}$; cf. the corresponding expression for the rate of increase of entropy due to a bulk heat flux (FM, 49; SP2, 88). Secondly, the wall past which the gas is flowing is subject to a frictional force $-\eta_t \partial V_t / \partial n$ per unit area. The energy dissipated per unit time is equal to the work done by this force, $-\eta_t \partial V_t / \partial n \cdot V_t$, and division by T gives the contribution to the rate of increase of entropy. Thus we have

$$\dot{S}_{\text{surf}} = -\frac{1}{T^2} \mathbf{q}'_{\text{surf}} \cdot \nabla T - \frac{1}{T} \eta_t \mathbf{V}_t \cdot \frac{\partial \mathbf{V}_t}{\partial n}. \quad (14.15)$$

We now take as the X_a , in the general statement of Onsager's principle (§9), the vectors

$$\mathbf{X}_1 = \frac{1}{T^2} \nabla T, \quad \mathbf{X}_2 = \frac{1}{T} \frac{\partial \mathbf{V}_t}{\partial n}.$$

A comparison of (14.15) with the expressions (9.3) shows that the corresponding quantities $\dot{x}_a$ are the vectors

$$\dot{\mathbf{x}}_1 = \mathbf{q}'_{\text{surf}}, \quad \dot{\mathbf{x}}_2 = \eta_t \mathbf{V}_t.$$

The "equations of motion" (9.1) are the relations (14.12) and (14.14); writing these as

$$\dot{\mathbf{x}}_1 = T \varphi \mathbf{X}_2, \quad \dot{\mathbf{x}}_2 = \eta_t \mu T^2 \mathbf{X}_1,$$

we obtain the required relation

$$\varphi = T \eta_t \mu \quad (14.16)$$

(L. Waldmann 1967).

PROBLEMS

Problem 1. Two vessels containing a gas at different temperatures T_1 and T_2 are connected by a long tube. As a result of thermal slip, a pressure difference is established between the gases in the two vessels (the thermo-mechanical effect). Determine this difference.

Solution. The boundary condition at the surface of the tube for Poiseuille flow under the influence of the pressure and temperature gradients, with allowance for thermal slip, is $v = \mu dT/dx$ at $r = R$ (where R is the tube radius and the x -axis is along the length of the tube). We find in the usual way (see FM, § 17) the velocity distribution over the tube cross-section:

$$\tau = -\frac{1}{4\eta} \frac{dP}{dx} (R^2 - r^2) + \mu \frac{dT}{dx}.$$

The mass of gas flowing through a cross-section of the tube per unit time is

$$Q = -\frac{\rho \pi R^4}{8\eta} \frac{dP}{dx} + \rho \mu \pi R^2 \frac{dT}{dx}, \quad (1)$$

where ρ is the gas density. In mechanical equilibrium $Q = 0$, whence

$$\frac{dP}{dx} = \frac{8\eta\mu}{R^2} \frac{dT}{dx}$$

Integration over the whole length of the tube gives the pressure difference:

$$P_2 - P_1 = (8\eta\mu/R^2) (T_2 - T_1)$$

(if $T_2 - T_1$ is fairly small, η and μ may be taken as constants). An estimate of the order of magnitude of the effect by means of (14.13) and (8.11) gives

$$\delta P/P \sim (l^2/R^2) \delta T/T.$$

The velocity distribution over the tube cross-section when $Q = 0$ is

$$v = \mu \left(\frac{2r^2}{R^2} - 1 \right) \frac{dT}{dx}.$$

The gas flows along the walls in the direction of the temperature gradient ($v > 0$), and near the axis of the tube it flows in the opposite direction ($v < 0$).

Problem 2. Two tubes of length L and different radii ($R_1 < R_2$) are joined at their ends; the junctions are maintained at different temperatures ($T_2 > T_1$), the difference being small. As a result of thermal slip, a circulatory motion of gas is established in the tubes. Find the total gas flow through the tube cross-sections.

Solution. Dividing (1) in Problem 1 by R^4 and integrating along a closed contour formed by the two tubes, we have

$$Q = \frac{\rho\mu\pi}{L} (T_2 - T_1) (R_2^2 - R_1^2) \frac{R_1^2 R_2^3}{R_2^4 + R_1^4}$$

The flow takes place in the direction shown in Fig. 2.

Problem 3. Determine the force F acting on a sphere of radius R immersed in a gas where a constant temperature gradient $\nabla T = A$ is maintained.

Solution. The temperature distribution within the sphere is given by

$$T = \frac{3\kappa_2}{\kappa_1 + 2\kappa_2} A r \cos \theta,$$

where κ_1 and κ_2 are the thermal conductivities of the sphere and the gas; r and θ are spherical polar coordinates with the origin at the centre of the sphere and the polar axis along A (see FM, §50. Problem 2). Hence we find for the temperature gradient along the surface of the sphere

$$\frac{1}{R} \frac{\partial T}{\partial \theta} = -\frac{3\kappa_2}{\kappa_1 + 2\kappa_2} A \sin \theta.$$

The laminar flow of the gas resulting from the thermal slip is determined only by the one vector A . The corresponding solution of the Navier-Stokes equation may therefore be sought in the same form as in the problem of liquid flow past a sphere moving in it (see FM, §20):

$$v = -a \frac{A + n(A \cdot n)}{r} + b \frac{3n(A \cdot n) - A}{r^2},$$

where $n = r/r$; the additive constant in v is omitted, since we must have $v = 0$ as $r \rightarrow \infty$. The constants a and b are found from the conditions

$$v_r = 0, \quad v_\theta = (\mu/R) \partial T / \partial \theta \quad \text{at} \quad r = R;$$

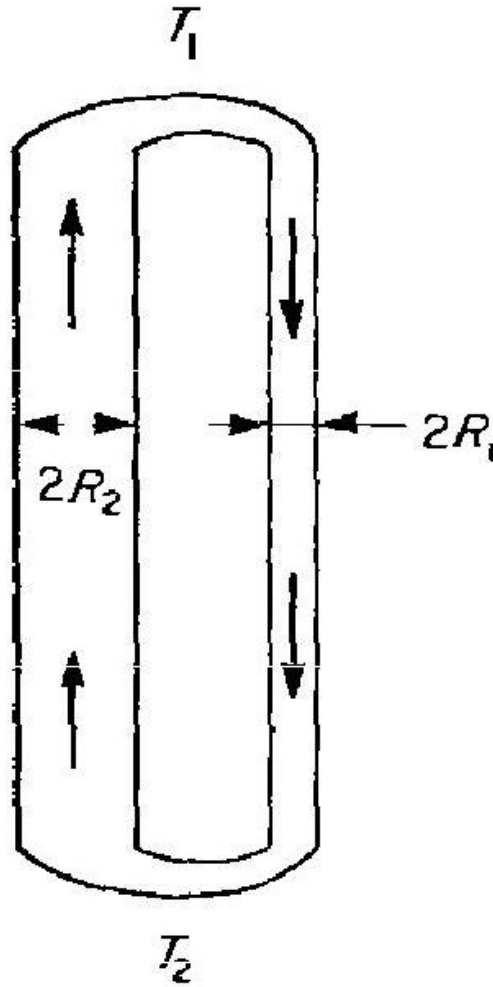


Fig. 2.

their values are

$$a = b/R^2 = -3\kappa_2 R\mu/2(\kappa_1 + 2\kappa_2)$$

The force on the sphere is

$$F = 8\pi a\eta A : -12\pi\eta\mu R\kappa_2 \nabla T / (\kappa_1 + 2\kappa_2).$$

For the surface effects considered in these Problems to be in fact small compared with the volume effects, the temperature must vary only slightly over the radius of the tube in Problems 1 and 2, and over the radius of the sphere in Problem 3.

Problem 4. Two vessels joined by a long tube contain gas at the same temperature and at pressures P_I and P_v . Determine the heat flux between the vessels which accompanies Poiseuille flow in the tube (the mechano-caloric effect).

Solution. According to (14.14) and (14.16), the heat flux along the walls of the tube is

$$q' = 2\pi R q'_{\text{wrt}} = 2\pi R T \eta \mu dV/dr.$$

From the condition of mechanical equilibrium of the liquid in a steady flow, we have

$$2\pi R \eta dV/dr = \pi R^2 dP/dx = \pi R^2 (P_2 - P_1)/L$$

Hence, finally.

$$q' = \pi R' T_\mu (P_2 - P_1) / L$$

15.1.9 §15. Phenomena in highly rarefied gases

The phenomena discussed in § 14 are no more than correction effects associated with higher powers of the ratio of the mean free path l to the characteristic dimensions L of the problem; this ratio was supposed still small. If the gas is so rarefied, or the dimensions L are so small, that $l/L \geq 1$, the equations of fluid dynamics become completely inapplicable, even with corrected boundary conditions.

In the general case of any l/L , it is in principle necessary to solve the transport equation with specified boundary conditions on solid surfaces in contact with the gas. These conditions depend on the interaction between the gas molecules and the surface, and relate the distribution function for particles incident on the surface to that for particles leaving it. If this interaction amounts to scattering of molecules without chemical transformation, ionization, or absorption by the surface, it is described by the probability $w(\Gamma', \Gamma) d\Gamma'$ that a molecule with given values of Γ strikes the surface and is reflected into a given range $d\Gamma'$; the function w is normalized by the condition

$$\int w(\Gamma', \Gamma) d\Gamma' = 1 \quad (15.1)$$

With this function, the boundary condition for the distribution function $f(\Gamma)$ becomes

$$\int_{n.v < 0} w(\Gamma', \Gamma) n.v f(\Gamma) d\Gamma = -n.v' f(\Gamma') \quad \text{with } n.v' > 0 \quad (15.2)$$

The integral on the left multiplied by $d\Gamma'$ is the number of molecules incident on unit area of the surface per unit time and scattered into a given range $d\Gamma'$; the integration is taken over the range of values of Γ that corresponds to molecules moving towards the surface ($\mathbf{n}$ being a unit vector along the outward normal to the surface of the body). The expression on the right of (15.2) is the number of molecules leaving unit area of the surface per unit time. The values of Γ' on each side of the equation must correspond to molecules moving away from the surface.

In equilibrium, when the temperature of the gas is the same as that of the body, the distribution function must have the Boltzmann form for both the incident and the reflected particles. Hence it follows that the function w must satisfy identically the equation

$$\int_{n.v > 0} w(\Gamma', \Gamma) n.v e^{-\epsilon/T_1} d\Gamma = -n.v' e^{-\epsilon/T_1}, \quad (15.3)$$

which is obtained by substituting in (15.2) $f(\Gamma) = \text{constant} \times \exp(-\epsilon/T_1)$, with T_1 the temperature of the body.

In the general formulation described, the solution of the problem of highly rarefied gas flow is of course very difficult. The problem can, however, be more simply stated in the limiting case where the gas is so highly rarefied that $l/L \gg 1$.

A large class of such problems relate to situations where a considerable mass of gas occupies a volume large compared with the dimensions L of solid bodies immersed in the gas, and also compared with the mean free path l . Then collisions of molecules with solid surfaces are comparatively rare, and are unimportant relative to collisions between molecules. If the gas itself is in equilibrium, with temperature T_2 , we can assume under these conditions that the equilibrium is not destroyed by the immersed body. There may be any temperature difference between the gas and the body. The same is true of the macroscopic velocities.

Let $\tau = T_2 - T_1$ be the difference between the temperature of the gas and that of some part of the surface of the body, and V the velocity of the gas relative to the body. For non-zero τ and $\mathbf{V}$ there is heat exchange between the gas and the body, and a force is exerted on the body by the gas. Let q be the dissipative heat flux from the gas to the body, and let $\mathbf{F} - P\mathbf{n}$ denote the force per unit area acting along the outward normal $\mathbf{n}$ at each point on the surface of the body. The second term here is the ordinary gas pressure; $\mathbf{F}$ is the additional force under consideration, due to τ and V . The quantities q and F are functions of τ and V , and are zero when these are zero.

If τ and V are sufficiently small (τ with respect to the temperatures themselves of the gas and the solid, V with respect to the thermal velocity of the gas molecules), then q and F can be expanded in powers of τ and V as far as the linear terms. Let F_n and V_n denote the components of F and V along the normal $\mathbf{n}$; F_t and u_t their tangential parts, which are vectors having two independent components. Then the expansions mentioned are

$$q = \alpha\tau + \beta V_n, \quad F_n = \gamma\tau + \delta V_n, \quad F_t = \theta V_t, \quad (15.4)$$

Where $\alpha, \beta, \gamma, \delta, \theta$ are constants (or rather functions of temperature and pressure), characteristic of any given gas and solid material. The "scalar" quantities q and F_n cannot, by symmetry, contain terms linear in the vector V_t . For the same reason, the expansion of the vector F_t does not contain terms linear in the "scalars" τ and V_n .

The quantities α, δ and θ are positive. For example, if the gas temperature exceeds the body temperature ($\tau > 0$), heat will pass from the gas to the body, and the corresponding part of the flux q will be positive; hence $\alpha > 0$. Next, the forces F_n and F_t due to the gas flow relative to the body must be in the same direction as V_n and V_t ; hence $\delta > 0$ and $\theta > 0$. The sign of the coefficients β and γ does not follow from general thermodynamic considerations, although in practice they seem to be usually positive. There is a simple relation between them which is a consequence of the symmetry of the kinetic coefficients.

To derive this relation, we calculate the time derivative of the total entropy of the system comprising the gas and the body in it. A quantity of heat qdf is gained by the body from the gas in unit time through each surface element df . The increment in the entropy S_1 of the body is

$$\dot{S}_1 = \oint (q/T_1) df$$

where the integration is over the whole surface of the body.

To calculate the increase in the entropy of the gas, we take coordinates such that the gas is at rest at the position of the body; then the velocity of each point on the surface is $-V$. In order to demonstrate the required relation, we shall suppose that the shape of the body may vary during its motion; then the velocities $\mathbf{V}$ of various points on its surface are arbitrary independent variables. From the thermodynamic relation $dE = TdS - Pd\mathcal{V}$, the change in the entropy of the gas per unit time is

$$\dot{S}_2 = (\dot{E}_2 + P_2\dot{V}_2)/T_2,$$

quantities with the suffix 2 relating to the gas. The derivative $\dot{E}_2$ is, by the conservation of the total energy of the system, minus the change in the energy of the body. This change is made up of the quantity of heat $\oint qdf$ and the work $\oint \phi - V \cdot (F - P\mathbf{n})df$ done on the body. Thus we find as the change in the energy of the gas

$$\dot{E}_2 = \oint (-q + F_n V_n + F_t \cdot V_t - P_2 V_n) df$$

The change in the gas volume is equal to minus the change in the volume of the body:

$$\dot{v}_2 = \oint V_n df.$$

The change in the entropy of the gas is therefore

$$\dot{S}_2 = \frac{1}{T_2} \oint (-q + F_n V_n + \mathbf{F}_1 \cdot \mathbf{V}_1) df$$

Adding the derivatives of S_1 and S_2 , and then putting (for small τ) $T_1 \approx T_2 \equiv T$, we finally have as the rate of change of the total entropy of the system

$$\dot{S} = \int \left[\frac{q\tau}{T^2} + \frac{F_n V_n}{T} + \frac{\mathbf{F}_1 \cdot \mathbf{V}_1}{T} \right] df \quad (15.5)$$

We take as the quantities $\dot{x}_1, \dot{x}_2, \dot{x}_3, \dot{x}_4$ in the general formulation of Onsager's principle (§9) respectively q, F_n and the two components of the vector F_t at any given point on the surface of the body. To find the corresponding quantities X_a , we compare (15.5) with the general expression (9.3) for the rate of change of the entropy, and see that X_1, X_2, X_3, X_4 are respectively $-\tau/T^2, -V_n/T$ and the two components of the vector $-\mathbf{V}_t/T$ at the same point. The kinetic coefficients (i.e. those in the relations (9.1)) are

$$\begin{aligned} \gamma_{11} &= \alpha T^2, & \gamma_{22} &= \delta T, & \gamma_{33} &= \gamma_{44} = \theta T \\ \gamma_{12} &= \beta T, & \gamma_{21} &= \gamma T^2 \end{aligned}$$

The symmetry $\gamma_{12} = \gamma_{21}$ thus gives the required relation:

$$\beta = \gamma T \quad (15.6)$$

Moreover, from the condition that the quadratic form (9.3) is positive ($\dot{S} > 0$), we have the inequalities $\alpha, \beta, \theta > 0$ already mentioned, and also the inequality

$$T\alpha\delta > \beta^2$$

To calculate the coefficients in (15.4), we need to know the specific form of the law of scattering of gas molecules by the surface of the body, expressed by the function $w(\Gamma', \Gamma)$ defined above. As an example, let us derive a formula which in principle allows α to be calculated.

The energy flux from the gas to the body is given by the integral

$$q = \int (\epsilon - \epsilon') |v_x| w'(\Gamma', \Gamma) f(\Gamma) d\Gamma d\Gamma' \quad (15.7)$$

taken over the ranges $v_x < 0, v'_x > 0$, since an amount of energy $\epsilon - \epsilon'$ is transferred to the wall at each collision of a molecule with the wall.

Let us transform this expression by means of the principle of detailed balancing, according to which, in equilibrium, the number of transitions $\Gamma \rightarrow \Gamma'$ in the scattering of molecules by the wall is equal to the number of transitions $\Gamma^\top \rightarrow \Gamma'^\top$. This means that

$$w(\Gamma', \Gamma) |v_x| \exp\left(\frac{\mu - \epsilon}{T_1}\right) = w(\Gamma^\top, \Gamma'^\top) |v'_x| \exp\left(\frac{\mu - \epsilon'}{T_1}\right); \quad (15.8)$$

in equilibrium, the temperatures of the gas and the wall are equal.

In (15.7) we rename the variables of integration: $\Gamma \rightarrow \Gamma^\top, \Gamma' \rightarrow \Gamma'^\top$. Half the sum of the two resulting expressions gives

$$q = \frac{1}{2} \int (\epsilon - \epsilon') e^{\mu/T_2} \left[w(\Gamma', \Gamma) |v_x| e^{-\epsilon'/T_2} - w(\Gamma^T, \Gamma'^T) |v'_x| e^{-\epsilon'/T_2} \right] d\Gamma d\Gamma'$$

Lastly, substituting $w(\Gamma^\top, \Gamma^\top)$ from (15.8) and then expanding the integrand in powers of the small difference $\tau = T_2 - T_1$, we find that $q = \alpha\tau$, where

$$\alpha = \frac{1}{2T^2} \int (\epsilon - \epsilon')^2 |v_x| w(\Gamma', \Gamma) \exp\left(\frac{\mu - \epsilon(\Gamma)}{T}\right) d\Gamma d\Gamma' \quad (v_x < 0, \quad v'_x > 0) \quad (15.9)$$

the subscript is omitted from the temperature $T_1 \approx T_2$.

The distribution function for molecules scattered from the wall depends on the specific nature of their interaction with the wall. There is said to be complete accommodation if the molecules reflected from each surface element of the body have (whatever the magnitude and direction of their velocity before the impact) the same distribution as in a beam leaving a small aperture in a vessel containing gas at a temperature equal to that of the body. Thus, with complete accommodation, the gas scattered by the wall reaches thermal equilibrium with it. The values of the coefficients in (15.4) may reasonably be compared with those for complete accommodation. In particular, energy exchange between the gas molecules and the solid wall is usually described by the accommodation coefficient, defined as the ratio α/α_0 , where α_0 corresponds to complete accommodation. In actual cases, complete accommodation is not usually achieved, and the accommodation coefficient is less than unity.

The fact that α_0 is in fact the greatest possible value is easily shown as follows. Let us view the entropy S in (15.5) somewhat differently: not as the total entropy of the body and the gas together, but as the entropy of the body together with just the gas molecules that reach the surface of the body in a time Δt . For this system, reflection of the molecules with complete accommodation denotes a transition to a state of complete equilibrium, and its entropy therefore takes the maximum possible value. Accordingly, the change of entropy $\Delta S = \dot{S}\Delta t$ accompanying this transition will also be a maximum. † That is, for complete accommodation the quadratic form (9.3) must be a maximum for any given values of the X_a (i.e. of τ , V_n and V_1). Denoting the corresponding values of the coefficients γ_{ab} by the suffix zero, we can write this condition as

$$\frac{\alpha_0 - \alpha}{T^2} \tau^2 + \frac{2(\beta_0 - \beta)}{T^2} \tau V_n + \frac{\delta_0 - \delta}{T} V_n^2 + \frac{\theta_0 - \theta}{T} V_1^2 > 0$$

From this, there follow the inequalities

$$\left. \begin{aligned} \alpha_0 &> \alpha, & \delta_0 &> \delta, & \theta_0 &> 0, \\ T(\alpha_0 - \alpha)(\delta_0 - \delta) &> (\beta_0 - \beta)^2. \end{aligned} \right\} \quad (15.10)$$

Let us consider the outflow of a highly rarefied gas from a small orifice with linear dimensions L . In the limit $l/L \gg 1$, this process is a very simple one. The molecules will leave the vessel independently, forming a molecular beam in which each molecule moves at the speed with which it reached the orifice. The number of molecules leaving the orifice per unit time is equal to the number of collisions per unit time between molecules and a surface with area s equal to that of the orifice. The number of collisions per unit wall area is $P/(2\pi mT)^{1/2}$, where P is the gas pressure and m the mass of a molecule; see SP 1, §39. Thus the mass of gas leaving per unit time is

[†]Important points in this argument are that the body (which acts as a "heat reservoir") may be regarded as in equilibrium throughout the process, and that the entropy of an ideal gas depends only on the distribution law for its molecules. not on the law of interaction between them.

$$Q = sP\sqrt{(m/2\pi T)} \quad (15.11)$$

If two vessels containing gas are joined by an orifice, for $l \ll$ in mechanical equilibrium the pressures P_1 and P_2 of the gases in the two vessels are equal, whatever their temperatures T_1 and T_2 . If $l \geq l$, the condition of mechanical equilibrium is that the numbers of molecules passing through the orifice in each direction are equal. By (15.11), this gives

$$P_1/\sqrt{T_1} = P_2/\sqrt{T_2} \quad (15.12)$$

Thus the pressures of rarefied gases in two communicating vessels will be different, and proportional to the square roots of the temperatures (the Knudsen effect).

So far we have discussed phenomena in a large mass of highly rarefied gas in equilibrium by itself. Let us now briefly consider phenomena of another type, where the gas itself is not in equilibrium, for instance in heat transfer between two solid plates heated to different temperatures and immersed in a rarefied gas, the distance between them being small compared with the mean free path. Molecules moving in the space between the plates undergo almost no collisions with one another; after reflection from one plate, they move freely until they strike the other. When scattered by the hotter plate, the molecules gain some energy from it, and then transfer some of their energy to the cooler plate when they reach it. The heat transfer mechanism in this case thus differs essentially from that of ordinary conduction in a non-rarefied gas. It may be described by a heat transfer coefficient κ , defined (by analogy with the ordinary conductivity) so that

$$q = \kappa (T_2 - T_1) / L, \quad (15.13)$$

where q is the amount of heat transferred per unit area of the plates per unit time, T_1 and T_2 the temperatures of the plates and L the distance between them. The value of κ may be estimated in order of magnitude by means of (7.10). Since collisions between molecules are now replaced by collisions of molecules with the plates, the mean free path l must be replaced by the distance l between the plates. Thus

$$\kappa \sim L\bar{v}N \sim PL/\sqrt{(mT)} \quad (15.14)$$

The heat transfer coefficient in a highly rarefied gas is proportional to the pressure, in contrast to the conductivity of a non-rarefied gas, which is independent of the pressure. It should be emphasized, however, that κ here is not a property of the gas alone: it depends also on the specific conditions of the problem, namely the distance L between the plates.

A similar effect is the "viscosity" of a highly rarefied gas, which occurs, for example, in the relative motion of two plates in it (again with $L \ll l$). The viscosity coefficient η must here be defined so that

$$F = \eta V / L, \quad (15.15)$$

where F is the friction force per unit area on the moving plate and V the relative speed of the plates. Replacing the mean free path l in (8.11) by the distance L , we have

$$\eta \sim m\bar{v}NL \sim LP\sqrt{(m/T)}, \quad (15.16)$$

i.e the viscosity of a rarefied gas is likewise proportional to the pressure.

PROBLEMS

Problem 1. At the initial instant $I = 0$, a gas occupies the half-space $x < 0$. Neglecting collisions, determine the density distribution at subsequent instants.

Solution. If collisions are neglected, the transport equation reduces to

$$\partial f / \partial l + v \cdot \partial f / \partial r = 0,$$

the general solution being $f = f(r - vl, v)$. With the given initial condition, we have

$$f_0 = f_0(v) \text{ for } v_x > x/l, f = 0 \text{ for } v_x < x/l,$$

where f_0 is the Maxwellian distribution. The gas density is

$$\begin{aligned} N(1, x) &= \int_{-x}^x \int_{-x}^x \int_{x/t}^x f(v) m^3 dv_x dv_y dv_z \\ &= \frac{1}{2} N_0 \left[1 - \Phi \left(\frac{x}{l} \sqrt{\frac{m}{2T}} \right) \right] \end{aligned}$$

where

$$\Phi(\xi) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\xi e^{-y^2} dy$$

and N_0 is the initial density. Since collisions have been neglected, these formulae are actually valid only in the range $|x| \ll l$.

Problem 2. Determine the force acting on a sphere of radius R moving in a rarefied gas with velocity V .

Solution. The total resistance to the motion of the sphere is

$$\mathbf{F} = -(4\pi/3)VR^2(\delta + 2\theta).$$

Problem 3. Determine the speed of movement. in a rarefied gas, of a light plane disc whose sides are heated to different temperatures T_1 and T_2 .

Solution. The speed V of the disc (in the direction perpendicular to its plane) is found from the condition that the total forces acting on the two sides of zero. It moves with the cooler side forwards at a speed given (when $T_2 > T_1$) by

$$V = \gamma (T_2 - T_1) / 2\delta$$

Problem 4. Calculate the value α_0 of the coefficient α corresponding to complete accommodation. SOLUTION. The amount of energy contributed per unit time by molecules colliding with unit area of the surface of a body is $\int f_2 v_x \epsilon d\Gamma$, where f_2 is the Boltzmann distribution function with the temperature T_2 of the gas, ϵ is the energy of a molecule and the x -axis is perpendicular to the surface. The amount of energy carried away by the same molecules is found (in the case of complete accommodation) simply by replacing T_2 by the temperature T_1 of the body. The heat flux is

$$q = \int (f_2 - f_1) \epsilon v_x d\Gamma$$

the integration over v_x being from 0 to x . The energy of the molecule is written as $\epsilon = \epsilon_{\text{int}} + \frac{1}{2}mv^2$, where ϵ_{int} is the internal energy. The value given by calculation for each integral is

$$\int f \in v_x d\Gamma = v (\bar{\epsilon}_{\text{unt}} + 2T) = v \left(\bar{\epsilon} + \frac{1}{2}T \right) = vT \left(c_v + \frac{1}{2} \right)$$

where $\bar{\epsilon} = c_v T$ is the mean energy of a molecule and $\nu = P/V(2\pi mT)$ the number of molecules striking unit area of the surface per unit time. The heat q is equal to the difference between the energies of the molecules arriving and leaving in equal numbers, i.e. for the same ν . The value obtained for the coefficient in $q = \alpha (T_2 - T_1)$ is

$$\alpha_0 = \frac{P}{\sqrt{(2\pi mT)}} \left(c_v + \frac{1}{2} \right);$$

the difference $T_2 - T_1$ is assumed small, and so we put $T_1 \approx T_2 \equiv T$.

Problem 5. The same as Problem 4, but for the coefficients β and γ .

Solution. The normal component of the momentum contributed per unit time by the molecules striking unit area of the surface of the body is half the gas pressure. Expressing the pressure in terms of ν , we have

$$\frac{1}{2}P = \nu \sqrt{\left(\frac{1}{2} \pi m T \right)}$$

The difference between the values of this quantity at the temperature T_1 and T_2 for the same ν gives the additional force F_n caused by the temperature difference. If $T_2 - T_1$ is small, we find

$$\gamma_0 = P/4T.$$

For β , in accordance with (15.6), $\beta_0 = P/4$.

Problem 6. The same as Problem 4, but for the coefficients δ and θ .

Solution. We take coordinates in which the body is at rest and the gas moves with velocity V . the x -axis being normal to the surface and the xy -plane containing v . The distribution function in these coordinates is

$$f = \text{constant} \times \exp \left\{ -\frac{\epsilon_{mi}}{T} - \frac{m}{2T} [(v_x - V_x)^2 + (v_y - V_y)^2 + v_z^2] \right\}.$$

With complete accommodation, the reflected molecules have a distribution function with $V = 0$: T is assumed to be zero.

To calculate the tangential force F_s , we put $V_x = 0$. The total y -component of momentum contributed by molecules reaching the surface of the body is

$$\int m v_y v_x f d\Gamma = m V_y \int v_x f d\Gamma = m V_y v_y$$

the integration over v_x being always from 0 to x . The y -component of momentum carried away by these molecules is zero. Thus $F_y = m\nu V_y$, and so

$$\theta_0 = \nu m = P \sqrt{(m/2\pi T)}$$

Now let $V_x \neq 0, V_y = 0$. As far as the first order in V_x we have

$$f = f_0 + V_x (m v_x / T) f_0$$

where f_0 is the distribution function with $V = 0$. The number of molecules colliding with unit area of the surface per unit time is

$$v = \int f v_x d\Gamma = \frac{P}{\sqrt{(2\pi mT)}} + \frac{P V_x}{2T}$$

The x -component of momentum contributed by these molecules is

$$\int m t_x^2 f d\Gamma = \frac{1}{2}P + PV_x \sqrt{(2m/\pi T)}$$

The molecules reflected from the bounding surface have the distribution function with $V_1 = 0$, normalized so that the integral $\int f v_x d\Gamma$ is equal to the number ν of incident molecules determined above. The x -component of momentum carried away by these molecules is

$$-\frac{1}{2}N\sqrt{(2\pi mT)} = -\frac{1}{2}P - \frac{1}{2}PV_x\sqrt{(\pi m/2T)}$$

The normal force additional to the pressure is $F_x = \delta_0 V_x$, where

$$\delta_0 = P\sqrt{\frac{m}{2\pi T}}\left(2 + \frac{1}{2}\pi\right) = \frac{1}{2}P_0(4 + \pi).$$

Problem 7. Assuming complete accommodation, determine the temperature of a plate moving in its own plane with speed V in a rarefied gas.

Solution. Proceeding as in Problem 4, we have for the energy contributed $\nu(c_2 T_2 + \frac{1}{2}T_2 + \frac{1}{2}mV^2)$, and for that carried away $\nu T_1(c_1 + \frac{1}{2})$. Equating these gives

$$T_1 - T_2 = mV^2/(2c_r + 1).$$

Problem 8. Determine the quantity of gas flowing per unit time through the cross-section of a cylindrical tube of radius R as a result of pressure and temperature gradients. The gas is so rarefied that the mean free path $l > R$.† There is complete accommodation in collisions of molecules with the tube walls.

Solution. The speed distribution of the molecules reflected from the wall with complete accommodation is $v_x d^3p$, where f is the Maxwellian distribution function and the x -axis is perpendicular to the surface. If ϑ is the angle between the velocity of a molecule and the x -axis, we find that the distribution of the reflected molecules with respect to their directions of motion (whatever their speed) is

$$(\nu/\pi) \cos \vartheta d\vartheta,$$

this function being normalized so as to give ν on integration over all solid angles on one side of the plane.

We take the z -axis along the axis of the tube, and the origin in the cross-section considered. Molecules last reflected from various parts of the tube surface pass through this cross-section. Of those scattered by an element df of the wall surface at a distance z , the ones that pass through the cross-section concerned are those reflected in directions lying in the solid angle subtended by this cross-section at the relevant point on the surface of the tube; their number is thus $df \cdot \nu \int \cos \vartheta d\vartheta/\pi$, with integration over the angle range mentioned.

This integral is evidently the same for all points lying at the same distance from the cross-section concerned. The total number of molecules passing through this cross-section per unit time is therefore obtained by replacing df by the annular surface element $2\pi R dz$ and integrating along the whole length of the tube; multiplying also by the mass m of a molecule, we get the mass flow rate of the gas through a cross-section of the tube:

$$Q = 2mR \int v \left(\int \cos \vartheta d\vartheta \right) dz$$

The number ν , being a function of pressure and temperature, varies along the tube. If the lengthwise gradients of pressure and temperature are not too great, we can write

$$v(z) = v(0) + z[dv/dz]_{z=0}$$

† Gas flow of this type is called free-molecular flow.

The integral containing $\nu(0)$ is evidently zero, and so

$$Q = 2\pi R[dv/dz]_{z=0} \iint z \cos \vartheta d\varphi dz$$

To carry out the integration, we take coordinates r and φ in the plane of the cross-section considered, r being the distance of a variable point A^* from a fixed point O on the circumference of the cross-section, and φ the angle between OA^* and the radius of the cross-section (Fig. 3). A molecule

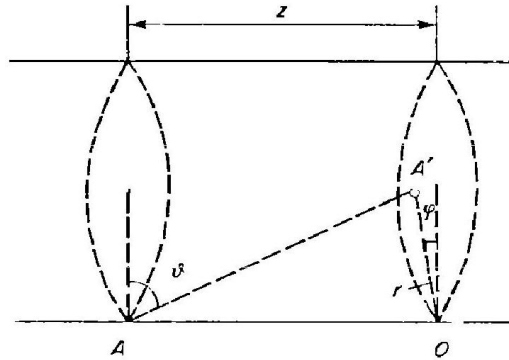


Fig. 3.

reflected from the wall at a point A on the same generator as O and then passing through A' must have a velocity at an angle ϑ to the normal to the tube surface at A such that

$$\cos \vartheta = \frac{r \cos \varphi}{\sqrt{(r^2 + z^2)}}.$$

The solid-angle element may be written

$$d\omega = \frac{r dr d\varphi}{r^2 + z^2} \frac{z}{\sqrt{(r^2 + z^2)}},$$

the area $r dr d\varphi$ is projected on the plane perpendicular to the line AA' , and the result is divided by the square of the length of that line. The integration is carried over the region $-\frac{1}{2}\pi \leq \varphi \leq \frac{1}{2}\pi$, $0 \leq r \leq 2R \cos \varphi$, $-\infty \leq z \leq \infty$, and the result is

$$Q = (8\pi R^3/3) dv/dz.$$

Finally, putting $\nu = P/\sqrt{(2\pi mT)}$, we obtain

$$Q = \frac{4\pi R^3}{3L} \sqrt{(2\pi m)} \left(\frac{P_2}{\sqrt{T_2}} - \frac{P_1}{\sqrt{T_1}} \right),$$

where the difference in parentheses is between the values of PN/V over a length L of the tube; the replacement of the derivative by the difference is allowable because Q , and therefore this derivative, are constant along the tube.

Problem 9. Assuming complete accommodation, find the frictional force between two solid planes at a distance apart $L \ll l$, moving at relative speed V and having temperatures T_1 and T_2 .

Solution. Let plane 1 (at temperature $\mathbf{T}_1$) be at rest, and plane 2 be moving at speed V in the x -direction, and let the y -direction be from plane 1 to plane 2. Molecules with speeds $v_y > 0$ and $v_y < 0$ are reflected from planes 1 and 2 respectively; with complete accommodation, their distribution functions are

$$f = \frac{2N_1}{(2\pi m T_1)^{3/2}} \exp\left(-\frac{mv^2}{2T_1}\right) \text{ for } v_y > 0,$$

$$f = \frac{2N_2}{(2\pi m T_2)^{3/2}} \exp\left(-\frac{m(v-V)^2}{2T_2}\right) \text{ for } v_y < 0,$$

where N_1 and N_2 are the corresponding number densities of particles; the total density $N = N_1 + N_2$. The condition of zero total flux in the y -direction gives

$$N_1 V T_1 = N_2 V T_2$$

A pressure $P = N_1 T_1 + N_2 T_2$ acts on each plane, and the frictional force per unit area is

$$\begin{aligned} F_2 = -F_1 &= mV \int_{v_1 > 0} v_y f d^3p \\ &= V N_2 \sqrt{(2m T_2 / \pi)} \\ &= V N \sqrt{(2m / \pi)} (T_1 T_2)^{1/2} / (T_1^{1/2} + T_2^{1/2}) \end{aligned}$$

If $\mathbf{T}_1 = \mathbf{T}_2 \equiv \mathbf{T}$, then

$$F_2 = -F_1 = V P V (m / 2\pi T)$$

in agreement with (15.15) and (15.16).

Problem 10. Assuming complete accommodation, determine the heat transfer coefficient κ between two plates with almost equal temperatures T_1 and T_2 .

Solution. With complete accommodation, the molecules incident on plate 1 have an equilibrium distribution with temperature T_2 . The energy flux from plate 1 to plate 2 is therefore $q = \alpha_0 (T_2 - T_1)$. Taking α_0 from Problem 4 and determining κ from (15.13), we find

$$\kappa = \alpha_0 L = \frac{PL}{\sqrt{(2\pi m T)}} \left(c_v + \frac{1}{2}\right)$$

in accordance with the estimate (15.14).

Problem 11. Determine the gas density on the axis behind a circular disc of radius $R \ll I$, moving in a gas with a velocity $-V$ much greater than the mean thermal speed v_T of the atoms.

Solution. When $V \gg V_T$, the particles reflected from the rear surface of the disc are unimportant (except for a narrow region near that surface; see below). The problem is a matter of the "shadow" of the disc in the incident flow. In coordinates for which the disc is at rest (and the gas is moving with velocity V), in the absence of the disc the distribution function would be

$$f_0(v) = \frac{N_0}{(2\pi m T)^{\pi/2}} \exp\left\{-\frac{m(v-V)^2}{2T}\right\}.$$

In the presence of the disc, the number density of gas particles on the z -axis (Fig. 4) is

$$N(z) = 2\pi \int_0^x \int_{0_0}^{\pi} f_0(v) p^2 \sin \vartheta d\vartheta dp$$

where ϑ is the angle between v and the z -axis, and ϑ_0 the angle subtended by the radius of the disc at the point of observation on the z -axis ($\tan \vartheta_0 = R/z$; particles with $\vartheta < \vartheta_0$ are cut off by the disc). Integration, with the condition $V \gg v$, gives

$$\begin{aligned} N(z) &= \frac{N_0}{V} \left(\frac{m}{2\pi T} \right)^{1/2} \int_0^x \exp \left\{ -\frac{m}{2T} [(v - V \cos \vartheta_0)^2 + V^2 \sin^2 \vartheta_0] \right\} v dv \\ &\approx N_0 \cos \vartheta_0 \exp \left\{ -\frac{mV^2}{2T} \sin^2 \vartheta_0 \right\} \\ &= N_0 \frac{z}{\sqrt{(R^2 + z^2)}} \exp \left\{ -\frac{mV^2}{2T} \frac{R^2}{R^2 + z^2} \right\} \end{aligned}$$

where N_0 is the gas density far from the disc. The integration over dp is carried out with the assumption that $\cos \vartheta_0 \gg v_1/V$; it can be shown that this inequality is also the condition for particles reflected from the rear face to be negligible.

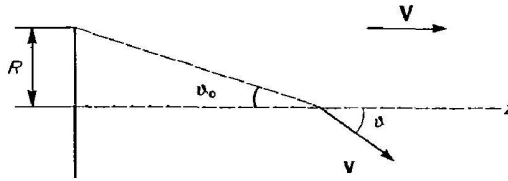


Fig. 4.

15.1.10 §16. Dynamical derivation of the transport equation

Although the derivation of the transport equation given in §3 is satisfactory from the physical point of view, there is considerable interest in ascertaining how the equation can be derived analytically from the mathematical formalism of the theory, i.e. from the equations of motion of the gas particles. Such a derivation has been given by N. N. Bogolyubov (1946). The value of the method lies also in the fact that it affords a regular procedure for deriving in principle not only the Boltzmann equation but also the corrections to it, i.e. the terms of higher orders in the small "gaseousness parameter"-the ratio $(d/\bar{r})^3$, where d is the molecular dimension (range of action of molecular forces) and $\bar{r}$ the mean distance between the molecules. The derivation given below relates to a monatomic gas in purely classical terms, i.e. on the assumption that not only free motion but also collisions of the gas particles are describable by classical mechanics.

We start from Liouville's theorem regarding the distribution function for the gas as a whole, as a system of $\mathcal{N}$ particles. This function, in $6\sqrt{\mathcal{N}}$ -dimensional phase space, is denoted by $f^{(\tau^\top)}(t, \tau_1, \tau_2, \dots, \tau_{\mathcal{N}})$, where τ_a is the set of coordinates and momentum components for the a th particle: $\tau_a = (\mathbf{r}_a, \mathbf{p}_a)$. The function is assumed normalized to unity:

$$\int f^{(4)}(t, \tau_1, \tau_2, \dots, \tau_{\mathcal{N}}) d\tau_1 \dots d\tau_{\mathcal{N}} = 1, \quad d\tau_a = d^3x_a d^3p_a$$

The "one-particle" distribution function which appears in the Boltzmann equation is obtained by integrating $f^{(*)}$ over all $d\tau_a$ but one:

$$f^{(1)}(t, \tau_1) = \int f^{(i)} d\tau_2 \dots d\tau_{\mathcal{N}}; \quad (16.1)$$

the function $f^{(1)}$ also is normalized to unity, and we shall retain the notation f (without superscript) for the distribution function normalized to the total number of particles: $f = \mathcal{N}f^{(1)}$.

It has been noted in SP 1, §3, that Liouville's theorem arises as a consequence of the equation of continuity in phase space which must be satisfied by the distribution function for a closed system:

$$\frac{\partial f^{(A)}}{\partial t} + \sum_{a=1}^A \left\{ \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_a} (f^{(N)} \dot{\mathbf{r}}_a) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_a} (f^{(S)} \dot{\mathbf{p}}_a) \right\} = 0. \quad (16.2)$$

With Hamilton's equations

$$\dot{\mathbf{r}}_a = \partial H / \partial \mathbf{p}_a, \quad \dot{\mathbf{p}}_a = -\partial H / \partial \mathbf{r}_a, \quad (16.3)$$

this gives

$$\frac{\partial f^{(N)}}{\partial t} + \sum_{a=1}^N \left\{ \frac{\partial f^{(N)}}{\partial \mathbf{r}_a} \cdot \dot{\mathbf{r}}_a + \frac{\partial f^{(N)}}{\partial \mathbf{p}_a} \cdot \dot{\mathbf{p}}_a \right\} = \frac{df^{(N)}}{dt} = 0 \quad (16.4)$$

where the $\dot{\mathbf{r}}_a \equiv \mathbf{v}_a$ and $\dot{\mathbf{p}}_a$ are assumed to be expressed in terms of $\tau_1, \tau_2, \dots$ by means of equations (16.3). Equation (16.4) expresses the content of Liouville's theorem.

We write the Hamiltonian function for a monatomic gas in the form

$$H = \sum_{a \leq N} \frac{p_a^2}{2m} + \sum_{b \leq a \leq i} U(|\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b|) \quad (16.5)$$

Here it is assumed that there is no external field, and that the interaction between the gas particles reduces to the sum of their pair interactions. † Equation (16.4) then becomes

$$\frac{\partial f^{(N)}}{\partial t} + \sum_{a=1}^N \left\{ \frac{\partial f^{(N)}}{\partial \mathbf{r}_a} \cdot \mathbf{v}_a - \frac{\partial f^{(N)}}{\partial \mathbf{p}_a} \cdot \sum_{b < a} \frac{\partial U_{ab}}{\partial \mathbf{r}_a} \right\} = 0 \quad (16.6)$$

where $U_{ab}(a \neq b)$ denotes $U(|\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b|)$.

Let us now integrate this equation over $d\tau_2 \dots d\tau_N$. Then, of all the terms in the sum in (16.6), only those remain which involve differentiation with respect to $\mathbf{p}_1$ or $\mathbf{r}_1$; the integrals of the other terms are transformed into integrals over infinite surfaces in momentum or coordinate space, and are zero. Thus we have

$$\frac{\partial f^{(1)}(t, \tau_1)}{\partial t} + v_1 \cdot \frac{\partial f^{(1)}(t, \tau_1)}{\partial \mathbf{r}_1} = \mathcal{N} \int \frac{\partial U_{12}}{\partial \mathbf{r}_1} \cdot \frac{\partial f^{(2)}(t, \tau_1, \tau_2)}{\partial \mathbf{p}_1} d\tau_2, \quad (16.7)$$

where $f^{(2)}$ is the two-particle distribution function normalized to unity, i.e. the integral

$$f^{(2)}(t, \tau_1, \tau_2) = \int f^{(1)} d\tau_3 \dots d\tau_N \quad (16.8)$$

the factor $\mathcal{N}$ in (16.7) takes account of terms that differ only in the nomenclature of the variables of integration; strictly speaking, the number of such terms is $\mathcal{N} - 1$, but this is very large and may be replaced by $\mathcal{N}$.

Similarly, integrating (16.6) over $d\tau_3 \dots d\tau_N$, we obtain

$$\begin{aligned} \frac{\partial f^{(2)}}{\partial t} + \mathbf{v}_1 \cdot \frac{\partial f^{(2)}}{\partial \mathbf{r}_1} + \mathbf{v}_2 \cdot \frac{\partial f^{(2)}}{\partial \mathbf{r}_2} - \frac{\partial U_{12}}{\partial \mathbf{r}_1} \cdot \frac{\partial f^{(2)}}{\partial \mathbf{p}_1} - \frac{\partial U_{12}}{\partial \mathbf{r}_2} \cdot \frac{\partial f^{(2)}}{\partial \mathbf{p}_2} \\ = \mathcal{N} \int \left[\frac{\partial f^{(3)}}{\partial \mathbf{p}_1} \cdot \frac{\partial U_{13}}{\partial \mathbf{r}_1} + \frac{\partial f^{(3)}}{\partial \mathbf{p}_2} \cdot \frac{\partial U_{23}}{\partial \mathbf{r}_2} \right] d\tau_3 \end{aligned} \quad (16.9)$$

where $f^{(3)}(t, \tau_1, \tau_2, \tau_3)$ is the three-particle distribution function.

† The latter assumption constitutes a model, but it does not affect the result in the first approximation (which corresponds to the Boltzmann equation): in this approximation, only pair collisions of particles occur, in which other (non-pair) interactions play no part.

Continuing in this way, we should obtain an almost infinite ($\mathcal{N}$ being very large) sequence of equations, each expressing $f^{(n)}$ in terms of $f^{(n+1)}$. All these equations are exact in the sense that no assumption has been made in them as to the rarefaction of the gas. To obtain a closed set of equations, the series has to be terminated in some way by making use of the condition that the gas is rarefied. In particular, the first approximation in this method corresponds to terminating the series already at the first equation, (16.7), in which the two-particle function $f^{(2)}$ is expressed approximately in terms of $f^{(1)}$. This is done by using the rarefaction of the gas, by means of equation (16.9).

Returning to this equation, we shall first of all show that the integral on the right-hand side is small. The function $U(r)$ is noticeably different from zero only within the range of action of the forces, i.e. when $r \leq d$. Hence, in both parts of the integral in (16.9), the integrations over coordinates are in practice only over the region $|\mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_1| \leq d$ or $|\mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_2| \leq d$, i.e. over a volume $\sim d^3$. Since in an integration over the whole volume of the gas, $\mathcal{V} \sim \mathcal{N}\bar{r}^3$, we should have $\int f^{(3)} d\tau_3 = f^{(2)}$, we obtain the estimate

$$\sim \int \frac{\partial f^{(3)}}{\partial p_1} \cdot \frac{\partial U_{13}}{\partial r_1} d\tau_3 \sim \frac{\partial U(r)}{\partial r} \frac{\partial f^{(2)}}{\partial p_1} \frac{d^3}{\bar{r}^3}$$

From this we see that the right-hand side of (16.9) is small in the ratio $(d/\bar{r})^3$ relative to the terms containing $\partial U/\partial r$ on the left-hand side, and may therefore be neglected. The terms on the left constitute the total derivative $df^{(2)}/dt$, in which $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2$ are regarded as functions of time which satisfy the equations of motion (16.3) with the two-body Hamiltonian

$$H = \frac{\mathbf{p}_1^2}{2m} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2m} + U(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|).$$

Thus we have

$$df^{(2)}(t, \tau_1, \tau_2)/dt = 0. \quad (16.10)$$

So far, all the transformations of the equations have been purely mechanical ones. To derive the transport equation, of course, some statistical assumption is also necessary. This may be formulated as the statistical independence of each pair of colliding particles, which has essentially been assumed in deriving the transport equation in §3 (where the collision probability was written in the form (2.1), proportional to the product ff_1). In the method under consideration, this statement acts as the initial condition for the differential equation (16.10). It creates the asymmetry in relation to the two directions of time, and as a result the irreversible transport equation is derived from the equations of mechanics invariant under time reversal. The correlation between the positions and the momenta of the gas particles arises only as a result of their collisions and extends to distances $\sim d$. Thus the assumption of the statistical independence of colliding particles is also the source of the fundamental limitations as regards the distances and time intervals allowed by the transport equation, already discussed in §3.

Let t_0 be some instant before the collision, when the two particles are still far apart ($|\mathbf{r}_{10} - \mathbf{r}_{20}| \gg d$, where the suffix zero denotes the values of quantities at that instant). The statistical independence of colliding particles means that at such an instant t_0 the two-particle distribution function is the product of two one-particle functions $f^{(1)}$. Hence the integration of (16.10) from t_0 to t gives

$$f^{(2)}(t, \tau_1, \tau_2) = f^{(1)}(t_0, \tau_{10}) f^{(1)}(t_0, \tau_{20}) \quad (16.11)$$

Here $\tau_{10} = (\mathbf{r}_{10}, \mathbf{p}_{10})$ and $\tau_{20} = (\mathbf{r}_{20}, \mathbf{p}_{20})$ are to be understood as those values of the coordinates and momenta which the particles must have at the instant t_0 in order to acquire the necessary values $\tau_1 = (\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1)$ and $\tau_2 = (\mathbf{r}_2, \mathbf{p}_2)$ at the instant t ; in this sense, τ_{10} and τ_{20} are functions of τ_1, τ_2 and $t - t_0$ (only $\mathbf{r}_{10}$ and $\mathbf{r}_{20}$ depend on $t - t_0$; the values of $\mathbf{p}_{10}$ and $\mathbf{p}_{20}$ relate to particles moving freely before the collision, and do not depend on the choice of $t - t_0$).

Let us now return to (16.7), which is to become the transport equation. The left-hand side already has the required form; we shall now be concerned with the integral on the right, which is ultimately to become the collision integral in the Boltzmann equation. Substituting in this integral $f^{(2)}$ from (16.11) and changing on both sides from $f^{(1)}$ to $f = \mathcal{N}\{^{(1)}\}$, we write

$$\frac{\partial f(t, \tau_1)}{\partial t} + v_1 \cdot \frac{\partial f(t, \tau_1)}{\partial \mathbf{r}_1} = C(f),$$

where

$$C(f) = \int \frac{\partial U_{12}}{\partial \mathbf{r}_1} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1} \{f(t_0, \tau_{10}) f(t_0, \tau_{20})\} d\tau_2 \quad (16.12)$$

Only the range $|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1| \sim d$, i.e. the region in which the collision occurs, is important in the integral (16.12). In this range, however, we can neglect (in the first approximation, which is being considered here) the coordinate dependence of f , which varies appreciably only over distances L , the characteristic dimensions of the problem, which are certainly large in comparison with d . The final form of the collision integral will therefore be unaltered if, in order to simplify somewhat the analysis and the formulae, we take the case of spatial homogeneity, i.e. assume that f is independent of the coordinates. It may be noted immediately that the explicit time dependence through $\mathbf{r}_{10}(t)$ and $\mathbf{r}_{20}(t)$ then disappears from the functions $f(t_0, \mathbf{p}_{10})$ and $f(t_0, \mathbf{p}_{20})$.

We can transform the integrand in (16.12) by using the fact that the expression in the braces is an integral of the motion (and appeared as such in (16.11)); independently of this, it is obvious that $\mathbf{p}_{10}$ and $\mathbf{p}_{20}$, the values of the momenta at a fixed instant t_0 , are by definition integrals of the motion. Using also the fact mentioned above that they contain no explicit dependence on the time t , we have

$$\begin{aligned} & \frac{d}{dt} f(t_0, \mathbf{p}_{10}) f(t_0, \mathbf{p}_{20}) \\ &= \left(v_1 \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_1} + v_2 \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_2} - \frac{\partial U_{12}}{\partial \mathbf{r}_1} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1} - \frac{\partial U_{12}}{\partial \mathbf{r}_2} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_2} \right) f(t_0, \mathbf{p}_{10}) f(t_0, \mathbf{p}_{20}) = 0 \end{aligned} \quad (16.13)$$

From this, we express the derivative with respect to $\mathbf{p}_1$ in terms of those with respect to $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$ and $\mathbf{p}_2$, and substitute in (16.12). The term containing the derivative a/d $\mathbf{p}_2$ disappears when the integral is transformed to a surface integral in momentum space. We then find

$$C(f(t, \mathbf{p}_1)) = \int \mathbf{v}_{\text{rel}} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \{f(t_0, \mathbf{p}_{10}) f(t_0, \mathbf{p}_{20})\} d^3x d^3\mathbf{p}_2 \quad (16.14)$$

with the relative velocity of the particles $\mathbf{v}_{\text{rel}} = \mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2$, taking into account the fact that $\mathbf{p}_{10}$ and $\mathbf{p}_{20}$ (and therefore the whole expression in the braces) depend on $\mathbf{r}_1$ and $\mathbf{r}_2$ only through the difference $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$. Replacing $\mathbf{r} = (x, y, z)$ by cylindrical polar coordinates z, ρ, φ with the z -axis along $\mathbf{v}_{\text{rel}}$, we have $\mathbf{v}_{\text{rel}} \cdot \partial / \partial \mathbf{r} = v_{\text{rel}} \partial / \partial z$, and the integration over dz converts (16.14) into †

$$C(f(t, \mathbf{p}_1)) = \int [f(t_0, \mathbf{p}_{10}) f(t_0, \mathbf{p}_{20})]_{z=-x}^{z=\infty} v_{\text{ref}} \rho d\rho d\varphi d^3 p_2 \quad (16.15)$$

We now use the fact that $\mathbf{p}_{10}$ and $\mathbf{p}_{20}$ are the initial (at time t_0) momenta of particles which at the final instant t have momenta $\mathbf{p}_1$ and $\mathbf{p}_2$. If at the final instant $z = z_1 - z_2 = -\infty$, it is clear that at the initial instant the particles were "even further" apart, i.e. there has been no collision. In this case, therefore, the initial and final momenta are the same:

$$\mathbf{p}_{10} = \mathbf{p}_1, \quad \mathbf{p}_{20} = \mathbf{p}_2 \quad \text{for} \quad z = -\infty$$

If $z = +\infty$, $\mathbf{p}_{10}$ and $\mathbf{p}_{20}$ act as the initial momenta for the collision which gives the particles momenta $\mathbf{p}_1$ and $\mathbf{p}_2$; in this case, we write

$$\mathbf{p}_{10} = \mathbf{p}'_1(\rho), \quad \mathbf{p}_{20} = \mathbf{p}'_2(\rho) \quad \text{for} \quad z = +\infty.$$

These are functions of the coordinate ρ , which acts as the impact parameter for the collision. The product

$$\rho d\rho d\varphi = d\sigma$$

is the classical collision cross-section.

Lastly, it is to be noted that the explicit dependence of the functions $f(t_0, \mathbf{p}_{10})$ and $f(t_0, \mathbf{p}_{20})$ on t_0 can be replaced in this approximation by a similar dependence on t . The validity of (16.11) requires only the inequality $t - t_0 \gg d/\bar{v}$ to be satisfied: at the instant t_0 , the distance between the particles must be large in comparison with the range d of the forces. The difference $t - t_0$, however, may be so chosen as to satisfy also the condition $t - t_0 \ll l/\bar{v}$, where l is the mean free path; the ratio $l/\bar{v}$, which is the mean free time, is just the characteristic quantity that determines the

periods of possible time variation of the distribution function. The change in this function during the time $t - t_0$ will then be relatively small and may be neglected.

From these considerations, we obtain the final form of the integral (16.15):

$$C(f(t, \mathbf{p}_1)) = \int \{f(t, \mathbf{p}'_1) f(t, \mathbf{p}'_2) - f(t, \mathbf{p}_1) f(t, \mathbf{p}_2)\} v_{\text{rel}} d\sigma d^3 p_2 \quad (16.16)$$

which agrees with the Boltzmann collision integral (3.9).

15.1.11 §17. The transport equation including three-particle collisions

To find the first correction terms to the Boltzmann equation, we must go back to the points in § 16 where terms were neglected, and increase the accuracy of the calculations by one further order of magnitude relative to the gaseousness parameter. First of all, terms containing the triple correlation $f^{(3)}$ were omitted in (16.9), and three-atom collisions were thereby left out of consideration. Moreover, in converting the collision integral (16.12) to the final form (16.16), we neglected the variation of the distribution function over distances $\sim d$ and times $\sim d/\bar{v}$; the pair collisions were thereby regarded as "local" events occurring at a single point. We must now take both these corrections into account: three-particle collisions, and the "non-localness" of pair collisions.

^{1†} The limits $z = \pm\infty$ are to be understood as distances large compared with d . but small compared with the mean free path l : if they were taken literally, the result would be zero, since $f \equiv 0$ outside the region occupied by the gas. This has arisen because in going from (16.12) to (16.14) we used equation (16.13), which is valid only until the particles in question undergo their next collisions.

In the first approximation, the sequence of equations was terminated at the second equation, which relates $f^{(2)}$ and $f^{(3)}$. In the second approximation, we must go to the third equation, which relates $f^{(3)}$ and $f^{(4)}$, omitting the $f^{(4)}$ terms in the same way as the $f^{(3)}$ terms were omitted in (16.9) in the first approximation. The equation then becomes

$$df^{(3)}(t, \tau_1, \tau_2, \tau_3)/dt = 0 \quad (17.1)$$

corresponding to the earlier equation (16.10) for $f^{(2)}$; the variables τ_1, τ_2, τ_3 in (17.1) are assumed to vary with time according to the equations of motion in the three-body problem; a pair interaction between particles is again assumed. † With the statistical independence of the particles before the collision, the solution of (17.1) is

$$f^{(3)}(t, \tau_1, \tau_2, \tau_3) = f^{(1)}(t_0, \tau_{10}) f^{(1)}(t_0, \tau_{20}) f^{(1)}(t_0, \tau_{30}) \quad (17.2)$$

The quantities t_0, τ_{a0} ($a = 1, 2, 3$) here have the same sense as in (16.11); $\tau_{a0} = \tau_{a0}(t, t_0, \tau_1, \tau_2, \tau_3)$ are the values of the coordinates and momenta which the particles must have at the instant t_0 in order to reach the specified points τ_1, τ_2, τ_3 in phase space at the instant t . The only difference from (16.11) is that $\tau_{a0} = (\mathbf{r}_{a0}, \mathbf{p}_{a0})$ are now

the initial coordinates and momenta in a three-body problem, which will be supposed solved in principle. †

To write down and transform the subsequent formulae, it is convenient to define an operator $\hat{S}_{123}$ whose effect on a function of the variables τ_1, τ_2, τ_3 (pertaining to the three particles in the three-body problem) is to change these variables according to

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{r}_a &\rightarrow \bar{\mathbf{r}}_a = \mathbf{r}_{a0} + (\mathbf{p}_{a0}/m)(i - \hat{t}_0) \\ \mathbf{p}_a &\rightarrow \bar{\mathbf{p}}_a = \mathbf{p}_{a0} \end{aligned} \right\} \quad (17.3)$$

Similarly, the operator $\hat{S}_{12}$ will make this change in functions of the variables τ_1 and τ_2 which pertain to the two particles in the two-body problem. An important property of the transformation (17.3) is that for times $t - t_0 \gg d/\bar{v}$ it is no longer time-dependent: for such $t - t_0$, the particles are far apart and move freely with constant velocities $\mathbf{v}_{a0} = \mathbf{p}_{a0}/m$, the values of the $\mathbf{r}_{a0}$ vary with time as constant $-\mathbf{v}_{a0}(t - t_0)$, and the time dependence in (17.3) disappears. Moreover, if there were no interaction between the particles, the transformation (17.3) would reduce to an identity: in motion that is free at all times, the right-hand sides are identically equal to the left-hand sides. For the same reason, if one of the particles, say particle 1, does not interact with particles 2 and 3, then $\hat{S}_{123} \equiv \hat{S}_{23}$; the operators $\hat{S}_{12}$ and $\hat{S}_{13}$ then reduce to unity. It is therefore evident that the operator

$$\hat{G}_{123} = \hat{S}_{123} - \hat{S}_{12} - \hat{S}_{13} - \hat{S}_{23} + 2 \quad (17.4)$$

is zero if any one of the three particles does not interact with the other two, i.e. this operator separates from the functions the part that is due to the interaction of all three particles (whereas the three-body problem also includes, as particular cases, pair interactions, with the third particle in free motion).

With the operator $\hat{S}_{123}$, (17.2) becomes

$$f^{(3)}(t, \tau_1, \tau_2, \tau_3) = \hat{S}_{123} \bar{f}^{(1)}(t, t_0, \tau_1) \bar{f}^{(1)}(t, t_0, \tau_2) \bar{f}^{(1)}(t, t_0, \tau_3) \quad (17.5)$$

where

¹† In contrast to the first approximation (cf. the first footnote to § 16), this assumption now places some limitations on the generality of the treatment, since in three-body collisions there could be an effect of three-body interactions, i.e. terms of the form $U(r_2 - r_1, r_3 - r_1)$ in the Hamiltonian, which do not reduce to pair interactions.

$$\tilde{f}^{(1)}(t, t_0, \tau) = f^{(11)}(t_0, \mathbf{r} - \mathbf{p}(t - t_0)/m, \mathbf{p}) \quad (17.6)$$

the shift of the argument $\mathbf{r}$ in $f^{(1)}$ compensates that due to the operator $\hat{S}_{123}$. The two-particle distribution $f^{(2)}$ is obtained by integrating the function $f^{(3)}$ with respect to the variables τ_3 , and integration with respect to τ_2 and τ_3 gives the distribution function ⁽¹⁾ :

$$f^{(2)}(t, \tau_1, \tau_2) = \int f^{(3)}(t, \tau_1, \tau_2, \tau_3) d\tau_3 \quad (17.7)$$

$$f^{(1)}(t, \tau_1) = \int f^{(3)}(t, \tau_1, \tau_2, \tau_3) d\tau_2 d\tau_3 \quad (17.8)$$

The object of the subsequent calculation is to eliminate $\bar{f}^{(1)}$ from these two equations, with $f^{(3)}$ from (17.5), and so express $f^{(2)}$ with the necessary accuracy in terms of $f^{(1)}$. Then, substituting this expression in (16.7), which is itself exact, we arrive at the transport equation sought.

To carry out this programme, we first of all transform the integral (17.8), expressing the operator $\hat{S}_{123}$ in (17.5) in terms of $\hat{G}_{123}$ by (17.4). With the equations

$$\begin{aligned} \int \bar{f}^{(1)}(t, t_0, \tau) d\tau &= \int f^{(1)}(t_0, \tau) d\tau = 1 \\ \int \hat{S}_{12} \tilde{f}^{(1)}(t, t_0, \tau_1) \tilde{f}^{(1)}(t, t_0, \tau_2) d\tau_1 d\tau_2 &= 1 \end{aligned}$$

which are obvious from the conservation of the total number of molecules, we obtain

$$\begin{aligned} f^{(1)}(t, \tau_1) &= \bar{f}^{(1)}(t, t_0, \tau_1) + 2 \int \left\{ (\hat{S}_{12} - 1) \tilde{f}^{(1)}(t, t_0, \tau_1) \tilde{f}^{(1)}(t, t_0, \tau_2) \right\} d\tau_2 \\ &+ \int \left\{ \hat{G}_{123} \tilde{f}^{(1)}(t, t_0, \tau_1) \tilde{f}^{(1)}(t, t_0, \tau_2) \tilde{f}^{(1)}(t, t_0, \tau_3) \right\} d\tau_2 d\tau_3 \end{aligned} \quad (17.9)$$

This equation can be solved for $\bar{f}^{(1)}$ by successive approximation, bearing in mind that $\hat{S}_{12} - 1$ is of the first order of smallness, and $\hat{G}_{123}$ of the second order; compare the estimate of the right-hand side of (16.9). In the zero-order approximation, $\bar{f}^{(1)}(t, t_0, \tau_1) = f^{(1)}(t, \tau_1)$. In the next two approximations,

$$\begin{aligned} \tilde{f}^{(1)}(t, t_0, \tau_1) &= f^{(1)}(t, \tau_1) - 2 \int \left\{ (\hat{S}_{12} - 1) f^{(1)}(t, \tau_1) f^{(1)}(t, \tau_2) \right\} d\tau_2 \\ &- \int \left\{ \hat{G}_{123} - 4 (\hat{S}_{12} - 1) (\hat{S}_{13} + \hat{S}_{23} - 2) f^{(1)}(t, \tau_1) f^{(1)}(t, \tau_2) f^{(1)}(t, \tau_3) \right\} d\tau_2 d\tau_3 \end{aligned}$$

It now remains to substitute this expression in (17.5) and then in (17.7), retaining only the terms that are not above the second order of smallness, $\sim (\hat{S}_{12} - 1)^2$ or $\sim \hat{G}_{123}$. The final result is

$$f^{(2)}(t, \tau_1, \tau_2) = \hat{S}_{12} f^{(1)}(t, \tau_1) f^{(1)}(t, \tau_2) + \int \left\{ \hat{R}_{12} f^{(1)}(t, \tau_1) f^{(1)}(t, \tau_2) f^{(1)}(t, \tau_3) \right\} d\tau_3 \quad (17.10)$$

¹In practice, of course, an analytical solution of the three-body problem can be given only in a few cases such as that of hard spheres.

where

$$\hat{R}_{123} = \hat{S}_{123} - \hat{S}_{12}\hat{S}_{13} - \hat{S}_{12}\hat{S}_{23} + \hat{S}_{12} \quad (17.11)$$

It should be emphasized that the order of the S operators in their products is significant. The operator $\hat{S}_{12}\hat{S}_{23}$, for example, first changes the variables $\tau_1, \tau_2, \tau_3 \rightarrow \tau_1, \tilde{\tau}_2(\tau_2, \tau_3), \tilde{\tau}_3(\tau_2, \tau_3)$, the functions $\tilde{\tau}_{2,3}(\tau_2, \tau_3)$ being determined from the equations of motion of the interacting particles 2 and 3; the variables τ_1, τ_2, τ_3 are then subjected to the transformation $\tau_1, \tau_2, \tau_3 \rightarrow \tau_1(\tau_1, \tau_2), \tau_2(\tau_1, \tau_2), \tau_3$, where now the functions $\tilde{\tau}_{1,2}(\tau_1, \tau_2)$ are determined by the problem of the motion of a pair of interacting particles 1 and 2.

Next, substituting (17.10) in (16.7) and changing everywhere from the functions $f^{(1)}$ to $f = \mathcal{N}\{^{(1)}\}$, we have the transport equation in the form $\dagger$

$$\frac{\partial f(t, \tau_1)}{\partial t} + v_1 \cdot \frac{\partial f(t, \tau_1)}{\partial \mathbf{r}_1} = C^{(2)}(f) + C^{(3)}(f) \quad (17.12)$$

where

$$C^{(2)}(f(t, \tau_1)) = \int \frac{\partial U_{12}}{\partial \mathbf{r}_1} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1} \left\{ \hat{S}_{12} f(t, \tau_1) f(t, \tau_2) \right\} d\tau_2 \quad (17.13)$$

$$C^{(3)}(f(t, \tau_1)) = \frac{1}{\mathcal{N}} \int \frac{\partial U_{12}}{\partial \mathbf{r}_1} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1} \left\{ \hat{R}_{123} f(t, \tau_1) f(t, \tau_2) f(t, \tau_3) \right\} d\tau_2 d\tau_3 \quad (17.14)$$

The first of these is the pair collision integral, and the second is the three-body collision integral. Let us consider their structure in more detail.

In both integrals, the integrands involve functions f taken at different points in space. In the pair collision integral, the effect of this "non-localness" is to be separated as a correction to the ordinary (Boltzmann) integral. To do so, we expand the functions f , which vary only slowly (over distances $\sim d$), in powers of $\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1$.

Since these functions in the integrand are preceded by the operator $\hat{S}_{12}$, let us first consider the quantities $\hat{S}_{12}\mathbf{r}_1$ and $\hat{S}_{12}\mathbf{r}_2$ into which that operator transforms the variables $\mathbf{r}_1$ and $\mathbf{r}_2$. The centre of mass $\frac{1}{2}(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)$ of the two particles moves uniformly in the two-body problem; the operator S_{12} therefore leaves this sum unchanged. We can thus write

$$\begin{aligned} \hat{S}_{12}\mathbf{r}_1 &= \hat{S}_{12} \left(\frac{1}{2}(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2) + \frac{1}{2}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \right) \\ &= \mathbf{r}_1 + \frac{1}{2}(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1) - \frac{1}{2}\hat{S}_{12}(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1) \\ \hat{S}_{12}\mathbf{r}_2 &= \mathbf{r}_1 + \frac{1}{2}(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1) + \frac{1}{2}\hat{S}_{12}(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1). \end{aligned}$$

Now, expanding the functions

$$\begin{aligned} \hat{S}_{12}f(t, \mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1) &= f\left(t, \hat{S}_{12}\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_{10}\right) \\ \hat{S}_{12}f(t, \mathbf{r}_2, \mathbf{p}_2) &= f\left(t, \hat{S}_{12}\mathbf{r}_2, \mathbf{p}_{20}\right) \end{aligned}$$

in powers of $\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1$ as far as the first-order terms, we obtain

$$C^{(2)}(f) = C_0^{(2)}(f) + C_1^{(2)}(f), \quad (17.15)$$

where

$$C_0^{(2)}(f(t, \mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1)) = \int \frac{\partial U_{12}}{\partial \mathbf{r}_1} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1} \{f(t, \mathbf{r}_1, \mathbf{p}_{10}) f(t, \mathbf{r}_2, \mathbf{p}_{20})\} d\tau_2 \quad (17.16)$$

$$C_1^{(2)}(f(t, \mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1)) = \frac{1}{2} \int \frac{\partial U_{12}}{\partial \mathbf{r}_1} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1} \left\{ (\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1) \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_1} f(t, \mathbf{r}_1, \mathbf{p}_{10}) f(t, \mathbf{r}_2, \mathbf{p}_{20}) \right. \\ \left. + \left[f(t, \mathbf{r}_1, \mathbf{p}_{10}) \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_1} f(t, \mathbf{r}_1, \mathbf{p}_{20}) - f(t, \mathbf{r}_1, \mathbf{p}_{20}) \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_1} f(t, \mathbf{r}_1, \mathbf{p}_{10}) \right] \cdot \hat{S}_{12} (\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1) \right\} d\tau_2 \quad (17.17)$$

the differentiation with respect to $\mathbf{r}_1$ is taken at constant $\mathbf{p}_{10}$ or $\mathbf{p}_{20}$.

The integral (17.16) is the same as (16.12); [†] it has been shown in § 16 how this integral is reducible to the ordinary Boltzmann form by carrying out one of the three integrations with respect to spatial coordinates.

Let us now consider the three-body collision integral (17.14). To include "nonlocalness" in this integral would be to go beyond the assumed accuracy, since the integral itself is a small correction. Hence, in the arguments of the three functions f , all the radius vectors $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3$ are to be taken as the same $\mathbf{r}_1$, and moreover we must assume that the operator $\hat{R}_{123}$ does not act on these variables at all: [‡]

$$C^{(3)}(f(t, \mathbf{r}_1, p_1)) = \frac{1}{N^*} \int \frac{\partial U_{12}}{\partial \mathbf{r}_1} \cdot \frac{\partial}{\partial p_1} \left\{ \hat{R}_{123} f(t, \mathbf{r}_1, p_1) f(t, \mathbf{r}_1, p_2) f(t, \mathbf{r}_1, p_3) \right\} d\tau_2 d\tau_3. \quad (17.18)$$

Let us next examine in somewhat more detail the structure of the operator $\hat{R}_{123}$, in order to elucidate the nature of the collision processes covered by the integral (17.18).

First of all, the operator $\hat{R}_{123}$, like $\hat{G}_{123}$ in (17.4), is zero if any one of the three particles does not interact with the others. However, the processes for which $\hat{R}_{123} \neq 0$ include not only three-body collisions in the literal sense, but also combinations of several pair collisions.

In genuine three-body collisions, three particles come simultaneously into the "sphere of interaction", as shown diagrammatically in Fig. 5a. But the operator $\hat{R}_{123}$ is also different from zero for "three-body interactions" which consist of three successive pair collisions, one pair colliding twice; Fig. 5b shows diagrammatically an example of such a process, for which $\hat{S}_{13} = 1$, so that $\hat{R}_{123} = \hat{S}_{123} - \hat{S}_{12}\hat{S}_{23}$.[§] Moreover, the operator $\hat{R}_{123}$ also takes account of cases where one (or more) of the three collisions is "imaginary", i.e. occurs only if the influence of one of the real collisions on the path of the particles is ignored. An example is shown in Fig. 5c,

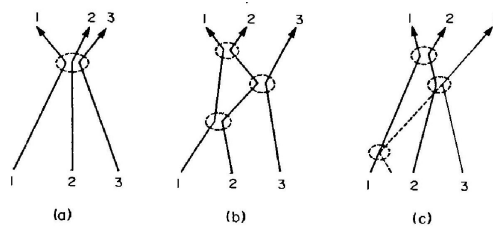


Fig. 5.

til differs in that t_0 is replaced by t in the arguments of the functions f , but the right-hand equation (I6. I3) is then still valid, since the dependences on r_1, r_2, p_1, p_2 enter only through p_{10} and p_{20} , which are integrals of the motion,

^{†‡} The way to derive the correction terms to the Boltzmann equation was pointed out by N. N. Bogolyubov (1946). These terms were first brought to their final form by M. S. Green (1956).

‡ It should be stressed, to avoid misunderstanding, that these simplifications do not imply that the integrand no longer depends on r_2 and r_3 ; a dependence on these variables still occurs through the S operators. which transform the momenta $\mathbf{p}_a$ into functions $\bar{\mathbf{p}}_a(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3)$.

§ The operator $\hat{R}_{123}$, unlike G_{123} , is zero for a sequence of two collisions. For instance, in a process consisting of collisions 2 – 3 and $I - 2$, we should have $\hat{S}_{123} = \hat{S}_{12}\hat{S}_{23}$, $\hat{S}_{13} = I$, and so $R_{123} = 0$.

where the collision 1-3 would occur only if the path of particle 3 were unaffected by its collision with particle 2; † for this process, $\hat{S}_{123} = \hat{S}_{12}\hat{S}_{23}$ but $\hat{S}_{13} \neq 1$, so that $\hat{R}_{123} = -\hat{S}_{12}\hat{S}_{13} + \hat{S}_{12}$.

In the same kind of way as the integral $C_0^{(2)}$ was transformed in § 16, one of the six integrations with respect to coordinates in the three-body collision integral can be carried out; the interaction potential U_{12} then no longer appears explicitly in the formulae. ‡

15.1.12 §18. The virial expansion of the kinetic coefficients

It was shown in §§7 and 8 that the thermal conductivity and the viscosity were independent of the gas density (or pressure) because only pair collisions of molecules were taken into account. For such collisions, the collision frequency, i.e. the number of collisions undergone by a given molecule per unit time, is proportional to the density N , the mean free path $l \propto 1/N$, and since η and κ are proportional to Nl they are independent of N . The values η_0 and κ_0 thus obtained are, of course, only the first terms in expansions of these quantities in powers of the density, called virial expansions. In the next approximation, there is already a density dependence in the form

$$\kappa = \kappa_0 (1 + \alpha N d^3), \quad \eta = \eta_0 (1 + \beta N d^3), \quad (18.1)$$

where d is a parameter of the order of molecular dimensions, and α and β are dimensionless constants. These first corrections have a twofold origin reflected in the correction terms $C^{(3)}$ and $C_1^{(2)}$ in the transport equation. Three-body collisions (whose frequency is proportional to N^2) decrease the mean free path. The nonlocalness of the pair collisions makes possible a transfer of momentum and energy across a certain surface without its actually being crossed by the colliding particles: the particles approach to a distance $\sim d$ and then separate, remaining on opposite sides of the surface. This effect increases the momentum and energy fluxes.

The solution of the problem of thermal conduction or viscosity with the more accurate transport equation (17.12) is to be based on the procedure as already described in §§6-8. We seek the distribution function in the form $f = f_0(1 + \chi/T)$, where f_0 is the local-equilibrium function, and $\chi/T \sim l/L$ is a small correction. The three-body collision integral $C^{(3)}$, like $C_0^{(2)}$, is zero for the function f_0 . We must therefore retain the χ term in it, and so the integral $C^{(3)}$ is, relative to the Boltzmann integral $C^{(2)}$, a correction of relative order $\sim (d/\bar{r})^3$. In the integral $C_1^{(2)}$, however, which contains spatial derivatives of the distribution function, it is sufficient to take $f = f_0$, and in this sense the term $C_1^{(2)}$ should be taken to the left-hand side of the equation, where it gives a correction of the same relative order $\sim (d/r)^3$. Thus the two additional terms $C^{(3)}$ and $C_1^{(2)}$ in the transport equation give contributions of the same order. §

¹having regard to the sense of action of the S operators, we must follow the paths of the particles backwards in time.

‡ The transformation is carried out in a paper by M. S. Green (Physical Review 136, A905, 1964).

§ This argument clears up any misapprehension which might arise because the integral $\hat{C}_i^{(2)}$ contains derivatives $\partial f / \partial \mathbf{r} \sim f/L$, which are not found in $C^{(3)}$, as a result of which the two terms might appear to give corrections of different orders of magnitude.

For reference, the results of solving the more accurate transport equation for the thermal conductivity and the viscosity of the gas, with the model of hard spheres (diameter d) are

$$\kappa = \kappa_0 (1 + 1.2Nd^3), \quad \eta = \eta_0 (1 + 0.35Nd^3), \quad (18.2)$$

where κ_0 and η_0 are the values obtained in § 10, Problem 3 (J. V. Sengers 1966).[†] By making further corrections to the transport equation (arising from four-body collisions, etc.), it would in principle be possible to determine also the subsequent terms in the virial expansion of the kinetic coefficients. It is important to note, however, that these terms will involve non-integral powers of N ; the functions $\kappa(N)$ and $\eta(N)$ are found to be non-analytic at the point $N = 0$. To elucidate the origin of this behaviour, let us consider the convergence of the integrals occurring in the theory (E. G. D. Cohen, J. R. Dorfman and J. Weinstock 1963).

We take first the integral in (17.10), which determines the contribution of three-body collisions to the two-particle distribution function. The type of convergence of the integral is different for the different kinds of collision process covered by the operator $\hat{R}_{123}$. Let us use as an example the process as in Fig. 5b.

The integration is over the phase volume $d\tau_3$ with given phase points τ_1 and τ_2 . As the variable in the last integration we leave the distance r_3 of particle 3 (at time t) from the point where the collision 2-3 occurred. Before this last integration, the integrand will contain the following factors: (1) the volume element $r_3^2 dr_3$ for the variable r_3 ; (2) if we follow the motion of particle 3 backwards in time, it will be clear that the direction of its momentum p_3 must lie in a certain solid-angle element for the collision 3-2 to occur, namely the angle subtended by the region of collision at the distance r_3 , giving a factor d^2/r_3^2 ; (3) another such factor arises from the further limitation on the possible directions of the momentum p_3 imposed by the condition that the "recoiling" particle 2 enters the sphere of collision with particle 1. Thus we get an integral of the form $\int dr_3/r_3^2$, which is to be taken from $r_3 \sim d$ to ∞ , and we see that it converges. Similarly, it can be shown that for collision processes of other types the convergence of the integral is even more rapid.

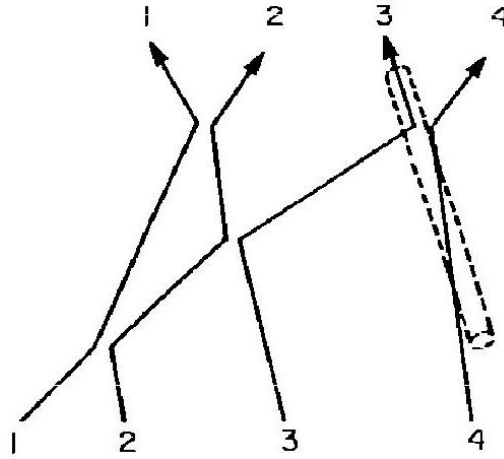
The contribution of four-body collisions would be expressed in (17.10) by an integral of similar form, taken over the phase space of particles 3 and 4, again for given τ_1 and τ_2 .

Let us consider a four-body collision of the kind shown in Fig. 6. We leave as the last variable of integration the distance r_4 from particle 4 (at time t) to the 4-3 collision point. The difference from the preceding estimate arises because the phase point τ_3 (at time t) is not specified, unlike the point τ_2 in the integral corresponding to Fig. 5b. The position of the collision 4-3 is therefore also not fixed; it may occur anywhere in a cylindrical region with diameter $\sim d$ and axis along p_3 (shown by the broken lines in Fig. 6). Accordingly, the solid angle subtended by this region at a distance r_4 is $\sim d/r_4$, instead of d^2/r_3^2 as in the previous case. The integral is therefore of the form $\int dr_4/r_4$, and so diverges logarithmically at the upper limit. Cutting off the integral at some distance Λ , we obtain a contribution to the function

$f^{(2)}$ which contains the large logarithm $\log(\Lambda/d)$. This logarithm appears correspondingly in the correction to the transport coefficients, which is proportional not to $(Nd^3)^2$ but to $(Nd^3)^2 \log(\Lambda/d)$.

The presence of divergent terms signifies that the four-body collisions cannot be treated separately from those of all higher orders (five-body, etc.). For the divergence shows that large r_4 are important, but even when $r_4 \sim l$ particle 4 can collide with some particle 5, and so on. The way to remove the divergence is thus clear: in the expression for $f^{(2)}(t, \tau_1, \tau_2)$ we must take account of terms relating to collisions of all orders, retaining in each order the most rapidly divergent integrals. Such a summation can be carried out, and has a foreseeable result: the

^{††} The calculations, which are exceedingly laborious, are given by Sengers in Lectures in Theoretical Physics, Vol. IXC, Kinetic Theory (ed. by W. E. Brillin), Gordon & Breach, New York, 1967.



Flg. 6.

arbitrarily large parameter Λ in the logarithm is replaced by the order of magnitude of the mean free path, $l \sim 1/Nd^2$.[†]

Thus the expansion of the transport coefficients has the form

$$\kappa = \kappa_0 \left[1 + \alpha_1 Nd^3 + \alpha_2 (Nd^3)^2 \log(1/Nd^3) + \dots \right], \quad (18.3)$$

and similarly for η .

15.1.13 §19. Fluctuations of the distribution function in an equilibrium gas

The distribution function determined by the transport equation, denoted in §§ 19 and 20 by $\bar{f}$, gives the mean numbers of molecules in the phase volume element $d^3x d\Gamma$; for a gas in statistical equilibrium, $\bar{f}(\Gamma)$ is the Boltzmann distribution function f_0 (6.7), independent of time and (if there is no external field) of the coordinates $\mathbf{r}$. It is natural to consider the fluctuations of the exact microscopic distribution function $f(t, \mathbf{r}, \Gamma)$ as it varies with time in the motion of the gas particles under their exact equations of motion. [‡]

We define the correlation function of the fluctuations as

$$\langle \delta f(t_1, \mathbf{r}_1, \Gamma_1) \delta f(t_2, \mathbf{r}_2, \Gamma_2) \rangle, \quad (19.1)$$

where $\delta f = f - \bar{f}$. In an equilibrium gas, this function depends only on the time difference $t = t_1 - t_2$; the averaging is taken with respect to one of the times t_1 and t_2 , with a fixed value of their difference. Since the gas is homogeneous, the coordinates $\mathbf{r}_1$ and $\mathbf{r}_2$ also occur in the correlation function as the difference $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$. We can therefore arbitrarily take t_2 and $\mathbf{r}_2$ as zero, and write the correlation function as

$$\langle \delta f(t, \mathbf{r}, \Gamma_1) \delta f(0, 0, \Gamma_2) \rangle. \quad (19.2)$$

Since the gas is isotropic, the dependence of this function on $\mathbf{r}$ in fact reduces to a dependence on the magnitude r .

If the function (19.2) is known, integration of it gives the correlation function of the particle number density:

[†]See K. Kawasaki and I. Oppenheim, Physical Review 139, A1763, 1965.

[‡] This topic was first discussed by B. B. Kadomisev (1957).

$$\langle \delta N(t, \mathbf{r}) \delta N(0, 0) \rangle = \int \langle \delta f(t, \mathbf{r}, \Gamma_1) \delta f(0, 0, \Gamma_2) \rangle d\Gamma_1 d\Gamma_2 \quad (19.3)$$

For distances r that are large compared with the mean free path l , the density correlation function may be calculated by the hydrodynamic theory of fluctuations (see SP 2, §88), but at distances $\leq l$ a kinetic treatment is needed.

It is immediately evident from the definition (19.1) that

$$\langle \delta f(t, \mathbf{r}, \Gamma_1) \delta f(0, 0, \Gamma_2) \rangle = \langle \delta f(-t, -\mathbf{r}, \Gamma_2) \delta f(0, 0, \Gamma_1) \rangle. \quad (19.4)$$

The correlation function also has a more profound symmetry which corresponds to that of the equilibrium state of the system under time reversal. The latter process replaces a later time t by an earlier one $-t$, and also replaces the values of Γ by the time-reversed ones Γ^T . The symmetry in question is therefore expressed by

$$\langle \delta f(t, \mathbf{r}, \Gamma_1) \delta f(0, 0, \Gamma_2) \rangle = \langle \delta f(-t, \mathbf{r}, \Gamma_1^T) \delta f(0, 0, \Gamma_2^T) \rangle. \quad (19.5)$$

When $t = 0$, the function (19.2) relates the fluctuations at different points in phase space at the same instant. But the correlations between simultaneous fluctuations are propagated only to distances of the order of the range of molecular forces, whereas in the theory under consideration such distances are regarded as zero, so that the simultaneous-correlation function vanishes. It should be emphasized that this result is due to the equilibrium nature of the state relative to which the fluctuations are considered. We shall see in §20 that simultaneous fluctuations also are correlated in the non-equilibrium case.

In the absence of correlation at non-zero distances, the simultaneous-correlation function reduces to delta functions, whose coefficient is the mean square fluctuation at one point in phase space; cf. SP 2, §88. In an ideal equilibrium gas, the mean square fluctuation of the distribution function is equal to the mean value of the function itself (see SP 1, § 113); thus

$$\langle \delta f(0, \mathbf{r}, \Gamma_1) \delta f(0, 0, \Gamma_2) \rangle = \bar{f}(\Gamma_1) \delta(\mathbf{r}) \delta(\Gamma_1 - \Gamma_2). \quad (19.6)$$

The non-simultaneous correlation between fluctuations at different points occurs even in the theory which neglects molecular dimensions. That this correlation necessarily arises is evident from the fact that particles which participate at a certain instant in fluctuations at some point in phase space will already be at other points at any subsequent instant.

The problem of calculating the correlation function for $t \neq 0$ cannot be solved in a general form, but can be reduced to the solution of particular equations. To do so, a proposition is needed from the general theory of quasi-steady fluctuations; see SP1, §§118 and 119.

Let $x_a(t)$ be fluctuating quantities (with zero mean values). It is assumed that, if the system is in a non-equilibrium state with values of x_a beyond the limits of their mean fluctuations (but still small), the process of relaxation of the system to equilibrium is described by linear "equations of motion"

$$\dot{x}_a = - \sum_b \lambda_{ab} x_b \quad (19.7)$$

with constant coefficients λ_{ab} . Then we can say that the correlation functions of the x_a satisfy similar equations

$$\frac{d}{dt} \langle x_a(t) x_c(0) \rangle = - \sum_b \lambda_{ab} \langle x_b(t) x_c(0) \rangle, \quad t > 0, \quad (19.8)$$

with c a free suffix. Solving these equations for $t > 0$, we then find the values of the functions for $t < 0$ from the symmetry property

$$\langle x_a(t)x_b(0) \rangle = \langle x_b(-t)x_a(0) \rangle, \quad (19.9)$$

which follows from the definition of the correlation functions.

In the present case, the equations of motion (19.7) are represented by the linearized Boltzmann equation for the small addition δf to the equilibrium distribution function $\bar{f}$. Thus the correlation function of the distribution function must satisfy the integro-differential equation

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + v_1 \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} - \hat{I}_1 \right) \langle \delta f(t, \mathbf{r}, \Gamma_1) \delta f(0, 0, \Gamma_2) \rangle = 0 \quad \text{for } t > 0 \quad (19.10)$$

where $\hat{I}_1$ is a linear integral operator acting on the variables Γ_1 in the function following it:

$$\hat{I}_1 g(\Gamma_1) = \int w(\Gamma_1, \Gamma; \Gamma'_1, \Gamma') [\bar{f}'_1 g'_1 + \bar{f}' g' - \bar{f}_1 g_1 - \bar{f} g] d\Gamma d\Gamma_1 d\Gamma'. \quad (19.11)$$

The variables Γ_2 in (19.10) are free variables. The initial condition for the equation is the value (19.6) of the correlation function for $t = 0$; that for $t < 0$ is then given by (19.4), the condition (19.5) being automatically satisfied by the result. The formulae (19.10), (19.11) and (19.4) constitute a set of equations sufficient in principle for a complete determination of the correlation function.

What is usually of interest is not the correlation function itself but its Fourier transform with respect to coordinates and time, denoted by $(\delta f_1 \delta f_2)_{\omega k}$, where the suffixes 1 and 2 refer to the arguments Γ_1 and Γ_2 :

$$(\delta f_1 \delta f_2)_{\omega k} = \int_{-\infty}^{\infty} dt \int \langle \delta f(t, \mathbf{r}, \Gamma_1) \delta f(0, 0, \Gamma_2) \rangle e^{-i(k \cdot \mathbf{r} - \omega t)} d^3 x \quad (19.12)$$

the spectral function or spectral correlation function of the fluctuations. If a fluctuating function is expanded as a Fourier integral with respect to time and coordinates, the mean value of the products of its Fourier components is related to the spectral correlation function by

$$\langle \delta f_{\omega k}(\Gamma_1) \delta f_{\omega' k'}(\Gamma_2) \rangle = (2\pi)^4 \delta(\omega + \omega') \delta(\mathbf{k} + \mathbf{k}') (\delta f_1 \delta f_2)_{\omega k}; \quad (19.13)$$

cf. SP 1, § 122.

It is easy to derive an equation which in principle allows a determination of the spectral function of the fluctuations without previous calculation of the space-time correlation function. Dividing the range of integration with respect to t in (19.12) into two parts, from $-\infty$ to 0 and from 0 to ∞ , and using (19.4), we have

$$(\delta f_1 \delta f_2)_{\omega k} = (\delta f_1 \delta f_2)_{\omega k}^{(+)} + (\delta f_2 \delta f_1)_{-\omega -k}^{(+)} \quad (19.14)$$

where

$$(\delta f_1 \delta f_2)_{\omega k}^{(+)} = \int_0^{\infty} dt \int \langle \delta f(t, \mathbf{r}, \Gamma_1) \delta f(0, 0, \Gamma_2) \rangle e^{-i(k \cdot \mathbf{r} - \omega t)} d^3 x \quad (19.15)$$

To the equation (19.10) we apply the one-sided Fourier transformation (19.15). The terms containing derivatives with respect to t and $\mathbf{r}$ are integrated by parts, using the facts that the correlation function must tend to zero as $\mathbf{r} \rightarrow \infty$ and as $t \rightarrow \infty$, and must be given by (19.6) when $t = 0$. The required equation is then found to be

$$[i(k \cdot v_1 - \omega) - \hat{I}_1] (\delta f_1 \delta f_2)_{\omega k}^{(+)} = \bar{f}(\Gamma_1) \delta(\Gamma_1 - \Gamma_2). \quad (19.16)$$

If we are interested in the fluctuations of the gas density, and not in those of the distribution function itself, it is appropriate to integrate equation (19.16) over $d\Gamma_2$:

$$[i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{v} - \omega) - \hat{I}](\delta f(\Gamma)\delta N)_{\omega k}^{(+)} = \bar{f}(\Gamma) \quad (19.1/)$$

The spectral function $(\delta N^2)_{\omega k}$ sought is found from the solution of this equation by a single integration, not a double one as in (19.3).

A nother method of finding $(\delta N^2)_{\omega k}$ is based on the relation between the density correlation function and the generalized susceptibility with respect to a weak external field of the form

$$U(t, r) = U_{\omega k} e^{i(k, r - \omega t)}; \quad (19.18)$$

see SP 2, §86.† If this field causes a density change

$$\delta N_{\omega k} = \alpha(\omega, \mathbf{k}) U_{\omega k} \quad (19.19)$$

†This relation exists only in the equilibrium case.

then from SP 2(86.20) the spectral correlation function of the density is, in the classical limit,

$$(\delta N^2)_{\omega k} = (2T/\omega) \operatorname{im} \alpha(\omega, k) \quad (19.20)$$

Let $\delta f(t, r)$ be the change in the distribution function due to the same field; it satisfies the transport equation

$$\frac{\partial}{\partial t} \delta f + v \cdot \frac{\partial}{\partial r} \delta f - \frac{\partial U}{\partial r} \cdot \frac{\partial \bar{f}}{\partial v} = \hat{I} \delta f$$

The Fourier components of $\delta f(t, r, \Gamma)$ are written

$$f_{\omega k}(\Gamma) = \chi_{\omega k}(\Gamma) U_{\omega k}$$

in which the external field is separated as a factor. Then the equation for $\chi_{\omega k}$ is

$$[i(k \cdot v - \omega) - \hat{I}]_{\chi_{\omega k}(\Gamma)} = ik \cdot \partial \bar{f} / \partial v \quad (19.21)$$

The solution of this equation gives the required spectral correlation function by a single integration:

$$(\delta N^2)_{\omega k} = (2T/\omega) \operatorname{im} \int \chi_{\omega k}(\Gamma) d\Gamma \quad (19.22)$$

PROBLEMS

Problem 1. Determine the density correlation function in a monatomic gas in equilibrium, neglecting collisions.

Solution. For a monatomic gas, the quantities Γ are the three components of the momentum p . The solution of (19.10) for $\hat{I}_1 = 0$ is

$$\langle \delta f(t, r_1 p_1) \delta f(0, 0, p_2) \rangle = \bar{f}(p_1) \delta(r - v_1 t) \delta(p_1 - p_2)$$

and its Fourier component is

$$(\delta f_1 \delta f_2)_{\omega k} = 2\pi \bar{f}(p_1) \delta(p_1 - p_2) \delta(\omega - k \cdot v_1)$$

Integration of these expressions with the Maxwellian function $\bar{f}$ gives as the density correlation function

$$(\delta N(t, r) \delta N(0, 0)) = \bar{N}(m/2\pi T)^{3/2} t^{-3} \exp(-mr^2/2Tt^2) \quad (1)$$

$$(\delta N^2)_{\omega k} = (\bar{N}/k)(2\pi m/T)^{1/2} \exp(-m\omega^2/2Tk^2) \quad (2)$$

Problem 2. The same as Problem I, but for a collision integral in the form $\hat{I}_1 g = -g/\tau$ with a constant time τ .

Solution. Equation (19.16) reduces to an algebraic equation, from which we determine $(\delta f_1 \delta f_2)_{\omega k}^{(+)}$, and then find from (19.14)

$$(\delta f_1 \delta f_2)_{\omega k} = \frac{2\tau \bar{f}(\mathbf{p}_1)}{I + \tau^2 (\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_1 - \omega)^2} \delta(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2) \quad (3)$$

The presence of even a small number of collisions changes the asymptotic behaviour of the spectral correlation function of the density at high frequencies, $\omega \gg k\bar{v}$, i.e. for fluctuations with a phase velocity much greater than the thermal speed of the molecules: in this limit.

$$(\delta N^2)_{\omega k} = 2\bar{N}/\tau\omega^2, \quad (4)$$

i.e. the correlation function decreases with increasing frequency according to a power law, instead of exponentially as in (2).

15.1.14 §20. Fluctuations of the distribution function in a non-equilibrium gas

Let a gas be in a steady but non-equilibrium state with some distribution function $\bar{f}(r, I')$ which satisfies the transport equation

$$\mathbf{v} \cdot \partial \bar{f} / \partial \mathbf{r} = C(\bar{f}); \quad (20.1)$$

the function $\bar{f}$ may deviate greatly from the equilibrium distribution function f_0 , and so the collision integral $C(\bar{f})$ is not assumed linearized with respect to the difference $\bar{f} - f_0$. The steady non-equilibrium state has to be maintained in the gas by external interactions: the gas may, for example, contain a temperature gradient supported by external sources, or it may execute a steady motion (which does not consist in a motion of the gas as a whole).

Let us seek to calculate the fluctuations of the distribution $f(t, \mathbf{r}, \Gamma)$ relative to $\bar{f}(\mathbf{r}, \Gamma)$. These fluctuations will again be described by a correlation function (19.1), in which the averaging is carried out in the usual way with respect to time for a given difference $t = t_1 - t_2$, and the correlation function depends only on t . Since the distribution $\bar{f}(r, l)$ is not uniform, however, the correlation function now depends on the coordinates $\mathbf{r}_1$ and $\mathbf{r}_2$ separately, and not only on their difference. The property (19.4) becomes

$$\langle \delta f_1(t) \delta f_2(0) \rangle = \langle \delta f_2(-t) \delta f_1(0) \rangle, \quad (20.2)$$

where $f_1(t) \equiv f(t, \mathbf{r}_1, \Gamma_1)$, $f_2(0) \equiv f(0, \mathbf{r}_2, \Gamma_2)$.

The relation (19.5) involving time reversal does not apply in general in the non-equilibrium case.

The correlation function of the distribution function again satisfies the equation (19.10):

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v}_1 \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_1} - \hat{I}_1 \right) \langle \delta f_1(t) \delta f_2(0) \rangle = 0, \quad (20.3)$$

where $\hat{I}_1$ is the linear integral operator (19.11), which acts on the variables Γ_1 .[†] The problem of the initial condition on this equation, i.e. the form of the single-time correlation function, is

considerably more complex than in the equilibrium case, where it was given simply by (19.6). In a non-equilibrium gas, the single-time correlation function is itself determined from a transport equation whose form can

be established by using the relation between the correlation function and the two-particle distribution function $\bar{f}^{(2)}$ defined in §16. In a steady state the function $\bar{f}^{(2)}(\mathbf{r}_1, \Gamma_1; \mathbf{r}_2, \Gamma_2)$, like $\bar{f}(\mathbf{r}, \Gamma)$, does not depend explicitly on the time.

To derive this relation, we note that, since the volume $d\tau = d^3x d\Gamma$ is infinitesimal, it cannot contain more than one particle at a time. † Hence the mean number $\bar{f} d\tau$ is also the probability that a particle is in the element $d\tau$ (the probability that there are two particles in it at once being a quantity of a higher order of smallness). It follows that the mean value of the product of the numbers of particles in the two elements $d\tau_1$ and $d\tau_2$ is equal to the probability of simultaneously finding one particle in each of them. For a given pair of particles this is the product $\bar{f}_2^9 d\tau_1 d\tau_2$, by the definition of the two-particle distribution function. Since a pair of particles can be chosen from the (very large) total number of particles in $\mathcal{N}(\mathcal{N}-1) \approx \mathcal{N}^2$ ways, we have

$$\langle f_1 d\tau_1, f_2 d\tau_2 \rangle = \mathcal{N}^2 \bar{f}_{12}'' d\tau_1 d\tau_2$$

The equation $\langle f_1 f_2 \rangle = \mathcal{N}^2 \bar{f}_1^{(2)}$ thus obtained relates, however, only to different points in phase space. The passage to the limit $r_1, r_1 \rightarrow r_2, r_2$ makes it necessary to take into account that, if $d\tau_1$ and $d\tau_2$ coincide, an atom in $d\tau_1$ is also in $d\tau_2$. A relation which allows for this is

$$\langle f_1 f_2 \rangle = \mathcal{N}^2 \bar{f}_{12}'' + \bar{f}_1 \delta(r_1 - r_2) \delta(\Gamma_1 - \Gamma_2) : \quad (20.4)$$

when it is multiplied by $d\tau_1 d\tau_2$ and integrated over some small volume $\Delta\tau$, the first term on the right gives a small quantity of the second order, $\propto (\Delta\tau)^2$, and the term containing the delta functions gives $\bar{f} \Delta\tau$, a first-order quantity. Thus we have

$$\left\langle \left(\int_{\Delta z} f d\tau \right) \right\rangle = \bar{f} \Delta\tau$$

as it should be, since as far as first-order quantities there can only be either no particle or one particle in the small volume $\Delta\tau$.

Substituting (20.4) in the definition of the single-time correlation function

$$\langle \delta f_1(0) \delta f_2(0) \rangle = \langle f_1(0) f_2(0) \rangle - \bar{f}_1 \bar{f}_2,$$

we obtain the required relation between it and the two-particle distribution function:

$$\langle \delta f_1(0) \delta f_2(0) \rangle = \mathcal{N}^2 \bar{f}_{12}^{(2)} - \bar{f}_1 \bar{f}_2 + \bar{f}_1 \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \delta(\Gamma_1 - \Gamma_2). \quad (20.5)$$

In an ideal gas in equilibrium, the two-particle distribution function reduces to the product $\bar{f}_{12}^{(2)} = \bar{f}_1 \bar{f}_2 / \mathcal{N}^2$, and (20.5) reduces to (19.6). In any case, $\bar{f}_{12}^{(2)}$ tends to this product as the distance between the points 1 and 2 increases, so that

$$\langle \delta f_1(0) \delta f_2(0) \rangle \rightarrow 0 \quad \text{as} \quad |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| \rightarrow \infty. \quad (20.6)$$

† The derivation which follows is a paraphrase of the argument in SP 1, § 116.

The two-particle distribution function satisfies a transport equation analogous to the Boltzmann equation, which could be derived from equation (16.9) for $\bar{f}^{(2)}$ in the same way as the equation for the single-particle function was derived from (16.7). † Here, however, we shall give a derivation of the equation for $\bar{f}^{(2)}$ analogous to that of the Boltzmann equation in §3, based on intuitive physical arguments.

¹† The use of this equation in the non-equilibrium case is due to M. Lax (1966).

We take as the unknown function not $\bar{f}^{(2)}$ itself but the difference

$$\varphi(\mathbf{r}_1, \Gamma_1; \mathbf{r}_2, \Gamma_2) = \mathcal{N}^2 \bar{f}_{12}^{(2)} - \bar{f}_1 \bar{f}_2, \quad (20.7)$$

which tends to zero as $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| \rightarrow \infty$; it is the correlation function (20.5) without the last term. This quantity is small in the usual sense of fluctuation theory, namely of the order of $1/\mathcal{N}$ in comparison with $\bar{f}_1 \bar{f}_2$.

In the absence of collisions, the function φ satisfies an equation which simply expresses Liouville's theorem—the constancy of $\bar{f}^{(2)}$ along the phase trajectory of a pair of particles:

$$\frac{d\bar{f}^{(2)}}{dt} = \frac{d\varphi}{dt} = v_1 \cdot \frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{r}_1} + v_2 \cdot \frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{r}_2} = 0. \quad (20.8)$$

The change in φ as a result of collisions is due to processes of two kinds. Collisions of particles 1 and 2 with any other particles, but not with each other, cause the appearance on the right of (20.8), of terms $\hat{I}_1 \varphi + \hat{I}_2 \varphi$, where $\hat{I}_1$ and $\hat{I}_2$ are the linear integral operators (19.11) acting on the variables Γ_1 and Γ_2 respectively.

Collisions between the particles 1 and 2 play a special role, causing a simultaneous "jump" of both particles from one pair of points in phase space to another pair. Exactly the same arguments as were used in the derivation of (3.7) give on the right of (20.8) a term $\delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) C_{12}(\bar{f})$, where

$$C_{12}(\bar{f}) = \int w(\Gamma_1, \Gamma_2; \Gamma'_1, \Gamma'_2) (\bar{f}'_1 \bar{f}'_2 - \bar{f}_1 \bar{f}_2) d\Gamma'_1 d\Gamma'_2; \quad (20.9)$$

in this integral, fluctuations may be neglected. The factor $\delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ expresses the fact that particles undergoing collisions are at the same point in space. ‡

Thus we have finally the equation

$$v_1 \cdot \frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{r}_1} + v_2 \cdot \frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{r}_2} - \hat{I}_1 \varphi - \hat{I}_2 \varphi = \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) C_{12}(\bar{f}) \quad (20.10)$$

Solution of this equation gives, in accordance with (20.5), the function which acts as the initial condition for equation (20.3) at $t = 0$.§

† In §17 equation (16.9) was used only for a specific purpose, namely to eliminate $\bar{f}^{(2)}$ from the equation for $\bar{f}$.

‡ A further integration of (20.9) over $d\Gamma_2$ yields the ordinary Boltzmann collision integral.

§ This result is due to S. V. Gantsevich, V. L. Gurevich and R. Katilyus (1969) and to Sh. M. Kogan and A. Ya. Shul'man (1969).

Without the right-hand side, the homogeneous equation (20.10) has the solution

$$\left. \begin{aligned} \varphi &= f_{01} \Delta f_{02} + f_{02} \Delta f_{01} \\ \Delta f_0 &= \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{N}} \Delta \mathcal{N} + \frac{\partial f_0}{\partial T} \Delta T + \frac{\partial f_0}{\partial v} \Delta V \end{aligned} \right\} \quad (20.11)$$

corresponding to arbitrary small changes in the number of particles, the temperature, and the macroscopic velocity in the equilibrium distribution f_0 .

This "spurious" solution is, however, excluded by the condition that $\varphi \rightarrow 0$ as $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| \rightarrow \infty$. Hence, in the equilibrium case, when the integral C_{12} is identically zero, equation (20.10) gives $\varphi = 0$, and we return to the initial condition (19.6).

The right-hand side of (20.10), i.e. the pair collisions between particles in given states Γ_1 and Γ_2 , may thus be regarded as the source of the single-time correlation of fluctuations in a non-equilibrium gas. By causing a simultaneous change in the occupation numbers of the two states, pair collisions generate a correlation between these numbers. In the equilibrium state, owing to the exact compensation of direct and reverse pair collisions, this mechanism has no effect and there are no single-time correlations.

If the distribution $\bar{f}$ is independent of the coordinates $\mathbf{r}$ (as may happen when the deviation from equilibrium is maintained by an external field), we can consider fluctuations of the distribution function averaged over the whole volume of the gas, i.e. of the function

$$f(t, \Gamma) = \frac{1}{\mathcal{V}} \int f(t, \mathbf{r}, \Gamma) d^3x \quad (20.12)$$

which we denote by the same letter f but without the argument $\mathbf{r}$. The corresponding correlation function satisfies an equation that differs from (20.3) in not having a term containing the derivative with respect to the coordinates:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{F}_1 \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1} - \hat{I}_1 \right) \langle \delta f(t, \Gamma_1) \delta f(0, \Gamma_2) \rangle = 0 \quad \text{for } t > 0; \quad (20.13)$$

on the left-hand side, a term has been added which arises from the force $\mathbf{F}$ acting on the particles in the external field. The single-time correlation function

$$\begin{aligned} \langle \delta f(0, \Gamma_1) \delta f(0, \Gamma_2) \rangle &= \mathcal{N}^2 \bar{f}^{(2)}(\Gamma_1, \Gamma_2) - \bar{f}(\Gamma_1) \bar{f}(\Gamma_2) + \frac{\bar{f}(\Gamma_1)}{\mathcal{V}} \delta(\Gamma_1 - \Gamma_2) \\ &\equiv \varphi(\Gamma_1, \Gamma_2) + \frac{\bar{f}(\Gamma_1)}{\mathcal{V}} \delta(\Gamma_1 - \Gamma_2) \end{aligned} \quad (20.14)$$

satisfies the equation

$$\left[\mathbf{F}_1 \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1} + \mathbf{F}_2 \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_2} - (\hat{I}_1 + \hat{I}_2) \right] \varphi(\Gamma_1, \Gamma_2) = C_{12}(\varphi(\Gamma_1, \Gamma_2)). \quad (20.15)$$

If the gas is in a closed vessel, this equation is to be solved with the additional condition that expresses a fixed value (without fluctuations) of the total number of particles in the gas:

$$\int \langle \delta f(0, \Gamma_1) \delta f(0, \Gamma_2) \rangle d\Gamma_1 = \int \langle \delta f(0, \Gamma_1) \delta f(0, \Gamma_2) \rangle d\Gamma_2 = 0 \quad (20.16)$$

This condition must be satisfied in the equilibrium case also, but it is not satisfied by the expression $[\bar{f}(\Gamma_1)/\mathcal{V}] \delta(\Gamma_1 - \Gamma_2)$ which corresponds to the correlation function (19.6). The correct expression is obtained by making use of the arbitrary choice (20.11); with the appropriate value of the parameter $\Delta\mathcal{N}$,

$$\langle \delta f(0, \Gamma_1) \delta f(0, \Gamma_2) \rangle = \frac{1}{\Pi} \bar{f}(\Gamma_1) \delta(\Gamma_1 - \Gamma_2) - \frac{1}{\mathcal{N}} \bar{f}(\Gamma_1) \bar{f}(\Gamma_2). \quad (20.17)$$

This correlation function includes a term which does not contain a delta function.

15.2 II The Diffusion Approximation by Landau

15.2.1 §21. The Fokker-Planck equation

A considerable class of transport phenomena is constituted by processes in which the mean changes of quantities (on which the distribution function depends) in each event are small in comparison with their characteristic values. The relaxation times for such processes are long in comparison with the times of the individual events which constitute their microscopic mechanism; in this sense, they may be called slow processes.

A typical instance is the problem of momentum relaxation of a small admixture of a heavy gas in a light one, the latter being regarded as itself in equilibrium. Because of the low concentration of heavy particles, their collisions with one another may be neglected, and only those

with the particles of the light gas considered. When a heavy particle collides with light ones, however, its momentum undergoes only a relatively small change.

We shall refer to this specific example, and derive the transport equation satisfied in such cases by the momentum distribution function $f(t, p)$ of the impurity particles.

Let $w(\mathbf{p}, \mathbf{q})d^3q$ denote the probability per unit time of a change $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} - \mathbf{q}$ in the momentum of a heavy particle in an individual collision with a light particle. Then the transport equation for the function $f(t, p)$ is

$$\partial f(t, \mathbf{p})/\partial t = \int \{w(\mathbf{p} + \mathbf{q}, \mathbf{q})f(t, \mathbf{p} + \mathbf{q}) - w(\mathbf{p}, \mathbf{q})f(t, \mathbf{p})\}d^3q \quad (21.1)$$

where the right-hand side is the difference between the numbers of particles per unit time that enter and leave a given momentum space element d^3p . According to the hypotheses used, the function $w(p, q)$ decreases rapidly with increasing q , and so the most important values of $\mathbf{q}$ in the integral are those which are small compared with the mean momentum of the particles. This allows the following expansion to be used in the integrand:

$$\begin{aligned} w(\mathbf{p} + \mathbf{q}, \mathbf{q})f(t, \mathbf{p} + \mathbf{q}) &\approx w(\mathbf{p}, \mathbf{q})f(t, \mathbf{p}) + \mathbf{q} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} w(\mathbf{p}, \mathbf{q})f(t, \mathbf{p}) \\ &\quad + \frac{1}{2} q_\alpha q_\beta \frac{\partial^2}{\partial p_\alpha \partial p_\beta} w(\mathbf{p}, \mathbf{q})f(t, \mathbf{p}) \end{aligned}$$

The transport equation then becomes

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial p_\alpha} \left\{ \tilde{A}_\alpha f + \frac{\partial}{\partial p_\beta} (B_{\alpha\beta} f) \right\} \quad (21.2)$$

where

$$\tilde{A}_\alpha = \int q_\alpha w(\mathbf{p}, \mathbf{q})d^3q, \quad B_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} \int q_\alpha q_\beta w(\mathbf{p}, \mathbf{q})d^3q \quad (21.3)$$

Thus the transport equation is now a differential (not integro-differential) equation. The quantities $\tilde{A}_\alpha$ and $B_{\alpha\beta}$ may be symbolically written as follows to show their significance more clearly:

$$\tilde{A}_\alpha = \sum q_\alpha / \delta t, \quad B_{\alpha\beta} = \sum q_\alpha q_\beta / 2\delta t, \quad (21.4)$$

where the summations are over the (large) number of collisions that occur in the time δt .

The expression on the right of (21.2) is the divergence in momentum space, $-\partial s_\alpha / \partial p_\alpha$, of the vector

$$\left. \begin{aligned} s_\alpha &= -\tilde{A}_\alpha f - \frac{\partial}{\partial p_\beta} (B_{\alpha\beta} f) \\ &= -A_\alpha f - B_{\alpha\beta} \partial f / \partial p_\beta \\ A_\alpha &= \tilde{A}_\alpha + \partial B_{\alpha\beta} / \partial p_\beta \end{aligned} \right\} \quad (21.5)$$

Thus equation (21.2) is, as it should be, an equation of continuity in momentum space, and so the number of particles is automatically conserved in the process. The vector s is the particle flux density in momentum space.

According to equations (21.4), the coefficients in the transport equation are expressible in terms of the average characteristics of the collisions, and in this sense their calculation is a purely mechanical problem. In fact, however, there is no need to calculate the A_α and $B_{\alpha\beta}$ individually; they can be expressed in terms of one another by means of the condition for the flux to be zero in statistical equilibrium. In the present case, the equilibrium distribution function is

$$f = \text{constant} \times \exp(-p^2/2MT),$$

where M is the mass of the heavy gas particles and T the temperature of the light gas. Substitution of this expression in the equation $s = 0$ gives

$$MTA_\alpha = B_{\alpha\beta}D_\beta \quad (21.6)$$

Thus the transport equation becomes

$$\frac{\partial f(t, \mathbf{p})}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial p_\alpha} \left[B_{\alpha\beta} \left(\frac{p_\beta}{MT} f + \frac{\partial f}{\partial p_\beta} \right) \right]. \quad (21.7)$$

The coefficients in the first two terms of the expansion of the collision integral are of the same order of magnitude; the reason is that the averaging of the first powers of the quantities q_α in (21.4), whose sign is variable, involves a greater degree of cancellation than the averaging of quadratic expressions. The later terms of the expansion are all small in comparison with the first two.

The only vector on which the coefficients $\mathbf{B}_{\alpha\beta}$ can depend is the momentum $\mathbf{p}$ of the heavy particles. If the velocities p/M of these particles are on average small compared with those of the light particles, they may be regarded as immobile in collisions; in this approximation, the $\mathbf{B}_{\alpha\beta}$ are independent of $\mathbf{p}$. Thus the tensor $\mathbf{B}_{\alpha\beta}$ reduces to a constant scalar B :

$$B_{\alpha\beta} = B\delta_{\alpha\beta}, \quad B = \frac{1}{6} \int q^2 w(0, q) d^3q, \quad (21.8)$$

and equation (21.7) becomes

$$\frac{\partial f}{\partial t} = B \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \cdot \left(\frac{\mathbf{p}}{MT} f + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} \right). \quad (21.9)$$

There is a formal similarity between (21.7) and the equation of diffusion in an external field, which is especially evident from the form (21.9). The diffusion equation is

$$\partial c / \partial t = \text{div}(D \nabla c - bc\mathbf{F}),$$

where c is the impurity concentration, F the force exerted on the impurity particles by the external field, D the diffusion coefficient, and b the mobility. The processes described by (21.9) may be referred to as diffusion in momentum space, with B acting as the diffusion coefficient; the relation between the coefficients in the two terms on the right of (21.9) is analogous to the familiar Einstein relation $D = bT$ between the diffusion coefficient and the mobility (FM, 859).

The transport equation in the form (21.2), with the coefficients defined in terms of the averaged characteristics of the elementary events by means of (21.4), is called the Fokker-Planck equation (A. D. Fokker 1914; M. Planck 1917). The specific properties of the variables p_α as the momenta of the particles have played no part in the derivation given. It is therefore clear that an equation of the same form is valid also for the distribution function f with respect to other variables, provided that the conditions on which the proof is based are satisfied: the relative smallness of the change in the quantities in each event, and the linearity with respect to f of the integral operator which expresses the change in the function resulting from these events.

As an example, let us take the case of a light gas forming a slight impurity in a heavy gas. In collisions with heavy particles, the momentum of a light particle changes greatly in direction but only slightly in magnitude. Although equation (21.7) is invalid under these conditions for the distribution function of the impurity gas particles with respect to the momentum vector p ,

a similar equation can be set up for the distribution with respect to the magnitude p only. If the distribution function is, as before, taken relative to the momentum space element d^3p , so that the number of particles having the value of p in a range dp is $f(t, p)4\pi p^2 dp$, the Fokker-Planck equation is valid for the function $4\pi p^2 f$ in relation to dp :

$$\frac{\partial (fp^2)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial p} \left\{ fp^2 A + B \frac{\partial}{\partial p} fp^2 \right\},$$

or

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{1}{p^2} \frac{\partial}{\partial p} p^2 \left\{ fA + \frac{B}{p^2} \frac{\partial}{\partial p} fp^2 \right\}, \quad (21.10)$$

where

$$B = \frac{1}{2} \sum (\delta p)^2 / \delta t \quad (21.11)$$

The expression in the braces is the radial flux s in momentum space. It must reduce to zero the case of the equilibrium distribution

$$f = \text{constant} \times \exp(-p^2/2mT),$$

where m is the mass of a light particle and T the temperature of the heavy gas. This condition gives a relation between A and B , and the transport equation (21.10) thus becomes

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{1}{p^2} \frac{\partial (p^2 s)}{\partial p}, \quad s = -B \left(\frac{p}{mT} f + \frac{\partial f}{\partial p} \right). \quad (21.12)$$

PROBLEMS

Problem 1. Determine the diffusion coefficient in momentum space (B in equation (21.9)) for an admixture of a heavy gas in a light one, assuming the speeds of the heavy particles to be small compared with those of the light ones.

Solution. As shown in the text, under the conditions stated the momentum transfer may be calculated by assuming the heavy particle to be fixed and neglecting the change in its energy in the collision. The change in the momentum of the heavy particle is then calculated as the equal change in that of the light particle: $(\Delta \mathbf{p})^2 = 2p'^2(1 - \cos \alpha)$, where p' is the momentum of the light particle and α the angle through which it is scattered. Hence

$$\sum (\Delta \mathbf{p})^2 = \delta t \int 2p'^2(1 - \cos \alpha) N v' d\sigma$$

where N is the number density of light gas particles, and we have finally

$$B = (N/3m) \langle p'^3 \sigma_1 \rangle,$$

where $\sigma_t = \int (1 - \cos \alpha) d\sigma$ is the transport cross-section, and the averaging is taken over the light gas particle distribution.

Problem 2. Use the Fokker-Planck equation to determine the mobility of a heavy particle in a light gas.

Solution. When an external field is present, a term $\mathbf{F} \cdot \partial f / \partial \mathbf{p}$ is added to the left-hand side of (21.9), F being the force acting on the particle. Assuming this force to be small, we seek a steady solution of the equation in the form $f = f_0 + \delta f$, where f_0 is the Maxwellian distribution and $\delta f < f_0$. The equation for δf is then

$$B \frac{\partial}{\partial p} \cdot \left(\frac{\partial \delta f}{\partial p} + \frac{p}{MT} \delta f \right) = F \cdot \frac{\partial f_0}{\partial p}$$

Hence

$$B \left(\frac{\partial \delta f}{\partial p} + \frac{p}{MT} \delta f \right) = F f_0$$

and so $\delta f = f_0 F \cdot p / B$. The mobility b is the coefficient in the equation

$$\bar{\mathbf{v}} = \int \delta f \cdot v d^3 p = b \mathbf{F}$$

A calculation of the integral gives

$$b = T/B = 3mT/N (\sigma_i p'^3)$$

in agreement with (12.4).

15.2.2 §22. A weakly ionized gas in an electric field

Let us consider an ionized gas in a uniform electric field $\mathbf{E}$. This field perturbs the equilibrium distribution of free electrons in the gas and causes an electric current in it. We shall derive the transport equation which governs the electron distribution. [†] If the ionization is weak, the electron (and ion) density in the gas is small. Hence only collisions between electrons and neutral molecules are important; those between electrons and ions or other electrons may be neglected. We shall also assume that the mean energy acquired by the electrons in the electric field is (even in a strong field; see below) insufficient to excite or ionize the molecules; the collisions between electrons and molecules may then be regarded as elastic.

Because of the large difference between the electron mass m and the molecule mass M , the mean speed of the electrons is much greater than that of the molecules. For the same reason, the electron momentum changes its direction greatly in a collision, but its magnitude only slightly. Under these conditions, the collision integral in the transport equation falls into the sum of two parts which represent the changes in the number of particles in a given element of momentum space due to the change in the magnitude and in the direction of the momentum; the first part may be expressed in the Fokker-Planck differential form.

Because of the symmetry about the direction of the field, the distribution function depends on only two variables (apart from the time): the magnitude p of the momentum, and the angle θ between $p = mv$ and the direction of $\mathbf{E}$ (which we take as the z -axis). The transport equation for the function $f(t, p, \theta)$ has the form [‡]

$$\frac{\partial f}{\partial t} - e\mathbf{E} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = -\frac{1}{p^2} \frac{\partial}{\partial p} (p^2 s) + Nv \int [f(t, p, \theta') - f(t, p, \theta)] d\sigma, \quad (22.1)$$

where

$$s = -B \left(\frac{v}{T} f + \frac{\partial f}{\partial p} \right), \quad B = \frac{1}{2} \sum (\Delta p)^2 / \delta t.$$

The first term on the right of (22.1) corresponds to the right-hand side of the Fokker-Planck equation (21.12). The second term is the collision integral with

^{††} The theory given in §22 is due to B. I. Davydov (1936). The limiting expression (22.18) was earlier derived by M. J. Druyvesteyn (1930).

[‡] in this book, e always denotes a positive quantity, the absolute magnitude of the unit charge. The charge on the electron is therefore $-e$.

respect to the change in direction of the momentum. In this integral, the molecules may be regarded as immovable (N being their number density); the number of collisions undergone by an electron per unit time and changing the direction of the momentum from θ to θ' (or vice versa) is $Nvd\sigma$, where $d\sigma$ is the cross-section for scattering of an electron by a molecule at rest, which depends on p and on the angle α between $\mathbf{p}$ and $\mathbf{p}'$; we assume that the cross-section is already averaged over the orientations of the molecule.

We shall consider a steady state with a time-independent distribution function, and accordingly the term $\partial f/\partial t$ in (22.1) will be omitted.

To calculate B , we use the equation

$$(v - v')^2 = (v' - v')^2$$

which expresses the constant magnitude of the relative velocity of the two particles in an elastic collision; $\mathbf{v}, \mathbf{V}$ and $\mathbf{v}', \mathbf{V}'$ are the initial and final velocities of the electron and the molecule. The change in the velocity of the molecule is small compared with that of the electron ($\Delta V = -m\Delta v/M$); hence, after expanding the above equation, we can put $\mathbf{V} = \mathbf{V}'$. Then

$$2\mathbf{V} \cdot (\mathbf{v} - \mathbf{v}') = v^2 - v'^2 \approx 2v\Delta v$$

where $\Delta v = v - v'$ is a small quantity. Thus

$$(\Delta p)^2 = m^2(\Delta v)^2 = (m^2/v^2) [(\mathbf{V} \cdot \mathbf{v})^2 + (\mathbf{V} \cdot \mathbf{v}')^2 - 2(\mathbf{V} \cdot \mathbf{v})(\mathbf{V} \cdot \mathbf{v}')]]$$

The averaging of this expression is carried out in two stages. First, we average over the (Maxwellian) distribution of the molecular velocities $\mathbf{V}$. Because of the isotropy of this distribution, $\langle V_\alpha V_\beta \rangle = \frac{1}{3}\delta_{\alpha\beta} \langle V^2 \rangle$, and $\langle V^2 \rangle = 3T/M$. We therefore have

$$(\Delta p)^2 = (m^2 T/M v^2) (v^2 + v'^2 - 2v \cdot v') \approx (2m^2 T/M) (1 - \cos \alpha) \quad (22.2)$$

We must now average over the collisions undergone by the electron per unit time; this is done by integrating over $Nvd\sigma$. The result is

$$B = Nm^2 v \sigma_t T/M = pmT/Ml, \quad (22.3)$$

where $\sigma_t = \int (1 - \cos \alpha) d\sigma$ is the transport cross-section, and l the mean free path defined as

$$l = 1/N\sigma_t, \quad (22.4)$$

in general a function of p . The flux in (22.1) is therefore

$$s = -\frac{mp}{Ml} \left(v f + T \frac{\partial f}{\partial p} \right) \quad (22.5)$$

Note that, according to (22.2), the change in the electron energy in the collision is $\Delta \epsilon \sim \bar{v} \Delta p \sim T(m/M)^{1/2} \sim \bar{\epsilon}(m/M)^{1/2}$. Hence an appreciable change in this energy occurs only after $\sim M/m$ collisions, whereas the direction of the electron momentum alters considerably in even one collision. That is, the electron energy relaxation time $\tau_\epsilon \sim \tau_p M/m$, where $\tau_p \sim l/\bar{v}$ is the momentum direction relaxation time.

The left-hand side of (22.1) is also to be transformed to the variables p and θ :

$$e\mathbf{E} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = eE \frac{\partial f}{\partial p_z} = eE \left[\cos \theta \frac{\partial f}{\partial p} + \frac{\sin^2 \theta}{p} \frac{\partial f}{\partial \cos \theta} \right]. \quad (22.6)$$

The solution of the transport equation thus derived may be sought as an expansion in Legendre polynomials:

$$f(p, \theta) = \sum_{n=0}^{\infty} f_n(p) P_n(\cos \theta). \quad (22.7)$$

We shall see later that the successive terms in this expansion decrease rapidly in order of magnitude. It is therefore sufficient in practice to take only the first two terms in the expansion:

$$f(p, \theta) = f_0(p) + f_1(p) \cos \theta. \quad (22.8)$$

The integral in (22.1), with (22.8) substituted, gives

$$\int [f(p, \theta') - f(p, \theta)] d\sigma = -f_1 \sigma_1 \cos \theta$$

compare the transformation of a similar integral in (11.1). The transport equation then becomes

$$-eE [f'_0 \cos \theta + f'_1 \cos^2 \theta + (f_1/p) \sin^2 \theta] + (1/p^2) (s_0 p^2)' + (v/l) f_1 \cos \theta = 0,$$

where the prime denotes differentiation with respect to p . The term $p^{-2} (s_1 p^2)' \cos \theta$ has been omitted; it is certainly small (in the ratio $\sim m/M$) in comparison with the term $(v f_1/l) \cos \theta$ (s_0 and s_1 are the expressions (22.5) with f_0 or f_1 in place of f). Multiplying this equation by $P_0 = 1$ or $P_1 = \cos \theta$ and integrating over $d \cos \theta$, we obtain two equations:

$$(1/p^2) (p^2 S)' = 0, S = -\frac{1}{lM} (p^2 f_0 + m p T f'_0) - \frac{1}{3} e E f_1 \quad (22.9)$$

$$f_1 = (e E l / v) f'_0 \quad (22.10)$$

The expression S represents the particle flux in momentum space as modified by the electric field. It follows from (22.9) that $S = \text{constant} / p^2$. The flux S must, however, be finite for all p , and the constant is therefore zero. Now substituting f_1 from (22.10) in the equation $S = 0$, we find an equation determining $f_0(p)$:

$$\left[p T + \frac{(e E l)^2 M}{3 p} \right] f'_0 + \frac{p^2}{m} f_0 = 0. \quad (22.11)$$

So far we have made no assumptions as to the form of the function $l(p)$, and the integral of the first-order equation (22.11) can be written for any $l(p)$. In order to obtain more specific results, we shall assume that $l = \text{constant}$, which is equivalent to assuming that the cross-section σ_t is independent of the momentum. † The integration of (22.11) gives

$$f_0(p) = \text{constant} \times \left(\frac{\epsilon}{T} + \frac{\gamma^2}{6} \right)^{\gamma^2/6} e^{-\epsilon \int T} \quad (22.12)$$

where

$$\gamma = (e E l / T) \vee (M / m). \quad (22.13)$$

For the function $f_1(p)$, we have from (22.10) and (22.12)

$$f_1 = -f_0 \sqrt{\left(\frac{m}{M} \right)} \frac{\gamma \epsilon / T}{\epsilon / T + \gamma^2 / 6} \quad (22.14)$$

The quantity γ is the parameter that describes the extent to which the field affects the electron distribution. The limiting case of weak fields corresponds to $\gamma \ll 1$. In the first

approximation, $f_0(p)$ then reduces to the unperturbed Maxwellian distribution: $f_0 \propto e^{-\epsilon/T}$, $\bar{\epsilon} = 3T/2$, and

$$f_1 = -(eEl/T)f_0, \quad \gamma \ll 1. \quad (22.15)$$

The electric current generated in the gas is determined by the electron mobility

$$b = \frac{\bar{v}_z}{-eE} = \frac{1}{-eEN_c} \int v \cos \theta \cdot f d^3p = -\frac{1}{3eEN_c} \int v f_1 d^3p \quad (22.16)$$

where N_c is the electron number density. ‡ A simple calculation with f_1 from (22.15) gives for the mobility in a weak field

$$b_0 = 2^{3/2}l/3\pi^{1/2}(mT)^{1/2}. \quad (22.17)$$

This expression satisfies, as it should, the Einstein relation $D = bT$, where D is the diffusion coefficient (11.10).

The significance of the inequality $\gamma \ll 1$ as the criterion of a weak field can be understood from the following simple arguments. It is evident that the influence of the field on the electron distribution will be weak so long as the energy acquired by an electron in its mean free time is small compared with that which it loses to an atom in a collision. The former energy is eEl , and the latter is

$$\delta\epsilon \sim V\delta P \sim V_p \sim V(T/M) \vee (Tm),$$

where P and V are the momentum and speed of the atom; the change δP is of the order of the electron momentum. The criterion follows from a comparison of the two expressions.

In the opposite case of strong fields ($\gamma \gg 1$), we find †

$$f_0(p) = A \exp(-3\epsilon^2/\gamma^2 T^2) \quad (22.18)$$

$$A = 3^{3/4}N_e/2^{3/2}\pi\Gamma\left(\frac{3}{4}\right)(m\gamma T)^{3/2} \quad (22.19)$$

$$f_1 = -6\sqrt{(m/M)}\epsilon f_0/T\gamma$$

The mean electron energy is

$$\bar{\epsilon} = \frac{2}{\pi}\sqrt{\left(\frac{2M}{3m}\right)}\Gamma^2\left(\frac{5}{4}\right)eEl = 0.43eL\sqrt{(M/m)} \quad (22.20)$$

and the electron mobility

$$b = 4\Gamma\left(\frac{5}{4}\right)l^{1/2}/3^{3/4}\pi^{1/2}(mM)^{1/4}(eE)^{1/2} \quad (22.21)$$

It remains to ascertain the condition for the expansion (22.7) to converge. For this purpose, we note that its successive terms are related in order of magnitude by

$$eEf_{n-1}/mv \sim vf_n/l : \quad (22.22)$$

¹† This is always true at sufficiently low electron temperatures, since for slow particles the crosssection tends to a limit independent of the energy (see QM, § 132).

‡ Because of the orthogonality of different Legendre polynomials, only the term f_0 out of all those in the expansion (22.7) contributes to the normalization integral, and only $f \cdot \cos \theta$ contributes to $\bar{v}_z$.

after substitution of (22.7), multiplication by $P_n(\cos \theta)$, and integration over $d \cos \theta$, the term in f_{n-1} remains on the left-hand side of the transport equation, and the term in f_n in the collision integral. When $\gamma \ll 1$, the mean electron energy $\bar{\epsilon} \sim T$, and we have from (22.22)

$$f_n/f_{n-1} \sim eEl/T \ll (m/M)^{1/2} \ll 1.$$

In strong fields, with $\gamma \gg 1$, the mean energy $\bar{\epsilon} \sim eEI(M/m)^{1/2}$, so that again

$$f_n/f_{n-1} \sim (m/M)^{1/2} \ll 1$$

Thus the expansion is convergent, since m/M is small. ‡

15.2.3 §23. Fluctuations in a weakly ionized non-equilibrium gas

In this section we shall discuss fluctuations of the electron distribution function in a non-equilibrium steady state of a weakly ionized gas which is spatially homogeneous and is in a constant and uniform electric field $\mathbf{E}$.

Only the time correlation of the fluctuations, and not their spatial correlation, will be considered. Then it is appropriate to use, in place of the exact (fluctuating) space-varying distribution function $f(t, r, p)$, the function averaged over the whole volume of the gas,

$$f(t, \mathbf{p}) = \frac{1}{\mathcal{V}} \int f(t, \mathbf{r}, \mathbf{p}) d^3x \quad (23.1)$$

denoted in this section by the same letter $\mathbf{f}$ but without the argument $\mathbf{r}$; it fluctuates only with time. The function $\bar{f}(p)$ with respect to which f fluctuates is the distribution (22.8) found in the preceding section.

For the system in question, it is of most interest to find not the fluctuations of the distribution function itself but the related fluctuations of the electric current density $\mathbf{j}$. The correlation functions for these quantities are related by the obvious formula

$$\langle \delta j_\alpha(t) \delta j_\beta(0) \rangle = e^2 \int \langle \delta f(t, \mathbf{p}) \delta f(0, \mathbf{p}') \rangle v_\alpha v'_\beta d^3p d^3p' \quad (23.2)$$

where of course $\delta \mathbf{j}$ is the current density fluctuation averaged over the gas volume. †

The solution of the problem for a non-equilibrium gas is based on the general method given in §20. ‡ The correlation function $\langle \delta f(t, \mathbf{p}) \delta f(0, \mathbf{p}') \rangle$ satisfies (with respect to the variables t and $\mathbf{p}$) the transport equation (22.1), which here corresponds to the equation (20.13) in the general method. A similar equation is satisfied by the function

$$\mathbf{g}(t, \mathbf{p}) = \int \langle \delta f(t, \mathbf{p}) \delta f(0, \mathbf{p}') \rangle \mathbf{v}' d^3p' \quad (23.3)$$

and the required current correlation function can be expressed in terms of this:

$$\langle \delta j_\alpha(t) \delta j_\beta(0) \rangle = e^2 \int g_\beta(t, p) v_\alpha d^3p \quad (23.4)$$

Thus we arrive at the equation

$$\frac{\partial \mathbf{g}}{\partial t} - e \left(\mathbf{E} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \right) \mathbf{g} = \frac{1}{p^2} \frac{\partial}{\partial p} \left[p^2 B \left(\frac{v}{T} \mathbf{g} + \frac{\partial \mathbf{g}}{\partial p} \right) \right] - Nv \int [\mathbf{g}(t, p, \theta) - \mathbf{g}(t, p, \theta')] d\sigma \quad (23.5)$$

^{1†} Formula (22.18) is more simply derived by solving afresh equation (22.11) (with $T = 0$) than by taking the limit in (22.12).

‡ Note, however, that the corrections $f_2, f_3, \dots$ could not be determined by means of (22.1), since this equation is based on the Fokker-Planck approximation, in which quantities of higher order in m/M are neglected.

with B given by (22.3).

The transport equation (22.1) takes account of the collisions of electrons only with molecules, not with other electrons. There is therefore no mechanism here to establish a single-time correlation between electrons with different momenta, and the "initial" condition for the function $\mathbf{g}(t, \mathbf{p})$ is the same as in the equilibrium state. Since we are concerned with the fluctuation of the distribution function averaged over the whole volume of the gas, the constancy of the number of particles (electrons) has to be taken into account. [†] According to (20.17), we then have

$$\langle \delta f(0, \mathbf{p}) \delta f(0, \mathbf{p}') \rangle = \frac{1}{\mathcal{V}} \left[\bar{f}(\mathbf{p}) \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}') - \frac{1}{N_e} \bar{f}(\mathbf{p}) \bar{f}(\mathbf{p}') \right]$$

(where N_e is the electron density), and hence for the initial function

$$g(0, p) = \frac{1}{\mathcal{V}} \bar{f}(p)(v - V), \quad (23.6)$$

where V is the mean electron velocity in the state having the distribution $\bar{f}(p)$. This velocity is, of course, parallel to the field $\mathbf{E}$; we may write it as

$$\mathbf{V} = -eb\mathbf{E}, \quad (23.7)$$

where b is the mobility. The constancy of the total number of electrons signifies that $\int \delta f d^3p = 0$, and so

$$\int \mathbf{g}(t, \mathbf{p}) d^3p = 0 \quad (23.8)$$

Following the method described in § 19, we take the one-sided Fourier transform of (23.5), multiplying by $e^{i\omega t}$ and integrating with respect to t from 0 to ∞ . The term $e^{i\omega t} \partial \mathbf{g} / \partial t$ is integrated by parts with the initial condition (23.6) and the condition $g(\infty, p) = 0$. The result is

$$\begin{aligned} -i\omega \mathbf{g}^{(+)} - e(\mathbf{E} \cdot \partial / \partial \mathbf{p}) \mathbf{g}^{(+)} - \frac{1}{p^2} \frac{\partial}{\partial p} \left[\frac{mTp^3}{Ml} \left(\frac{v}{T} \mathbf{g}^{(+)} + \frac{\partial \mathbf{g}^{(+)}}{\partial p} \right) \right] \\ + N_e v \int [\mathbf{g}^{(+)}(\mathbf{p}) - \mathbf{g}^{(+)}(\mathbf{p}')] d\sigma = \frac{1}{\mathcal{V}} \bar{f}(\mathbf{p})(\mathbf{v} - \mathbf{V}) \end{aligned} \quad (23.9)$$

where

$$\mathbf{g}^{(+)}(\omega, \mathbf{p}) = \int_0^\infty e^{i\omega t} \mathbf{g}(t, \mathbf{p}) dt \quad (23.10)$$

^{1†} This averaging corresponds to an experiment in which the fluctuations of the total current in the gas are measured: such a fluctuation is equal to that of the averaged current density in a given direction, multiplied by the cross-section of the sample.

^{††} The study of this problem by P. J. Price (1959) was the first instance of a calculation of fluctuations in a non-equilibrium system. Here we shall follow the analysis by V. L. Gurevich and R. Katilyus (1965).

^{1†} As we are concerned only with the influence on fluctuations of the departure from equilibrium caused by the presence of the field, we neglect fluctuations of the total number of electrons resulting from ionization and recombination processes. These fluctuations may be strictly absent when all the electrons are formed by impurities with low ionization potential; the total number of electrons is then simply equal to the total number of impurity atoms. We also neglect fluctuations in the concentration of neutral molecules. The relative fluctuation of this concentration is certainly small in comparison with the corresponding quantity for electrons, since the electron density is much less than the molecular concentration.

From (23.9), this equation is to be solved with the added condition

$$\int \mathbf{g}^+(\omega, \mathbf{p}) d^3p = 0 \quad (23.11)$$

If the solution of (23.9) is known, the required spectral expansion of the current correlation function can be found by simple integration: we write

$$(\mathbf{j}_\alpha \mathbf{j}_\beta)_\omega = \int_{-\infty}^x dt \int e^{i\omega t} \langle \delta f(t, \mathbf{p}) \delta f(0, \mathbf{p}') \rangle v_\alpha v'_\beta d^3p d^3p'$$

and proceed exactly as in the derivation of (19.14), obtaining

$$(\mathbf{j}_\alpha \mathbf{j}_\beta)_\omega = e^2 \int \left\{ g_\beta^{(+)}(\omega, p) v_\alpha + g_\alpha^{(+)}(-\omega, p) v_\beta \right\} d^3p \quad (23.12)$$

We shall take the specific case of a constant mean free path l . In the equilibrium state, with no electric field, the function $\bar{f}$ is the equilibrium Maxwellian distribution $f_0(p)$. The solution of equation (23.9) is then

$$\mathbf{g}^{(+)} = \frac{\mathbf{p} f_0(p)}{p} \frac{l}{\mathcal{V}} \frac{1}{1 - i\omega l/v} \quad (23.13)$$

as is easily seen, since

$$\int (\mathbf{p} - \mathbf{p}') d\sigma = \sigma_t \mathbf{p} \quad (23.14)$$

If $\omega \tau_p \ll 1$ (where $\tau_p \sim l/v_T$ is the relaxation time as regards the direction of the momentum), we can neglect the term $-i\omega l/v$ in the denominator of (23.13). A calculation of the integral (23.12) then leads to the result

$$(\mathbf{j}_\alpha \mathbf{j}_\beta)_\omega = (2T\sigma/\mathcal{V}) \delta_{\alpha\beta}, \quad (23.15)$$

where $\sigma = e^2 N_e b_0$ is the conductivity of the gas in a weak field, and b_0 the mobility in a weak field, given by (22.17). The result (23.15) is, of course, in agreement with Nyquist's general formula for equilibrium fluctuations of the current (see SP 2, §78). For let us consider a cylindrical volume of gas parallel to the x -axis. Since the current density is already volume-averaged, the total current $J = j_x S$, where S is the cross-sectional area of the cylinder. From (23.15), we then have

$$(J^2)_\omega = 2T\sigma S^2/\mathcal{V} = 2T\sigma S/L = 2T/R \quad (23.16)$$

where $L = \mathfrak{V}/S$ is the length of the sample, and $R = L/\sigma S$ its resistance. [†] When $\mathbf{E} \neq 0$, equation (23.9) is solved by successive approximation, in the same way as (22.6), but whereas the latter equation determined a scalar function, (23.9) is

written for a vector function. The leading terms in the expansion of such a function (depending on the constant vector $\mathbf{E}$ and the variable vector $\mathbf{p}$) may be written as

$$\mathbf{g}^{(+)}(\omega, p) = h(\omega, p) \mathbf{n} + \mathbf{e} \{ g_0(\omega, p) + \mathbf{n} \cdot \mathbf{e} g_1(\omega, p) \} \quad (23.17)$$

with $g_1 \ll g_0$; here $n = p/p$, $e = E/E$. The function $\bar{f}(p)$ is

$$\bar{f}(p) = f_0(p) + n \cdot e f_1(p), \quad (23.18)$$

[†] In comparing with SP 2 (78.1), it must be remembered that $\hbar\omega \ll T$ and that by the condition $\omega\tau_F \ll 1$ there is no dispersion of the conductivity, so that $Z = R$.

with f_0 and $f_1 = eElf'_0/v$ as calculated in § 22.

We substitute (23.17)-(23.18) in (23.9) and separate the terms odd and even with respect to $\mathbf{p}$. Again assuming $\omega\tau_p \ll 1$, we find, collecting the odd terms,

$$(v/l) \{hn + g_1 e(n \cdot e)\} - e(e \cdot \partial g_0 / \partial \mathbf{p}) eE = f_0 v / \mathcal{V};$$

terms which are certainly small (in the ratio m/M) in comparison with those given are omitted. Hence

$$h(p) = lf_0(p)/\mathcal{V}, \quad g_1(\omega, p) = (eElm/p) \partial g_0(\omega, p) / \partial p \quad (23.19)$$

The terms even in $\mathbf{p}$ have to satisfy equation (23.9) only after averaging over the directions of p , in accordance with the fact that (23.17) gives only the leading terms in the expansion of the function sought. A straightforward calculation using the expressions (23.19) leads to the following equation for the function $g_0(\omega, p)$:

$$-i\omega g_0 + \frac{1}{p^2} \frac{\partial}{\partial p} (p^2 S) = \frac{1}{\mathcal{V}} \left\{ eEb f_0 + \frac{2eEl}{3p} \frac{\partial}{\partial p} (p f_0) \right\} \quad (23.20)$$

where

$$S = -\frac{1}{lM} \left(p^2 g_0 + mpT \frac{\partial g_0}{\partial p} \right) - \frac{e^2 E^2 l m}{3p} \frac{\partial g_0}{\partial p}$$

This is to be solved with the added condition

$$\int g_0(\omega, p) d^3 p = 0 \quad (23.21)$$

to which (23.11) reduces on substitution of (23.17).

When the function $\mathbf{g}^{(+)}$ is known, the required current correlation function is found by means of (23.12). Substituting the expansion (23.17) and making a simple transformation with the use of (23.19), we obtain

$$(\mathbf{j}_\alpha \mathbf{j}_\beta)_\omega = \delta_{\alpha\beta} \frac{2e^2 l}{3\mathcal{V}} \int v f_0 d^3 p - E_\alpha E_\beta \frac{2le^3}{3E} \int [g_0(\omega, p) + g_0(-\omega, p)] \frac{d^3 p}{p} \quad (23.22)$$

The term $-i\omega g_0$ in (23.20) becomes important when $\omega \sim mv/M$, i.e. when $\omega\tau_\epsilon \sim 1$, where τ_ϵ is the relaxation time as regards the electron energy. Thus the dispersion of the current fluctuations begins at these frequencies.

In the general case, equation (23.20) is very complicated. As an illustration, let us take the case of low frequencies ($\omega\tau_\epsilon \ll 1$) and strong fields satisfying the condition $\gamma \gg 1$, where γ is the parameter (22.13). Because of the latter condition, the function $f_0(p)$ is given by the expression (22.18). The calculation of the integral in the first term in (23.22) gives

$$\delta_{\alpha\beta} \frac{2^{3/2}}{3^{5/4} \Gamma(3/4)} \frac{N_e e^2 l}{\mathcal{V}} \left(\frac{eEl}{m} \right)^{1/2} \left(\frac{M}{m} \right)^{1/4}$$

In the second term in (23.22), we shall make only an estimate without numerical factors. Equation (23.20) (without the term $-i\omega g_0$) gives

$$g_0 \sim (eEl^2 M / \mathcal{V} p^2) f_0$$

The integral can then be estimated as

$$e^3 l E (g_0/p) p^3$$

The resulting expression for the current correlation function is

$$(\mathbf{j}_\alpha \mathbf{j}_\beta)_\omega = \frac{N_e e^2 l}{\mathcal{V}} \left(\frac{eEl}{m} \right)^{1/2} \left(\frac{M}{m} \right)^{1/4} \left[0.6 \delta_{\alpha\beta} - \beta \frac{E_\alpha E_\beta}{E^2} \right] \quad (23.23)$$

where $\beta \sim 1$ is a numerical constant.

15.2.4 §24. Recombination and ionization

The equilibrium degree of ionization in a partly ionized gas is established by various collisional ionization events and the converse recombination events between colliding charged particles. In the simple case where the gas contains, apart from electrons, only one type of ion, the process of establishment of ionization equilibrium is described by an equation of the form

$$dN_e/dt = \beta - \alpha N_r N_i \quad (24.1)$$

where β is the number of electrons formed per unit volume and per unit time in collisions of neutral atoms or through photo-ionization of atoms; this number is independent of the electron density N_e and ion density N_i present. The second term gives the decrease in the number of electrons due to recombination with ions; α is called the recombination coefficient.

The recombination process is usually very slow in comparison with the other processes of establishment of equilibrium in a plasma. This is because the formation of a neutral atom in an ion-electron collision requires the removal of the energy released (the binding energy of the electron in the atom). The energy may be radiated as a photon in radiative recombination; the slowness of the process is then due to the small quantum-electrodynamical emission probability. The energy

released may also be transferred to a third particle, a neutral atom; the slowness of the process is then due to the small probability of three-body collisions. The result is that it is often reasonable to consider recombination in conditions where the distribution of all particles may be regarded as Maxwellian.

In equilibrium, the derivative dN_e/dt is zero. It follows that the quantities α and β in (24.1) are related by

$$\beta = \alpha N_{0e} N_{0i} \quad (24.2)$$

where N_{0e} and N_{0i} are the equilibrium electron and ion densities given by the appropriate thermodynamic formulae; see SP 1, § 104. †

The coefficient of radiative recombination is calculated directly from the recombination cross-section σ_{rec} in a collision between an electron and an ion at rest (the speed of the ion is negligible in comparison with that of the electron):

$$\alpha = \langle v_e \sigma_{\text{rec}} \rangle, \quad (24.3)$$

where the averaging is over the Maxwellian distribution of electron speeds v_e ; see Problem 1.

Radiative recombination is, however, important only in a sufficiently rarefied gas, when three-body collisions are entirely negligible. In a less rarefied gas, the principal mechanism is recombination involving a third particle, a neutral atom, and it is this mechanism that we shall consider in more detail.

In collisions with atoms, the energy of the electron changes by small amounts. The recombination process therefore begins with the formation of a highly excited atom, and the electron gradually "descends" to lower and lower levels in further collisions of this atom. This type

of process may be regarded as a "diffusion in energy" of the captured electron, and so the Fokker-Planck equation may be applied to it (L. P. Pitaevskii, 1962).

Let us consider the distribution function of the captured electrons with respect to their (negative) energies ϵ . The most important "diffusion" is naturally in the energy range $|\epsilon| \sim T$. The temperature here must always be treated as small in comparison with the ionization potential I of the atoms; when $T \sim I$, the gas is almost completely ionized (cf. SP 1, § 104).

The Fokker-Planck equation is

$$\partial f / \partial t = -\partial s / \partial \epsilon, \quad s = -B \partial f / \partial \epsilon - A f. \quad (24.4)$$

As usual, the coefficient A can be expressed in terms of B by means of the condition that $s = 0$ when $f = f_0$, where f_0 is the equilibrium distribution. The flux s then becomes

$$s = -B f_0 \frac{\partial}{\partial \epsilon} (f / f_0) \quad (24.5)$$

The "diffusion coefficient" $B(\epsilon)$ is determined by the general rule as

$$B(\epsilon) = \frac{1}{2} \sum (\Delta \epsilon)^2 / \delta t \quad (24.6)$$

In radiative recombination, equilibrium of the state presupposes that of the radiator in the plasma.

where $\Delta \epsilon$ is the change in the excitation energy of the atom in a collision with an unexcited atom; the calculation of $B(\epsilon)$ from this formula involves solving the mechanical problem of the collision and then averaging with respect to the velocity of the unexcited atom (see Problem 2).

To find the function $f_0(\epsilon)$, we note that the equilibrium distribution with respect to momenta and coordinates for an electron in the Coulomb field of a charge ze (the ion charge) is given by Boltzmann's formula:

$$f_0(\mathbf{p}, \mathbf{r}) = (2\pi m T)^{-3/2} e^{-\epsilon/T}, \quad \epsilon = p^2/2m - ze^2/r \quad (24.7)$$

(see below concerning its normalization); the motion of the electron with $|\epsilon| \sim T \ll I$ is quasi-classical, and this allows us to use the classical expression for the energy ϵ . The distribution function with respect to ϵ is therefore

$$f_0(\epsilon) d\epsilon = (2\pi m T)^{-3/2} e^{|\epsilon|/T} \tau(\epsilon) d\epsilon \quad (24.8)$$

where $\tau(\epsilon)$ is the volume in phase space corresponding to the range $d\epsilon$:

$$\tau(\epsilon) = \int \delta \left(|\epsilon| + \frac{p^2}{2m} - \frac{ze^2}{r} \right) d^3x d^3\vec{p} \quad (24.9)$$

Replacing $d^3x d^3p$ by $4\pi r^2 dr \cdot 4\pi p^2 dp$ and carrying out the integration, we find

$$\tau(\epsilon) = \sqrt{2} \pi^3 (ze^2)^3 m^{3/2} / |\epsilon|^{5/2} \quad (24.10)$$

To formulate the conditions which determine the appropriate solution of equations (24.4) and (24.5), it is convenient to suppose that the electron density present in the gas is $N_e \gg N_{0e}$; then we can neglect the rate of ionization β in (24.1), so that the decrease of N_e is due only to recombination. Under these conditions, the constant value of the flux s in the stationary solution of (24.4) gives directly the value of the recombination coefficient ($s = \text{constant} = -\alpha$) if $f(\epsilon)$ is suitably normalized: at the highest levels ($|\epsilon| \ll T$) the electrons are in equilibrium with free electrons, and this means that we must have

$$f(\epsilon)/f_0(\epsilon) \rightarrow 1 \quad \text{as} \quad |\epsilon| \rightarrow 0, \quad (24.11)$$

and the normalization of $f_0(\epsilon)$ must correspond to one free electron per unit volume, as has been ensured in (24.7).

To find the second boundary condition (as $\epsilon \rightarrow -\infty$), we note that the distribution at deep levels of the excited atom is not perturbed by the presence of free electrons, and is independent of their number: it is proportional to the equilibrium number N_{0e} , not to the actual number N_e . When $N_e \gg N_{0e}$, this situation is expressed by the boundary condition

$$f(\epsilon)/f_0(\epsilon) \rightarrow 0 \quad \text{as} \quad |\epsilon| \rightarrow \infty \quad (24.12)$$

Integrating the equation $s = \text{constant}$ with the boundary condition (24.11), we have

$$f/f_0 = \text{constant} \times \int_0^{|\epsilon|} \frac{d|\epsilon|}{Bf_0} + 1$$

The constant is $-\alpha$ if it is determined so as to satisfy the condition (24.12). Thus we find as the final result

$$\frac{1}{\alpha} = \int_0^x \frac{d|\epsilon|}{Bf_0} = \frac{2T^{3/2}}{\pi^{3/2}(ze^2)^3} \int_0^x \frac{e^{-|\epsilon|/T} |\epsilon|^{5/2}}{B(-|\epsilon|)} d|\epsilon|. \quad (24.13)$$

This formula relates to a process in which the "third body" is an unexcited atom. If the gas is strongly ionized (which is still compatible with the condition $T \ll I$) and sufficiently dense, recombination with a second electron as the third body may become the principal process. The recombination rate then becomes proportional to $N_e^2 N_i$, so that the recombination coefficient itself, defined as before by (24.1), is proportional to N_e . Since the energy relaxation in electron collisions is quick, the method described above for calculating the recombination coefficient is inapplicable in this case.

PROBLEMS

Problem 1. Find the radiative recombination coefficient for capture of an electron to the ground state of a hydrogen atom at temperatures $T \ll I = e^4 m/2\hbar^2$, the ionization potential of this atom.

Solution. The cross-section for recombination of a slow electron with a proton at rest. to the ground level of the hydrogen atom, is

$$\sigma_{\text{rec}} = \frac{2^{10} \pi^2 (e^2/\hbar c) a_B^2/I^2}{3(2.71 \dots)^4 m^2 c^2 v_e^2}$$

where v_e is the speed of the electron, and $a_B = \hbar^2/m\epsilon^2$ the Bohr radius: see RQT. formulae (56.13) and (56.14). The mean value $\langle v_s^{-1} \rangle = (2m/\pi T)^{1/2}$. The result is, in accordance with (24.3).

$$\alpha = \frac{2^{10} \pi^{3/2}}{3(2.71)^4} \left(\frac{e^2}{\hbar c} \right)^3 \frac{a_B^3 I}{\hbar} \left(\frac{I}{T} \right)^{1/2} = 35 \left(\frac{e^2}{\hbar c} \right)^3 \frac{a_B^3 I}{\hbar} \left(\frac{I}{T} \right)^{1/2}$$

Problem 2. Determine the recombination coefficient given by (24.13), neglecting the influence of the electron binding in the excited atom on its collision with the unexcited atom, and assuming that the transport cross-section for these collisions is independent of the velocity.

Solution. The "diffusion coefficient" $B(\epsilon)$ is calculated as in §22; the result is

$$B(\epsilon) = (N/3m) \langle v_{\text{at}}^2 \rangle \langle \sigma_{\text{t}} \mathbf{P}^3 \rangle, \quad (1)$$

Where N is the density of atoms in the gas, m the electron mass and v_{at} the relative speed of the excited and unexcited atoms. The speeds v_a have a Maxwellian distribution, with the particle mass represented by the reduced mass $\frac{1}{2}M$ (where M is the mass of the atom); hence $(v_{\text{at}}^2) = 6T/M$. Next, p in (1) is the electron momentum in the field of the ion; the averaging of $\sigma_1 p^3$ is taken over the region of the electron phase space $\tau(\epsilon)$ corresponding to a given value of $|\epsilon|$. With $\sigma_1 = \text{constant}$, we find

$$\begin{aligned} (\sigma_1 p^3) &= \frac{\sigma_1}{\tau(\epsilon)} \int p^3 \delta \left(|\epsilon| + \frac{p^2}{2m} - \frac{ze^2}{r} \right) d^3x d^3p \\ &= \frac{32\sqrt{2}}{3\pi} \sigma_1 m |\epsilon|^{3/2} \end{aligned}$$

Thus

$$B = 64\sqrt{2}T\sigma_1 N |\epsilon|^{3/2} / 3\pi M,$$

and a calculation from (24.13) then gives finally

$$\alpha = 32\sqrt{(2\pi)m^{1/2}} (ze^2)^3 \sigma_1 N / 3MT^{5/2} \quad (2)$$

The neglect of the electron binding in the atom is legitimate if the perturbation frequency caused by the atom near the electron ($\sim d/\bar{v}_{\text{at}}$, where d is the atomic dimension) is large in comparison with the frequency of rotation of an electron with energy $|\epsilon| \sim T$. This leads to the condition $T \ll (e^2/d)(m/M)^{1/2}$

15.2.5 §25. Ambipolar diffusion

Let us consider the diffusion of charged particles in a weakly ionized gas. As in §22, the degree of ionization is assumed to be so small that collisions between charged particles may be neglected in comparison with those between charged particles and neutral atoms. Even under these conditions, the diffusion of the two types of charged particles (electrons and ions) is not independent, because an electric field arises in the diffusion process (W. Schottky, 1924).

The diffusion equations are the equations of continuity for the electrons (e) and the ions (i):

$$\left. \begin{aligned} \partial N_e / \partial t + \text{div } \mathbf{i}_e &= 0, \\ \partial N_i / \partial t + \text{div } \mathbf{i}_i &= 0, \end{aligned} \right\} \quad (25.1)$$

the fluxes being expressed in terms of the number densities of particles and their gradients by

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{i}_e &= -N_e b_e e \mathbf{E} - D_e \nabla N_e, \\ \mathbf{i}_i &= N_i b_i e \mathbf{E} - D_i \nabla N_i, \end{aligned} \right\} \quad (25.2)$$

where D_e and D_i are the diffusion coefficients and b_e and b_i the mobilities of the electrons and ions. † These are related by the Einstein formulae

$$D_e = T b_e, \quad D_i = T b_i, \quad (25.3)$$

which express the condition for the fluxes (25.2) to be zero in equilibrium. Using these relations and expressing the field in terms of its potential by $\mathbf{E} = -\nabla\varphi$, we can rewrite equations (25.1) as

$$\partial N_e / \partial t = D_e \text{div} [\nabla N_e - (e N_e / T) \nabla \varphi] \quad (25.4)$$

$$\partial N_i / \partial t = D_i \text{div} [\nabla N_i + (e N_i / T) \nabla \varphi] \quad (25.5)$$

To these we must add Poisson's equation for the potential:

$$\Delta\varphi = -4\pi e(N_i - N_e) \quad (25.6)$$

†The ion charge is taken to be $z_i = 1$, as is usually true when the degree of ionization of the gas is small.

The equations (25.4)-(25.6) are considerably simplified if the densities N_e and N_i have almost homogeneous distributions. We can then put $N_e \approx N_i \approx \text{constant} \equiv N_0$ in the coefficients of $\nabla\varphi$ in (25.4) and (25.5), and eliminate φ by means of (25.6). The result is

$$\frac{\partial N_e}{\partial t} = D_e \left[\Delta N_e - \frac{N_e - N_i}{a^2} \right], \quad (25.7)$$

$$\frac{\partial N_i}{\partial t} = D_i \left[\Delta N_i + \frac{N_e - N_i}{a^2} \right], \quad (25.8)$$

where $a^{-2} = 4\pi e^2 N_0 / T$, and a is the Debye length for electrons or ions; see §31 below. Although the electron and ion scattering cross-sections are in general of the same order of magnitude, their diffusion coefficients are quite different, because of the difference in their mean thermal speeds v_T :

$$D_e/D_i \sim v_{Te}/v_{Ti} \sim \sqrt{(M/m)}, \quad (25.9)$$

so that $D_e \gg D_i$. This results in some unusual features of the diffusion process. Let us consider the variation with time of a slight perturbation of the electron and ion densities, whose characteristic dimensions $L \gg a$. In the initial stage of the process, when the variable parts of the densities are $|\delta N_e| \sim |\delta N_i| \sim |\delta N_e - \delta N_i|$, the first terms on the right of equations (25.7) and (25.8) are small in comparison with the second terms:

$$\Delta N_e \sim \delta N_e / L^2 \ll (\delta N_e - \delta N_i) / a^2 \quad (25.10)$$

Noting also that from (25.9) $|\partial N_i / \partial t| \ll |\partial N_e / \partial t|$, we have

$$\frac{\partial}{\partial t} (\delta N_e - \delta N_i) = - (D_e / a^2) (\delta N_e - \delta N_i),$$

whence

$$\delta N_e - \delta N_i = (\delta N_e - \delta N_i)_0 \exp(-D_e t / a^2). \quad (25.11)$$

From this, we see that in a time $\tau_{e1} \sim a^2 / D_e$ the difference $|\delta N_e - \delta N_i|$ becomes small in comparison with δN_e and δN_i themselves, i.e. the gas becomes quasineutral.

The next stage of the process consists in the development of the electron distribution to reach the equilibrium form (for a given ion distribution), determined by the condition for the right-hand side of (25.7) to be zero:

$$\delta N_e - \delta N_i = a^2 \Delta N_e \approx a^2 \Delta N_i \sim (a^2 / L^2) \delta N_i. \quad (25.12)$$

This stage follows the diffusion equation (25.7), with the characteristic time $\tau_{e2} \sim L^2 / D_e$, which is small compared with the characteristic ion diffusion time $\tau_i \sim L^2 / D_i$; the ion distribution may therefore still be regarded as unaltered.

The final relaxation of the electron and ion density perturbations takes place according to (25.8), which after the substitution of (25.12) becomes

$$\partial N_i / \partial t = 2D_i \Delta N_i. \quad (25.13)$$

Thus, during a time $\sim \tau_i$, the electrons and ions diffuse together ($\delta N_e \approx \delta N_i$) with a diffusion coefficient twice that of the ions; this process is called ambipolar diffusion. Half of the coefficient is due to the intrinsic diffusion of the ions, and half to the electric field resulting from the accelerating electrons.

Lastly, let us note that equation (25.13) has a broader range of applicability than follows from the proof given. Even if the perturbation is not weak, the movement of the electrons quickly gives them a Boltzmann distribution in the field and equalizes the electron and ion densities, i.e. leads to quasi-neutrality. Then

$$N_e = N_i = N_0 e^{ex/T}, \quad e\varphi = T \log(N_i/N_0). \quad (25.14)$$

Substitution of (25.14) in (25.5) again gives (25.13), but without the assumption that the perturbation is small.

15.2.6 §26. Ion mobility in solutions of strong electrolytes

The equations given in § 25 are easily generalized to the case where ions of different kinds are present. They are also applicable to the movement of ions in solutions of strong electrolytes. † In the limit of infinite dilution of the solution (i.e. as its concentration tends to zero), the mobility of each kind a of ions tends to a constant limit $b_n^{(0)}$, and the diffusion coefficient correspondingly tends to

$$D_a^{(0)} = T b_a^{(0)}. \quad (26.1)$$

The present section is concerned with the calculation of the correction terms in the first order (with respect to the small concentration) for the ion mobilities in a weak solution. ‡ This also gives the correction terms for the conductivity of the solution. In an electric field $\mathbf{E}$, a force $e z_a \mathbf{E}$ acts on each ion, which thereby acquires a directed velocity $b_a e z_a \mathbf{E}$. The current density in the solution is therefore

$$\mathbf{j} = \mathbf{E} \sum_a e z_a N_a b_a e z_a,$$

where N_a is the concentration (number per unit volume) of ions of type a ; the conductivity is thus

$$\sigma = e^2 \sum_a N_a z_a^2 b_a. \quad (26.2)$$

The theory given below is based on the same ideas as that of the thermodynamic properties of plasmas and strong electrolytes, namely that around each ion there is formed an inhomogeneous distribution of charges (an ion cloud), which screens the field of the ion. The corresponding formulae have been derived for a plasma in SP 1, 8§78 and 79. The formulae for a solution of a strong electrolyte differ only in the presence of a permittivity $\epsilon \neq 1$ of the solvent, and will be given below.

The screening cloud alters the mobility of the ion because of two different effects. First, the movement of the ion in the external electric field changes the charge distribution in the cloud, and this causes an additional field on the ion. Second, the movement of the cloud causes a movement of the liquid and hence a "drift" of the ion. The two corrections are called respectively relaxation and electrophoretic corrections.

¹⁺These are substances which dissociate completely into ions when dissolved

‡ The theory given below was worked out by P. Debye and E. Hückel (1923) and L. Onsager (1927).

Relaxation correction

Let us first calculate the corrections of the first kind. Since the screening cloud results from the existence of a correlation between the positions of different ions, it is a question of the influence of the external field $\mathbf{E}$ on the correlation functions.

We shall define the pair correlation function w_{ab} so that $N_a w_{ab}(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b) dV_a$ is the number of ions of type a in a volume dV_a around the point r_a , if there is one ion of type b at the point r_b ; the types a and b may be the same or different. Evidently

$$w_{ab}(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b) = w_{ba}(\mathbf{r}_b, \mathbf{r}_a), \quad (26.3)$$

and $w_{ab} \rightarrow 1$ as $|\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b| \rightarrow \infty$. In equilibrium, the functions w_{ab} depend only on the distances $|\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b|$; in an external field, this is not so. [†]

The correlation functions, like any distribution functions, satisfy equations in the form of continuity equations in the appropriate space—here, the configuration space of the two particles:

$$\partial w_{ab} / \partial t + \text{div}_a \mathbf{j}_a + \text{div}_b \mathbf{j}_b = 0. \quad (26.4)$$

where $\mathbf{j}_a$ and $\mathbf{j}_b$ are the probability fluxes for the a and b particles, and the suffixes to div show the variables ($\mathbf{r}_a$ or $\mathbf{r}_b$) with respect to which the differentiation is performed.

The flux $\mathbf{j}_a$ is

$$\mathbf{j}_a = -T b_a^{(0)} \nabla_a w_{ab} + b_a^{(0)} z_a e w_{ab} (\mathbf{E} - \nabla_a \varphi_b), \quad (26.5)$$

and $\mathbf{j}_b$ is the same with the suffixes a and b interchanged. The first term in (26.5) describes the diffusional motion of the type a ions, which occurs even in the absence of an external field. The second term is the ion flux density due to the forces exerted by the external field $\mathbf{E}$ and by the field $-\nabla_a \varphi_b$ at the point $\mathbf{r}_a$ resulting from the modified cloud, with the condition that a type b ion is at the

point $\mathbf{r}_b$. The potential $\varphi_b = \varphi_b(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b)$ of the latter field satisfies Poisson's equation:

$$\Delta_a \varphi_b(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b) = -(4\pi/\epsilon) \left[\sum_c e z_c N_c w_{cb}(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b) + e z_b \delta(\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b) \right] \quad (26.6)$$

The first term in the square brackets is the mean charge density of ions of all types in the cloud, the second term is the charge density localized (by the condition imposed) at the point $\mathbf{r}_b$. The factor $1/\epsilon$ gives the reduction of the field in the dielectric solvent.

Assuming the solution to be sufficiently dilute, we neglect triple correlations between the positions of the ions. In that approximation, the pair correlation functions w_{ab} are almost unity, and the quantities

$$\omega_{ab} = w_{ab} - 1 \quad (26.7)$$

are small. The potentials φ_a are of the same order of smallness. Neglecting second-order terms, we can rewrite (26.5) as

$$\mathbf{j}_a = b_a^{(0)} [-T \nabla_a \omega_{ab} + e z_a (1 + \omega_{ab}) \mathbf{E} - e z_a \nabla_a \varphi_b] \quad (26.8)$$

In equation (26.6), we can simply replace w_{ab} by ω_{ab} , since the solution is electrically neutral on average ($\sum e z_c N_c = 0$):

[†] The method of correlation functions as applied to the equilibrium state of a plasma (or an electrolyte) is described in SP 1. §79.

$$\Delta_a \varphi_b(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b) = -(4\pi/\epsilon) \left[\sum_c e z_c N_c \omega_{cb}(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b) + e z_b \delta(\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b) \right]. \quad (26.9)$$

In a uniform constant field $\mathbf{E}$, the functions w_{ab} are independent of time, and they involve the coordinates of the two points only in the form $\mathbf{r} = \mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b$, with $\nabla_a w_{ab} = -\nabla_b w_{ab}$. Substitution of $\mathbf{j}_a$ from (26.8) and $\mathbf{j}_b$ from the analogous expression in (26.4) now gives

$$\begin{aligned} T(b_a^{(0)} + b_b^{(0)}) \Delta \omega_{ab}(\mathbf{r}) + e z_a b_a^{(0)} \Delta \varphi_b(\mathbf{r}) + e z_b b_b^{(0)} \Delta \varphi_a(-\mathbf{r}) \\ = (z_a b_a^{(0)} - z_b b_b^{(0)}) e \mathbf{E} \cdot \nabla \omega_{ab}(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (26.10)$$

where all derivatives are taken with respect to $\mathbf{r}$.

Assuming the external field weak, we can solve the problem by successive approximation with respect to $\mathbf{E}$. In the zero-order approximation, when $\mathbf{E} = 0$, the potentials $\varphi_a^{(0)}(\mathbf{r})$ are even functions of $\mathbf{r}$. Since all the functions ω_{ab} and φ_a must tend to zero as $r \rightarrow \infty$, we then find from (26.10)

$$T(b_a^{(0)} + b_b^{(0)}) \omega_{ab}^{(0)} + e(b_a^{(0)} z_a \varphi_b^{(0)} + b_b^{(0)} z_b \varphi_a^{(0)}) = 0 \quad (26.11)$$

We seek the solution in the form

$$\omega_{ab}^{(0)}(\mathbf{r}) = z_a z_b \omega^{(0)}(\mathbf{r}), \quad e \varphi_a^{(0)}(\mathbf{r}) = -T z_a \omega^{(0)}(\mathbf{r}) \quad (26.12)$$

Then equation (26.11) is satisfied identically, and from (26.9) we obtain an equation for $\omega^{(0)}(\mathbf{r})$:

$$\Delta \omega^{(0)}(\mathbf{r}) - \omega^{(0)}(\mathbf{r})/a^2 = (4\pi e^2/\epsilon T) \delta(\mathbf{r}) \quad (26.13)$$

where

$$a^{-2} = (4\pi e^2/\epsilon T) \sum_c N_c z_c^2 \quad (26.14)$$

The solution of this is

$$\omega^{(0)}(r) = -\frac{e^2}{\epsilon T} \frac{e^{-r/a}}{r} \quad (26.15)$$

The quantity a is the Debye screening distance in the electrolyte solution. In the next approximation, we put

$$\varphi_a = \varphi_a^{(0)} + \varphi_a^{(1)}, \quad \omega_{ab} = \omega_{ab}^{(0)} + \omega_{ab}^{(1)} \quad (26.16)$$

where the superscript (1) marks small corrections to the zero-order values. Being scalars, all these corrections have the form $\mathbf{E} \cdot \mathbf{f}(\mathbf{r})$, where the $\mathbf{f}(\mathbf{r})$ are functions only of the magnitude r ; hence all the $\omega_{ab}^{(1)}$ and $\varphi_a^{(1)}$ are odd functions of $\mathbf{r}$. Since, from (26.3),

$$\omega_{ab}^{(1)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \equiv \omega_{ab}^{(1)}(\mathbf{r}) = \omega_{ba}^{(1)}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) \equiv \omega_{ba}^{(1)}(-\mathbf{r}),$$

it follows also that

$$\omega_{ab}^{(1)}(\mathbf{r}) = -\omega_{ba}^{(1)}(\mathbf{r}), \quad (26.17)$$

if we remember that everywhere $\mathbf{r} = \mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b$. If the ions a and b are of the same kind, an interchange of suffixes cannot alter the function $\omega_{ab}^{(1)}(\mathbf{r})$, and therefore (26.17) shows that such

$\omega_{aa}^{(1)} = 0$. Thus the corrections $\omega_{ab}^{(1)}$ occur only for the correlation functions of pairs of different ions.

To simplify the subsequent calculations, we shall take the case of an electrolyte with ions of only two kinds. Then only one function $\omega_{12}^{(1)}(\mathbf{r}) = -\omega_{21}^{(1)}(\mathbf{r})$ is non-zero, and substitution of (26.16) in Poisson's equation (26.9) gives

$$\Delta\varphi_2^{(1)}(\mathbf{r}) = -\frac{4\pi e}{\epsilon} z_1 N_1 \omega_{12}^{(1)}(\mathbf{r}), \quad (26.18)$$

where $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$. With the condition of electrical neutrality of the solution, and the above-mentioned symmetry properties of the functions, it is easily seen that the potential $\varphi_1^{(1)}(r)$ satisfies a similar equation, and therefore $\varphi_1^{(1)}(r) = \varphi_2^{(1)}(r)$.

On substituting (26.16) in (26.10), we retain only the term in $\omega_{12}^{(0)}$ on the right, obtaining

$$\begin{aligned} T(b_1^{(0)} + b_2^{(0)}) \Delta\omega_{12}^{(1)}(\mathbf{r}) + e(b_1^{(0)} z_1 - b_2^{(0)} z_2) \Delta\varphi_2^{(1)}(\mathbf{r}) \\ = (b_1^{(0)} z_1 - b_2^{(0)} z_2) e z_1 z_2 \mathbf{E} \cdot \nabla \omega^{(0)}(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (26.19)$$

The equations (26.18) and (26.19) are solved by Fourier analysis. A set of algebraic equations for the Fourier components $\omega_{12k}^{(1)}$ and $\varphi_{2k}^{(1)}$ is obtained, differing from (26.18) and (26.19) by the change of operators $\nabla \rightarrow ik, \Delta \rightarrow -k^2$. The Fourier component of the function $\omega^{(1)}(\mathbf{r})$ (26.15) on the right of (26.19) is

$$\omega_k^{(0)} = -\frac{e^2}{\epsilon T} \frac{4\pi}{k^2 + 1/a^2}$$

The final result for the Fourier component of the potential is

$$\varphi_{2k}^{(1)} = \frac{4\pi e^2 z_1 z_2 q}{\epsilon T a^2} \frac{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{E}}{k^2 (k^2 + 1/a^2) (k^2 + q/a^2)} \quad (26.20)$$

where

$$q = \frac{b_1^{(0)} z_1 - b_2^{(0)} z_2}{(z_1 - z_2) (b_1^{(0)} + b_2^{(0)})} \quad (26.21)$$

Since z_1 and z_2 have opposite signs, it is evident that $0 < q < 1$. The function $\varphi_2^{(1)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ is the additional potential at $\mathbf{r}_1$ when there is an ion 2 at $\mathbf{r}_2$. The corresponding field strength is

$$\mathbf{E}_2^{(1)}(\mathbf{r}) = -\nabla_1 \varphi_2^{(1)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = -\nabla_2^{(1)}(\mathbf{r}).$$

Its value for $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_2$ (i.e. $\mathbf{r} = \mathbf{0}$) gives the required field which acts on the ion 2 itself and thus alters its mobility.

The Fourier component $\mathbf{E}_{2k}^{(1)} = -i\mathbf{k}\varphi_{2k}^{(1)}$. Hence

$$\mathbf{E}_2^{(1)}(0) = \left[-\int i\mathbf{k}\varphi_{2k}^{(1)} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \right]_{r=0} = -\int i\mathbf{k}\varphi_{2k}^{(1)} d^3k / (2\pi)^3$$

Substitution of (26.20) here leads to the integral

$$\mathbf{I} = \int \frac{\mathbf{k}(\mathbf{k} \cdot \mathbf{E})}{k^2 (k^2 + 1/a^2) (k^2 + q/a^2)} \frac{d^3k}{(2\pi)^3}$$

The averaging over the directions of $\mathbf{k}$ replaces $\mathbf{k}(\mathbf{k} \cdot \mathbf{E})$ by $\frac{1}{3}k^2\mathbf{E}$, and the integral with respect to k is then calculated from the residues of the integrand at the poles $k = i/a$ and $k = i \vee q/a$:

$$I = Ea/12\pi(1 + \sqrt{q})$$

Thus the total field acting on the ion 2 is

$$\mathbf{E} + \mathbf{E}_2^{(1)}(0) = \left[1 - \frac{e^2 |z_1 z_2| q}{3\epsilon T a (1 + \sqrt{q})} \right] \mathbf{E} \quad (26.22)$$

A similar result is obtained for the field acting on the ion 1, as is evident from the symmetry of the expression (26.22) with respect to the suffixes 1 and 2. Multiplying the field (26.22) by $b^{(0)}ez$, we obtain the velocity acquired by the ion, and if this is written in the form $b\mathbf{E}$ it follows that the expression in square brackets gives the ratio $b/b^{(0)}$. Thus the required relaxation correction to the ion mobility is found to be

$$b_{\text{rei}} = -b \frac{e^2 |z_1 z_2| q}{3\epsilon T a (1 + \sqrt{q})} \quad (26.23)$$

This effect reduces the mobility.

Electrophoretic correction

Let us now go on to calculate the correction due to the movement of the solvent, formulating the problem as follows. We consider a particular ion in the solution, together with the screening cloud around it. This cloud carries an electric charge density $\delta\rho = \Sigma e z_a \delta N_a$, where δN_a is the difference between the density of ions of type a in the cloud and the mean value N_a in the solution. Thus forces with volume density $\mathbf{f} = \mathbf{E}\delta\rho$ act on the liquid carrying this cloud, in the presence of an electric field $\mathbf{E}$. These forces cause the liquid to move, which in turn carries along the central ion in question.

The distribution of ions in the cloud is related to the field potential φ there by Boltzmann's formula:

$$\delta N_a = N_a \left[e^{-z_a e \varphi / T} - 1 \right] \approx -z_a e \varphi N_a / T$$

Since the field $\mathbf{E}$ is weak, we may neglect the deformation of the ion cloud in the present problem. In a spherically symmetrical cloud, the potential is

$$\varphi = (ez_b/r) e^{-r/a}$$

where ez_b is the charge on the central ion, and a is determined by (26.14); cf. SP 1, §78. The total charge density in the cloud is therefore

$$\delta\rho = -\frac{e^2\varphi}{T} \sum_a N_a z_a^2 = -\frac{ez_b}{4\pi a^2} \frac{e^{-r/a}}{r} \quad (26.24)$$

Since the motion caused by the field $\mathbf{E}$ is slow, the liquid may be regarded as incompressible, and so

$$\text{div } \mathbf{v} = 0. \quad (26.25)$$

For the same reason, the term quadratic in the velocity may be omitted from the Navier-Stokes equation, which then reduces (for a steady motion) to

$$\eta \Delta v - \nabla P + \mathbf{f} = 0 \quad (26.26)$$

where P is the pressure and η the viscosity of the solvent.

Taking Fourier components in (26.25) and (26.26), we have

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_k = 0, \quad -\eta k^2 \mathbf{v}_k - ikP_k + \mathbf{E} \delta \rho_k = 0$$

Multiplying the second equation scalarly by ik , we find $P_k = -i\mathbf{k} \cdot \mathbf{E} \delta \rho_k / k^2$, and so

$$\mathbf{v}_k = \frac{\delta \rho_k}{\eta} \frac{k^2 \mathbf{E} - \mathbf{k}(\mathbf{k} \cdot \mathbf{E})}{k^4} \quad (26.27)$$

The Fourier component of the charge density (26.24) is

$$\delta \rho_k = -ez_b / (a^2 k^2 + 1) \quad (26.28)$$

The required velocity of the liquid at the point $r = 0$, where the central ion is situated, is given by the integral

$$\mathbf{v}(0) = \int \mathbf{v}_k d^3k / (2\pi)^3$$

Substitution of $\mathbf{v}_k$ from (26.27) and (26.28), and integration over the direction of k , gives

$$\mathbf{v}(0) = -\mathbf{E} \frac{ez_b}{(2\pi)^3 \eta} \frac{8\pi}{3} \int_0^\infty \frac{dk}{k^2 a^2 + 1}$$

and finally

$$\mathbf{v}(0) = -(ez_b / 6\pi\eta a) \mathbf{E}$$

This velocity is added to the velocity $ez_b b_b^{(0)} \mathbf{E}$ acquired by the ion through the direct action of the field. It is therefore clear that the required electrophoretic correction to the mobility is

$$b_{\text{el-ph}} = -1/6\pi a \eta \quad (26.29)$$

the same for ions of all types. The total correction is given by the sum of the two expressions (26.23) and (26.29). Both are negative, and through the factor $1/a$ are proportional to the square root of the concentration.

15.3 III Collisionless Plasma by Landau

15.3.1 §27. The self-consistent field

A WIDE field of application of transport theory occurs for plasmas, by which we shall mean completely ionized gases. † The thermodynamic theory of the equilibrium state of plasmas has been discussed in SP 1, §§78-80; SP 2, §85. Chapters III-V will be devoted to the transport properties of plasmas. To avoid complications having no fundamental significance, we shall (where necessary) regard the plasma as having only two components: electrons with charge $-e$, and positive ions of one type with charge ze .

As in ordinary gases, the plasma must be sufficiently rarefied if the transport equation is to be applicable to it; the gas must be almost ideal. However, because Coulomb forces decrease only slowly, this condition is more stringent for a plasma than for a gas of neutral particles. At present making no distinction between particles having different charges, we can write the condition for the plasma to be almost ideal as

$$T \geq e^2/\bar{r} \sim e^2 N^{1/3}, \quad (27.1)$$

where T is the temperature of the plasma, N the total number of particles per unit volume and $\bar{r} \sim N^{-1/3}$ the mean distance between them. This condition states that the mean interaction energy of two ions is small in comparison with their mean kinetic energy. It may be differently expressed by using the Debye length a of the plasma, defined by

$$1/a^2 = (4\pi/T) \sum_a N_a (z_a e)^2, \quad (27.2)$$

where the summation is over all types of ion; it may be noted (see SP 1, §78) that a determines the distance at which the Coulomb field of a charge in the plasma is screened. With $a \sim (T/4\pi N e^2)^{1/2}$ in (27.1), we have

$$e^2 N^{1/3}/T \sim \bar{r}^2/4\pi a^2 \ll 1 : \quad (27.3)$$

in a rarefied plasma, the mean distance between the particles must be small compared with the Debye length, i.e. the ion cloud around a charge must in fact

contain many particles. The small ratio (27.3) acts as a "gaseousness parameter" for the plasma.

The plasma will be assumed classical throughout Chapters III-V, except in §40. This implies the fulfilment of only a very weak condition: the plasma temperature must be high in comparison with the degeneracy temperature of its electron component,

$$T \gg \hbar^2 N^{2/3}/m \quad (27.4)$$

where m is the electron mass (cf. SP 1, §80).

The transport equation for each type of particle in the plasma (electrons and ions) is

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \dot{\mathbf{p}} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = C(f), \quad (27.5)$$

where f is the coordinate and momentum distribution function of the particles concerned, and C is their collision integral (with particles of any kind). The derivative $\dot{\mathbf{p}}$ is determined by the force acting on the particle. This force is in turn expressed in terms of the electric and magnetic fields, due to all the other particles, at the position of the particle considered. The following point now arises, however.

For neutral particles (atoms or molecules), because of the rapid decrease of the interaction forces, there are noticeable changes in their motion, interpretable as collisions, only at small impact parameters, of the order of atomic dimensions. Between such collisions, the particles move as if free; for this reason, $\dot{\mathbf{p}} = 0$ is assumed on the left-hand side of the transport equation for ordinary gases. In a plasma, however, because of the long-range Coulomb forces, a noticeable change in the motion of the particles occurs even at large impact parameters; the Coulomb forces are screened in the plasma only at distances $\sim a$, which by the condition (27.3) are large even in comparison with the distances between particles (see SP 1, §78, and § 31 below, Problem 1). However, not all such cases are to be interpreted as collisions in the transport equation. In transport theory, random collisions are the mechanism causing an approach to the state of equilibrium, with a corresponding increase in the entropy of the system. But collisions at large ($\geq a$) impact parameters cannot act as such a relaxation mechanism. The reason is that the interaction of two charged particles at such distances is actually a collective effect

¹†The term is due to I. Langmuir (1923), who laid the foundations of the systematic theoretical study of plasmas.

involving many particles. Accordingly, the effective field which can describe this interaction is also generated by a large number of particles, i.e. is macroscopic. The whole process then becomes a macroscopically certain and not a random one; such processes cannot cause the entropy of the system to increase. They must therefore be excluded from the scope of the term "collisions" as applied to the right-hand side of the transport equations.

This distinction corresponds to the representation of the exact microscopic values of the electric field e and the magnetic field h , acting on a particle in the plasma, as

$$\mathbf{e} = \mathbf{E} + \mathbf{e}', \quad \mathbf{h} = \mathbf{B} + \mathbf{h}', \quad (27.6)$$

where $\mathbf{E}$ and $\mathbf{B}$ are the fields averaged over regions containing many particles and having dimensions large compared with the distances between the particles but small compared with the Debye length. The terms $\mathbf{e}'$ and $\mathbf{h}'$ then describe the random fluctuations of the fields, which cause random changes in the motion of the particles, i.e. collisions.

In (27.6), the precise significance of $\mathbf{E}$ and $\mathbf{B}$ is that of being the mean fields at the position of a given particle. Since the plasma is assumed rarefied, the correlation between simultaneous positions of particles in it may be neglected. Then the position of each given particle is in no way distinctive, and so $\mathbf{E}$ and $\mathbf{B}$ may be regarded as just the fields averaged in the ordinary sense of macroscopic electrodynamics. These fields determine the Lorentz force which is to replace $\dot{\mathbf{p}}$ in (27.5).

In this chapter, the phenomena discussed will be those in which collisions between plasma particles are unimportant. Such a plasma is said to be collisionless. The precise conditions for collisions to be negligible depend in general on the specific formulation of the problem, but a necessary condition is usually that the effective collision frequency ν (the reciprocal of the mean free time of a particle) should be small in comparison with the frequency ω of variation of the macroscopic fields $\mathbf{E}$ and $\mathbf{B}$ in the process concerned:

$$\nu \ll \omega. \quad (27.7)$$

Because of this condition, the collision integral in the transport equation is small in comparison with $\partial f / \partial t$. Collisions may be neglected even if the particle mean free path $l \sim \bar{v} / \nu$ is large compared with the distance L over which the field varies (the field "wavelength"). Putting $1/L \sim k$, we can write this condition as

$$\nu \leq k\bar{v}. \quad (27.8)$$

The collision integral is small in comparison with the term $\mathbf{v} \cdot \nabla f$ on the left-hand side of the transport equation.

When the collision integral is neglected, the transport equations for the electron and ion distribution functions f_e and f_i become [†]

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial f_e}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f_e}{\partial \mathbf{r}} - e \left(\mathbf{E} + \frac{\mathbf{v} \times \mathbf{B}}{c} \right) \cdot \frac{\partial f_e}{\partial \mathbf{p}} &= 0 \\ \frac{\partial f_i}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f_i}{\partial \mathbf{r}} + ze \left(\mathbf{E} + \frac{\mathbf{v} \times \mathbf{B}}{c} \right) \cdot \frac{\partial f_i}{\partial \mathbf{p}} &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (27.9)$$

To these we must add the averaged Maxwell's equations

$$\text{curl } \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \quad \text{div } \mathbf{B} = 0, \quad \text{curl } \mathbf{B} = \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}, \quad \text{div } \mathbf{E} = 4\pi\rho, \quad (27.10)$$

[†]Strictly speaking, in the presence of a magnetic field the phase space of the particle is to be defined as the $(\mathbf{r}, \mathbf{P})$ space, where $\mathbf{P} = \mathbf{p} - e\mathbf{A}(\mathbf{r})/c$ is the generalized momentum. But $d^3x d^3P = d^3x d^7p$, since the addition of $\mathbf{A}$ changes only the zero of momentum at each point in space. We can therefore continue to relate the distribution function to $d^3x d^3p$.

" _

where ρ and $\mathbf{j}$ are the mean charge density and current density, which can be expressed in terms of the distribution functions by the obvious formulae

$$\left. \begin{aligned} \rho &= e \int (zf_i - f_e) d^3p \\ \mathbf{j} &= e \int (zf_i - f_e) \mathbf{v} d^3p \end{aligned} \right\} \quad (27.11)$$

Equations (27.9)-(27.11) form a coupled set of equations to determine simultaneously the distribution functions f_e, f_i and the fields $\mathbf{E}, \mathbf{B}$; the fields thus determined are said to be self-consistent. The self-consistent field was brought into the transport equations by A. A. Vlasov (1937); equations (27.9)-(27.11) are called the Vlasov equations.

In accordance with the foregoing discussion, the time variation of the distribution functions in a collisionless plasma with a self-consistent field is not associated with an increase of entropy, and therefore cannot in itself bring about the establishment of statistical equilibrium. This is also seen directly from the form of equations (27.9), in which $\mathbf{E}$ and $\mathbf{B}$ occur formally only as external fields imposed on the plasma.

Each of the transport equations (27.9) has the form

$$df/dt = 0 \quad (27.12)$$

where the total derivative signifies differentiation along the paths of the particles. The general solution of such an equation is an arbitrary function of all integrals of the motion of a particle in the fields $\mathbf{E}$ and $\mathbf{B}$.

15.3.2 §28. Spatial dispersion in plasmas

We can rewrite equations (27.10) in a form more usual in macroscopic electrodynamics, by including the electric induction $\mathbf{D}$ as well as the field $\mathbf{E}$. We define the electric polarization vector $\mathbf{P}$ by the relations

$$\partial \mathbf{P} / \partial t = \mathbf{j}, \quad \text{div } \mathbf{P} = -\rho; \quad (28.1)$$

the compatibility of these is guaranteed by the equation of continuity $\text{div } \mathbf{j} = -\partial \rho / \partial t$ (the definition will be further discussed later in this section). Then equations (27.10) become, with $\mathbf{D} = \mathbf{E} + 4\pi \mathbf{P}$,

$$\left. \begin{aligned} \text{curl } \mathbf{E} &= -(1/c) \partial \mathbf{B} / \partial t, & \text{div } \mathbf{B} &= 0, \\ \text{curl } \mathbf{B} &= (1/c) \partial \mathbf{D} / \partial t, & \text{div } \mathbf{D} &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (28.2)$$

In weak fields, the relation between the induction $\mathbf{D}$ and the field $\mathbf{E}$ is linear, [†] but even in ordinary media the relation is not instantaneous: the value of $\mathbf{D}(t, \mathbf{r})$ at a

time t depends in general on the values of $\mathbf{E}(t, \mathbf{r})$ not only at that instant but also at all previous instants (see *ECM*, 58). In a plasma, it is additionally a non-local relation: the value of $\mathbf{D}(t, \mathbf{r})$ at a point $\mathbf{r}$ depends on the values of $\mathbf{E}(t, \mathbf{r})$ not only at that point but in general also throughout the plasma. This is because a "free" (i.e. collisionless) movement of particles in the plasma is governed by the field values all along their trajectories.

The general linear relation between the functions $\mathbf{D}(t, \mathbf{r})$ and $\mathbf{E}(t, \mathbf{r})$ may be written (on the assumption that the unperturbed plasma is in a steady state)

$$D_\alpha(t, \mathbf{r}) = E_\alpha(t, \mathbf{r}) + \int_{-\infty}^t \int K_{\alpha\beta}(t-t', \mathbf{r}, \mathbf{r}') E_\beta(t', \mathbf{r}') d^3x' dt'$$

[†] The condition for the field to be weak will be formulated in § 29.

For a spatially homogeneous plasma, the kernel $K_{\alpha\beta}$ of the integral operator depends only on the difference $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$ of the arguments. Writing $\mathbf{r} - \mathbf{r}' = \boldsymbol{\rho}$, $t - t' = \tau$, we can rewrite the above relation as

$$D_{\alpha}(t, \mathbf{r}) = E_{\alpha}(t, \mathbf{r}) + \int_0^x \int K_{\alpha\beta}(\tau, \rho) E_{\beta}(t - \tau, \mathbf{r} - \rho) d^3\rho d\tau \quad (28.3)$$

In the usual way, an expansion as a Fourier series or integral allows the field to be represented as a set of plane waves in which $\mathbf{E}$ and $\mathbf{D}$ are proportional to $e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t)}$. For such waves, the relation between $\mathbf{D}$ and $\mathbf{E}$ becomes

$$D_{\alpha} = \epsilon_{\alpha\beta}(\omega, \mathbf{k}) E_{\beta}, \quad (28.4)$$

where the permittivity tensor is

$$\epsilon_{\alpha\beta}(\omega, \mathbf{k}) = \delta_{\alpha\beta} + \int_0^x \int K_{\alpha\beta}(\tau, \rho) e^{i(\omega\tau - \mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\rho})} d^3\rho d\tau \quad (28.5)$$

From this definition it follows at once that

$$\epsilon_{\alpha\beta}(-\omega, -\mathbf{k}) = \epsilon_{\alpha\beta}^*(\omega, \mathbf{k}) \quad (28.6)$$

Thus the non-localness of the relation between $\mathbf{E}$ and $\mathbf{D}$ has the result that the permittivity of the plasma depends on the wave vector as well as on the frequency. This is referred to as spatial dispersion, in the same way as the frequency dependence is called time dispersion or frequency dispersion.

Returning to equations (28.1) and (28.2), we may recall that in the formulation of Maxwell's equations for variable fields in ordinary media the introduction of the dielectric polarization $\mathbf{P}$ is accompanied by that of the magnetization $\mathbf{M}$, the mean microscopic current being divided into two parts $\partial\mathbf{P}/\partial t$ and $c \text{ curl } \mathbf{M}$; in a plane wave, these become $-i\omega\mathbf{P}$ and $i\mathbf{k}\mathbf{M}$. In the presence of spatial dispersion, however, when all quantities depend on k in any event, this division is inappropriate.

If the current $\mathbf{j}$ and the charge density ρ are fully included in the definition of the polarization $\mathbf{P}$, as in (28.1), the latter in general depends on both the electric field $\mathbf{E}$ and the magnetic field $\mathbf{B}$. The field $\mathbf{B}$ can be expressed in terms of $\mathbf{E}$ by means of the first pair of Maxwell's equations (28.2), which contain only these two quantities, i.e. (for a plane wave) from $\mathbf{k} \times \mathbf{E} = \omega\mathbf{B}/c$ and $\mathbf{k}\cdot\mathbf{B} = 0$. The polarization $\mathbf{P}$ is thereby expressed in terms of $\mathbf{E}$ alone, as is implied in the definition of $\epsilon_{\alpha\beta}$ by (28.3)-(28.5).

The dependence on the wave vector creates a distinctive direction in the function $\epsilon_{\alpha\beta}(\omega, k)$, namely that of its argument k . Hence, when spatial dispersion is present, the permittivity is a tensor even in an isotropic medium. The general form of such a tensor may be written

$$\epsilon_{\alpha\beta}(\omega, k) = \epsilon_q(\omega, k) (\delta_{\alpha\beta} - k_{\alpha}k_{\beta}/k^2) + \epsilon_l(\omega, k) k_{\alpha}k_{\beta}/k^2 \quad (28.7)$$

On multiplication by E_{β} , the first term in (28.7) gives a contribution to the induction $\mathbf{D}$ that is perpendicular to the wave vector, and the second term a contribution that is parallel to $\mathbf{k}$. For fields $\mathbf{E}$ perpendicular or parallel to $\mathbf{k}$, the relation between $\mathbf{D}$ and $\mathbf{E}$ reduces respectively to $D = \epsilon_1\mathbf{E}$ or $D = \epsilon_l\mathbf{E}$. The scalar functions ϵ_t and ϵ_l are called the transverse and longitudinal permittivities. They depend on two independent variables: the frequency ω , and the magnitude k of the wave vector. When $k \rightarrow 0$, the distinctive direction disappears, and the tensor $\epsilon_{\alpha\beta}$ must then reduce to the form $\epsilon(\omega)\delta_{\alpha\beta}$, where $\epsilon(\omega)$ is the ordinary scalar permittivity, which takes account only of frequency dispersion. Correspondingly, the limiting values of the functions ϵ_t and ϵ_l are equal:

$$\epsilon_t(\omega, 0) = \epsilon_l(\omega, 0) = \epsilon(\omega) \quad (28.8)$$

According to (28.6), the scalar functions ϵ_l and ϵ_t have the property

$$\epsilon_1(-\omega, k) = \epsilon_1^*(\omega, k), \quad \epsilon_t(-\omega, k) = \epsilon_t^*(\omega, k) \quad (28.9)$$

The spatial dispersion does not affect the properties of ϵ_1 and ϵ_t as functions of the complex variable ω . All the results (see *ECM*, 62) for the permittivity $\epsilon(\omega)$ of ordinary media without spatial dispersion remain valid for these functions.

In this chapter, we shall consider only isotropic plasmas. It must be emphasized that this implies not only the absence of an external magnetic field, but also the isotropy of the momentum distribution of the particles (in a plasma unperturbed by a field). Otherwise, further distinctive directions appear, and the tensor structure of $\epsilon_{\alpha\beta}$ is more complicated.

It has already been mentioned that the origin of the spatial dispersion in the plasma is related to the dependence of the "free" movement of the particles on the field values along their trajectories. In practice, of course, the movement of a particle at any point is significantly affected by the field values not along the whole trajectory but only along fairly short sections of it. The order of magnitude of these lengths may be governed by two processes: collisions, which perturb the free movement along the trajectory, and averaging of the oscillating field during the time of flight of the particle. The characteristic distance for the first process is the mean free path $l \sim \bar{v}/\nu$ of the particle, and that for the second process is the distance $\bar{v}/\omega$ which a particle moving with mean speed $\bar{v}$ traverses in one period of the field.

In the expression (28.3), the range of correlation between the values of $\mathbf{D}$ and $\mathbf{E}$ at different points in space corresponds to the distances r_{cor} over which the function $K_{\alpha\beta}(\tau, \rho)$ decreases significantly. We can therefore say that the order of magnitude of these distances is given by the smaller of l and $\bar{v}/\omega$, taken for the particles (electrons or ions) that have the higher value of it. † If $\nu \ll \omega$, then $\bar{v}/\omega$ is the smaller. and

$$r_{\text{cor}} \sim \bar{v}/\omega. \quad (28.10)$$

The spatial dispersion is considerable when $kr_{\text{cor}} \geq 1$, and disappears when $kr_{\text{cor}} \ll 1$; in the latter case, $e^{-ik \cdot \rho} \approx 1$ in (28.5), and the integral no longer depends on k . With r_{cor} from (28.10), we therefore find that the spatial dispersion is important for waves whose phase velocity ω/k is comparable with or less than the mean speed of the particles in the plasma. In the opposite limiting case, with

$$\omega \gg k\bar{v}, \quad (28.11)$$

the spatial dispersion is not significant.

It is important to note that the values of r_{cor} in plasmas may be large compared with the mean distances ($\sim N^{-1/3}$) between the particles. This is the condition that makes possible the macroscopic description of spatial dispersion in terms of the permittivity even when the dispersion is considerable. It has been mentioned in *ECM*, §83, that in ordinary media the correlation length is represented by the atomic dimensions, and hence the condition for the macroscopic theory to be applicable already requires the inequality $kr_{\text{cor}} \ll 1$ to be satisfied (the wavelength must be large in comparison with atomic dimensions); for this reason, the spatial dispersion in such media (as manifested, for example, in the natural optical activity) is never more than a small correction.

15.3.3 §29. The permittivity of a collisionless plasma

In the general case of arbitrary k , when spatial dispersion plays an important part, the calculation of the permittivity requires the use of the transport equation. We shall do so on the assumptions that the dielectric polarization of the plasma involves only electrons, and that the movement of the ions is unimportant (this is called an electron plasma). The condition for such assumptions to be admissible, and the generalization of the results, will be discussed in §31.

For a weak field, we look for the electron distribution function in the form $f = f_0 + \delta f$, where f_0 is the stationary isotropic homogeneous distribution function unperturbed by the field, and δf the change in it due to the field. Neglecting the second-order terms in the transport equation, we have

$$\frac{\partial \delta f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial \delta f}{\partial \mathbf{r}} = e \left(\mathbf{E} + \frac{\mathbf{v} \times \mathbf{B}}{c} \right) \cdot \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{p}}$$

In an isotropic plasma, the distribution function depends only on the magnitude of the momentum. For such a function, the direction of the vector $\partial f_0 / \partial \mathbf{p}$ is the same as that of $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$, and its scalar product with $\mathbf{v} \times \mathbf{B}$ is zero. In the linear approximation, therefore, the magnetic field does not affect the distribution function. The resulting equation for δf is

$$\frac{\partial \delta f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial \delta f}{\partial \mathbf{r}} = e \mathbf{E} \cdot \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{p}} \quad (29.1)$$

The function δf is assumed to be proportional to $\exp[i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)]$, like the field $\mathbf{E}$. Then (29.1) gives

$$\delta f = \frac{e \mathbf{E}}{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{v} - \omega)} \cdot \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{p}} \quad (29.2)$$

The condition for the field to be small results from the requirement that δf be small in comparison with f_0 . The coefficient of $\partial f_0 / \partial p$ in (29.2) is the amplitude of the momentum acquired by the electron in the field $\mathbf{E}$. This must be small in comparison with the mean momentum $m\bar{v}$ determined according to the distribution f_0 .

In an unperturbed plasma, the electron charge density is balanced at every point by the ion charges, and the current density is identically zero, since the plasma is isotropic. The charge density and current density in the plasma perturbed by the field are

$$\rho = -e \int \delta f d^3p, \quad \mathbf{j} = -e \int \mathbf{v} \delta f d^3p \quad (29.3)$$

These quantities, like δf , are proportional to $\exp[i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)]$, and according to (28.1) their relation to the dielectric polarization is given by

$$ik \cdot \mathbf{P} = -\rho, \quad -i\omega \mathbf{P} = \mathbf{j} \quad (29.4)$$

The method of taking the integrals in (29.3) requires more precise specification, however, since the function δf has a pole at

$$\omega = \mathbf{k} \cdot \mathbf{v} \quad (29.5)$$

In order to attach a meaning to the integral, we shall consider not a strictly harmonic field ($x e^{-i\omega t}$) but one which is applied with infinite slowness from $t = -\infty$ onwards. This description of the field corresponds to adding to its frequency an infinitesimal positive imaginary part, i.e.

¹this is correct for ϵ_l . For ϵ_l (if $I \ll \bar{v}/\omega$), because of particle diffusion along the field, $r_{\text{cor}} \sim (\bar{v}/\omega)^{1/2}$.

replacing ω by $\omega + i\delta$ with $\delta \rightarrow +0$: we then have $E \propto e^{-i\omega t} e^{t\delta} \rightarrow 0$ as $t \rightarrow -\infty$, and the unlimited increase of the field caused by the factor $e^{t\delta}$ is unimportant as $t \rightarrow \infty$, since the causality principle shows that it cannot affect what is observed at finite times t (whereas with $\delta < 0$ the field would have been large in the past, and this would prevent the use of the approximation linear in the field). Thus the rule for avoiding the poles (29.5) is expressed by

$$\omega \rightarrow \omega + i0 \quad (29.6)$$

this was first established by L. D. Landau (1946).

The rule (29.6) can also be arrived at from a different standpoint, by including in the transport equation an infinitesimal collision integral $C(f) = -\nu\delta f$. The addition of such a term on the right of (29.1) is equivalent to the change $\omega \rightarrow \omega + i\nu$ in the term $\partial\delta f/\partial t = -i\omega\delta f$; then, as $\nu \rightarrow 0$, we again have the rule (29.6). †

The integrations using the rule (29.6) involve integrals of the form

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{f(z)dz}{z - i\delta}, \quad \delta > 0$$

In such an integral, the path of integration in the complex z -plane passes below the point $z = i\delta$; as $\delta \rightarrow 0$, this is equivalent to an integration along the real axis but passing along an infinitesimal semicircle below the pole $z = 0$. The contribution to the integral from this semicircle is given by half the residue of the integrand, and the result is

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{f(z)}{z - i0} dz = P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{f(z)}{z} dz + i\pi f(0) \quad (29.7)$$

where P denotes the principal value of the integral. This may also be written symbolically

$$\frac{1}{z - i0} = P \frac{1}{z} + i\pi\delta(z), \quad (29.8)$$

where P now denotes that the principal values are taken in subsequent integrations.

Let us calculate the longitudinal part of the plasma permittivity, using the first relation (29.4), in which we substitute $\delta\rho$ from (29.3) and (29.2):

$$ik \cdot P = -e^2 E \cdot \int \frac{\partial f_0}{\partial p} \frac{d^3 p}{i(k \cdot v - \omega - i0)}$$

Let the field $\mathbf{E}$, and therefore $\mathbf{P}$, be parallel to $\mathbf{k}$. Then $4\pi\mathbf{P} = (\epsilon_f - 1)\mathbf{E}$. We thus arrive at the following formula for the longitudinal permittivity of a plasma having any stationary distribution function $f(p)$ (the suffix 0 to f will be omitted):

$$\epsilon_l = 1 - \frac{4\pi e^2}{k^2} \int k \cdot \frac{\partial f}{\partial p} \frac{d^3 p}{k \cdot v - \omega - i0} \quad (29.9)$$

We take the x -axis along k . Only f in the integrand in (29.9) depends on p_y and p_z . The formula may therefore be written differently by using the distribution function only with respect to $p_r = mv_r$:

$$f(p_x) = \int f(p) dp_y dp_z$$

Then

$$\epsilon_l = 1 - \frac{4\pi e^2}{k} \int_x^\infty \frac{df(p_x)}{dp_x} \frac{dp_x}{kv_x - \omega - i0} \quad (29.10)$$

In an isotropic plasma, $f(p_x)$ is an even function.

An important result may be noted immediately. The permittivity of a collisionless plasma is a complex quantity; the imaginary part of the integral (29.10) is determined by (29.7). This important result will be discussed further in §30; here, we shall consider the analytical properties of the function of the frequency ω that is defined by the integral (29.10). It is known from the general properties of the permittivity that this function can have singularities only in the lower half of the complex ω -plane (see ECM, §62); this is a consequence of the definition (28.5). It is, however, useful to see how it also follows directly from (29.10), and to elucidate the relationship between these singularities and the properties of the distribution function $f(p_v)$.

With a change of notation for the variable of integration, we can write the integral in (29.10) as

$$\int_G \frac{df(z)}{dz} \frac{dz}{z - \omega/k}. \quad (29.11)$$

The integration is taken along the real axis in the complex z -plane, but passing below the point $z = \omega/k$ (Fig. 7a). The integral (29.11) then defines an analytic function throughout the upper half-plane of ω also: for any such ω the pole $z = \omega/k$ is passed beneath, as it should be. In the analytical continuation of this function to the lower half-plane, however, the need to pass beneath the pole demands an appropriate shift of the contour of integration (Fig. 7b). But the function $df(z)/dz$, which is regular for real z , in general has singularities for complex z (at z_0 , say), some of which are in the lower half-plane. It is impossible to bring the integration contour C away from the pole $z = \omega/k$ when this pole comes close to one of the singularities z_0 , and C is pinched between the two points. Thus the function (29.11) has singularities in the lower half-plane of ω at values of ω/k that coincide with the singularities of $df(z)/dz$.

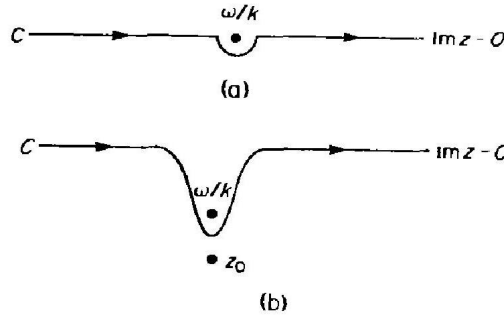


Fig. 7.

15.3.4 §30. Landau damping

It has already been noted that the permittivity of a collisionless plasma is a complex quantity $\epsilon_i = \epsilon'_i + i\epsilon''_i$. Separating the imaginary part by means of (29.8), we have

$$\epsilon''_1 = -4\pi^2 e^2 \int \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} \cdot \frac{\mathbf{k}}{k^2} \delta(\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}) d^3 p, \quad (30.1)$$

or

¹In this analysis, there are essentially two limits taken: those of small fields (linearization of the equation) and of $\nu \rightarrow 0$. It should be noted that the former limit is taken first. The necessity of this sequence arises from that of fulfilling the condition $\delta f \leq f_0$ in linearization; when $\nu = 0$, the increment δf tends to infinity at $k \cdot v = \omega$.

$$\epsilon_1'' = -\frac{4\pi^2 e^2 m}{k^2} \left[\frac{df(p_x)}{dp_x} \right]_{v_x=\omega/k} \quad (302)$$

The complex permittivity signifies that there is dissipation of the electric field energy in the medium. The formulae for the mean energy Q of a monochromatic electric field dissipated per unit time and volume are as follows. If this field is written in the complex form

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_{\omega k} e^{i(k \cdot \mathbf{r} - t)}$$

then in the general case of an anisotropic medium †

$$Q = \frac{i\omega}{8\pi} \cdot \frac{1}{2} [\epsilon_{\beta n}^*(\omega, \mathbf{k}) - \epsilon_{\alpha\beta}(\omega, \mathbf{k})] E_\alpha^* E_\beta \quad (30.3)$$

the dissipation is governed by the anti-Hermitian part of the tensor ϵ_{at} . If this tensor is symmetric, the part in question is just the imaginary part:

$$Q = (\omega/8\pi) \epsilon_{\alpha\beta}''(\omega, \mathbf{k}) E_\alpha E_\beta^* \quad (30.4)$$

In the case of a longitudinal field, only the imaginary part of the longitudinal permittivity remains:

$$Q = (\omega/8\pi) \epsilon_i^n |\mathbb{E}|^2 \quad (30.5)$$

Substitution of (30.2) then gives

$$Q = -|E|^2 \frac{\pi m e^2 \omega}{2k^2} \left[\frac{df(p_x)}{dp_x} \right]_{v_x=\omega/k} \quad (306)$$

Thus dissipation occurs even in a collisionless plasma, a phenomenon predicted by L. D. Landau (1946) and known as Landau damping. Being independent of collisions, it is fundamentally different from dissipation in ordinary absorbing media: the collisionless dissipation does not involve an increase of the entropy and is therefore a thermodynamically reversible process, an aspect to which we shall return in §35.

The mechanism of Landau damping is closely connected with spatial dispersion.

† This expression is derived from the general formula

$$Q = (\mathbf{E} \cdot \dot{\mathbf{D}})/4\pi$$

where the angle brackets denote time averaging; see *ECM*, §61. Here it is assumed that $\mathbf{E}$ and $\mathbf{D}$ are real. If E is written in the complex form, it has to be replaced in the expression for Q by $\frac{1}{2}(E + E^*)$. The corresponding vector $\mathbf{D}$ has the components

$$\frac{1}{2} \{ \epsilon_{\alpha\beta}(\omega, k) E_\beta + \epsilon_{\alpha\beta}(-\omega, -k) E_\beta^* \}$$

and $\dot{\mathbf{D}}$ has the components

$$2i\omega \{ -\epsilon_{\alpha\beta}(\omega, k) E_\beta + \epsilon_{\alpha\beta}(-\omega, -k) E_\beta^* \}$$

On averaging the product $\mathbf{E} \cdot \dot{\mathbf{D}}$ and using the property (28.6), we obtain (30.3); cf. the next-but-one footnote.

As is seen from (30.6), the dissipation is due to electrons whose speed in the direction of propagation of the electric wave is equal to the phase velocity of the wave, $v_x = \omega/k$; such electrons are said to be moving in phase with the wave. † The field is stationary with respect to these electrons, and can therefore do work on them that is not zero on averaging over time

as it is for other electrons with respect to which the field oscillates. It is instructive to examine this mechanism more closely, with a direct derivation of (30.6) that does not use the transport equation.

Let an electron be moving along the x -axis in a weak electric field

$$E(t, x) = \text{re} \left\{ E_0 e^{i(kx - \omega t)} e^{t\delta} \right\} \quad (30.7)$$

in that direction; the factor $e^{t\delta}$ describes the slow application of the field beginning at $t = -\infty$. We shall seek the speed $v_x \equiv w$ and the coordinate x of the moving electron in the form

$$w = w_0 + \delta w, \quad x = x_0 + \delta x,$$

where δw and δx are the corrections to the unperturbed motion $x_0 = w_0 t$ with constant speed w_0 . The equation of motion of the electron, linearized with respect to small quantities, is

$$\begin{aligned} m \frac{d\delta w}{dt} &= -e E(t, x_0) \\ &= -e \text{re} \left\{ E_0 e^{ik(w_0 - \omega/k)t} e^{t\delta} \right\}. \end{aligned}$$

Hence

$$\left. \begin{aligned} \delta w &= -\frac{e}{m} \text{re} \frac{E(t, x_0)}{ik(w_0 - \omega/k) + \delta} \\ \delta x &= -\frac{e}{m} \text{re} \frac{E(t, x_0)}{[ik(w_0 - \omega/k) + \delta]^2} \end{aligned} \right\} \quad (30.8)$$

The mean work done by the field on the electron per unit time is

$$\begin{aligned} q &= -e \langle w E(t, x) \rangle \\ &= -e \langle (w_0 + \delta w) E(t, x_0 + \delta x) \rangle \\ &\approx -e w_0 \left\langle \frac{\partial E}{\partial x_0} \delta x \right\rangle - e \langle \delta w \cdot E(t, x_0) \rangle \end{aligned}$$

or, in complex form, $\ddagger$

$$q = -\frac{1}{2} e \text{re} \{ w_0 \delta x \partial E^* / \partial x_0 + \delta w \cdot E^* \}$$

$\dagger$ Note that the difference $\omega - k \cdot v$ is the field frequency in a frame of reference moving with the electron. $\ddagger$ If two quantities A and B periodic in time are written in complex form ($x e^{-i\omega t}$), then

$$\langle \text{re } A \cdot \text{re } B \rangle = \frac{1}{4} ((A + A^*)(B + B^*)).$$

On averaging, the products AB and A^*B^* , which contain $e^{-2i\omega t}$ and $e^{2i\omega t}$, give zero, leaving

$$(\text{re } A \cdot \text{re } B) = \frac{1}{4} (AB^* + A^*B) = \frac{1}{2} \text{re} (AB^*).$$

Substitution of E , δx and δw from (30.7) and (30.8) gives, after a simple reduction,

$$q = \frac{e^2}{2m} |E|^2 \frac{d}{dw_0} \frac{w_0 \delta}{\delta^2 + k^2 (w_0 - \omega/k)^2}$$

It now remains to sum q over electrons with all initial momenta $p_x = mw_0$:

$$\begin{aligned}
Q &= \int_{-\infty}^{\infty} q f(p_x) dp_x \\
&= -\frac{1}{2} e^2 |E|^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{w_0 \delta}{\delta^2 + k^2 (w_0 - \omega/k)^2} \frac{df}{dp_x} dp_x
\end{aligned}$$

(with integration by parts). The passage to the limit is made by means of the formula

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{\delta}{\delta^2 + z^2} = \pi \delta(z) \quad (30.9)$$

and leads directly to (30.6).

In accordance with the reversibility of the collisionless dissipation, the thermodynamic conditions do not require Q to be positive as they do for true dissipation. The expression (30.6) is always positive when the distribution $f(p)$ is isotropic (see Problem). For anisotropic distributions, however, Q may be negative: the electrons then transfer energy to the wave on average, not from it. † Such cases are closely associated with the possible instability of the plasma (see §61); the condition $Q > 0$ (and hence $\epsilon'' > 0$) is thus the result of the stability of the plasma state only.

From the standpoint of the above-mentioned physical picture of Landau damping, the presence of the derivative df/dp_x in (30.6) may be intuitively interpreted as follows. The energy exchange with the field involves particles with speeds v_x close to ω/k ; those with $v_x < \omega/k$ gain energy from the wave, while those with $v_x > \omega/k$ lose energy to it. The wave loses energy if the former are rather more numerous than the latter.

PROBLEM

Show that the collisionless dissipation Q is always positive in an isotropic plasma.

Solution, In an isotropic plasma, f is a function only of $p^2 = p_x^2 + p_{\perp}^2$, where p_x and $p_{\perp}$ are the longitudinal and transverse (with respect to $\mathbf{k}$) components of $\mathbf{p}$. We write

$$\begin{aligned}
\frac{df(p_x)}{dp_x} &= \frac{d}{dp_x} \int_0^x f(p_x^2 + p_{\perp}^2) \pi d(p_{\perp}^2) \\
&= 2\pi p_x \int_0^x f'(p_x^2 + p_{\perp}^2) d(p_{\perp}^2)
\end{aligned}$$

and, since $f(p^2) \rightarrow 0$ as $p^2 \rightarrow x$, obtain

$$df(p_x)/dp_x = -2\pi p_x f(p_x^2)$$

so that $df/dp_x < 0$ when $p_x = \omega/k > 0$.

† The intuitive derivation of (30.6) given above does not depend on the isotropy of the distribution, nor does the expression (30.2) (see §32).

15.3.5 §31. Permittivity of a Maxwellian plasma

We can apply formula (29.10) to an electron plasma with an equilibrium (Maxwellian) electron distribution

$$f(p_x) = \frac{N_e}{(2\pi m T_e)^{1/2}} \exp\left(-\frac{p_x^2}{2m T_e}\right), \quad (31.1)$$

where T_e is the temperature of the electron gas; the quantities pertaining to electrons are given the suffix e with a view to the later consideration of the ion component also. The result is

$$\epsilon_1(\omega, k) = 1 + \frac{1}{(k\mathbf{l}_e)^2} \left[1 + F\left(\frac{\omega}{\sqrt{2}kv_{re}}\right) \right], \quad (31.2)$$

where the function $F(x)$ is defined by the integral [†]

$$\begin{aligned} F(x) &= \frac{x}{\sqrt{\pi}} \int_x^\infty \frac{e^{-z^2} dz}{z - x - i0} \\ &= \frac{x}{\sqrt{\pi}} \text{P} \int_x^\infty \frac{e^{-z^2} dz}{z - x} + i\sqrt{\pi}xe^{-x^2} \end{aligned} \quad (31.3)$$

and the parameters used are

$$v_{Te} = V(T_e/m), \quad a_e = V(T_e/4\pi N_e e^2). \quad (31.4)$$

The quantity v_{Te} is a mean thermal speed of the electrons; a_e is the Debye length, determined by their charge, temperature and density.

The limiting expressions for the function $F(x)$ for large and small x are easily found directly from the definition (31.3). For $x \gg 1$, we write

$$\frac{x}{\sqrt{\pi}} \text{P} \int_{-\infty}^x \frac{e^{-z^2} dz}{z - x} = -\frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-x}^x e^{-z^2} \left(1 + \frac{z}{x} + \frac{z^2}{x^2} + \dots \right) dz.$$

The integrals of the terms odd in x are zero; the remainder give

$$F(x) + 1 \approx -\frac{1}{2x^2} - \frac{3}{4x^4} + i\sqrt{\pi}xe^{-x^2}, \quad x \gg 1. \quad (31.5)$$

For $x \ll 1$, we first make the change of variable of integration $z = u + x$, and then expand in powers of x :

$$\begin{aligned} \frac{x}{\sqrt{\pi}} \text{P} \int_{-x}^x \frac{e^{-z^2} dz}{z - x} &= \frac{xe^{-x^2}}{\sqrt{\pi}} \text{P} \int_{-x}^\infty e^{-u^2 - 2ux} \frac{du}{u} \\ &\approx \frac{x}{\sqrt{\pi}} \text{P} \int_{-x}^\infty e^{u^2} \left(\frac{1}{u} - 2x \right) du \end{aligned}$$

The principal value of the integral of the first term (odd in u) is zero, and the second term gives

$$F(x) \approx -2x^2 + i\sqrt{\pi}x, \quad x \ll 1. \quad (31.6)$$

These formulae can be used to write down limiting expressions for the permittivity. At high frequencies, we have

[†] The various representations of $F(x)$, and detailed numerical tables of it, are given by V. N. Faddeeva and N. M. Terent'ev, *Tables of Values of the Function $w(z) = e^{-z^2} \left[t - (2i/\sqrt{\pi}) \int_0^t e^{t'^2} dt' \right]$ for Complex Argument*, Pergamon, Oxford, 1961. The function $w(x)$ which they tabulate is related to $F(x)$ by $F(x) = i\sqrt{\pi}xw(x)$. See also M. Abramowitz and I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions*, National Bureau of Standards, Washington, 1964; Dover Publishing Company, New York, 1965. Another convenient, and more comprehensive, tabulation is that of $Z(x) = F(x)/x$ by B. D. Fried and S. D. Conte, *The Plasma Dispersion Function*, Academic Press, New York, 1961.

$$\epsilon_1 = 1 - \frac{\Omega_e^2}{\omega^2} \left(1 + \frac{3k^2 v_{Te}^2}{\omega^2} \right) + i \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{\omega \Omega_e^2}{(k v_{Te})^3} \exp \left(-\frac{\omega^2}{2k^2 v_{Te}^2} \right) \quad \text{for } \omega/kv_{Te} \gg 1. \quad (31.7)$$

The parameter

$$\Omega_e = v_{Te}/a_e = \sqrt{(4\pi N_e e^2/m)} \quad (31.8)$$

is the plasma frequency or Langmuir frequency for electrons. In the case $\omega/kv_{Te} \gg 1$, spatial dispersion leads, as it should, to only small corrections in the permittivity, and the imaginary part of ϵ_1 is exponentially small, since in a Maxwellian distribution only an exponentially small fraction of the electrons have speeds $v_x = \omega/k \gg v_{Te}$. The limiting value of the permittivity, which is independent of k , is

$$\epsilon(\omega) = 1 - (\Omega_e/\omega)^2 \quad (31.9)$$

This expression applies to both the longitudinal and the transverse permittivity; see (28.8). It is easily derived by straightforward arguments without the use of the transport equation. As $k \rightarrow 0$, the wave field may be regarded as uniform, and the electron equation of motion $m\dot{\mathbf{v}} = -e\mathbf{E}$ then gives $\mathbf{v} = e\mathbf{E}/im\omega$, so that the current density due to the electrons is

$$\mathbf{j} = -(e^2 N_e / im\omega) \mathbf{E}$$

We also have

$$\mathbf{j} = -i\omega \mathbf{P} = -i\omega \frac{\epsilon(\omega) - 1}{4\pi} \mathbf{E}.$$

A comparison of the two expressions gives formula (31.9). In the opposite limiting case of low frequencies,

$$\epsilon_1 = 1 + \left(\frac{\Omega_e}{kv_{Te}} \right)^2 \left[1 - \left(\frac{\omega}{kv_{Te}} \right)^2 + i \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{\omega}{kv_{Te}} \right] \quad \text{for } \omega/kv_{Te} \ll 1 \quad (31.10)$$

It should be noted that the spatial dispersion eliminates the pole at $\omega = 0$ of the permittivity in an ordinary conducting medium, and that the imaginary part of the permittivity is relatively small (though not exponentially small) at low frequencies also, in this case because of the smallness of the electron phase volume in which the condition $k \cdot v = \omega$ is satisfied.

It has been shown in § 29 that the function $\epsilon_i(\omega)$ defined by the integral (29.10) has no singularity in the upper half-plane of ω , and its singularities in the lower half-plane are determined by those of $df(p_x)/dp_x$ as a function of the complex variable p_x . For a Maxwellian distribution, however, the function

$$df(p_x)/dp_x \propto p_x \exp(-p_x^2/2mT)$$

has no singularity at a finite distance anywhere in the complex p_x -plane, i.e. it is an entire function. Hence the permittivity of a Maxwellian collisionless plasma is also an entire function of ω , having no singularity for finite ω .

So far, we have considered only the contribution to the permittivity from the electron component of the plasma. The contribution from the ion component is calculated in exactly the same way, and the two contributions to $\epsilon_1 - 1$ are simply added. We thus have the evident generalization of (31.2):

$$\epsilon_1 - 1 = \frac{1}{(ka_e)^2} \left[F\left(\frac{\omega}{\sqrt{2}kv_{Te}}\right) + 1 \right] + \frac{1}{(ka_i)^2} \left[F\left(\frac{\omega}{\sqrt{2}kv_{Ti}}\right) + 1 \right]. \quad (31.11)$$

The suffixes e and i denote quantities pertaining to electrons and ions;

$$\left. \begin{aligned} v_{Ti} &= (T_i/M)^{1/2}, \quad a_i = v_{Ti}/\Omega_i = [T_i/4\pi N_i(z e)^2]^{1/2} \\ \Omega_i^2 &= 4\pi N_i(z e)^2/M \end{aligned} \right\} \quad (31.12)$$

where M and ze are the ion mass and charge. The expression (31.11) pertains to a "two-temperature" plasma, in which each component has the equilibrium distribution but with a different temperature, so that the electrons and ions are not in equilibrium with each other. This occurs naturally, in view of the large difference in mass which impedes the exchange of energy in electron-ion collisions.

The most usual situation is that where $T_i \leq T_e$ and $v_{Ti} \ll v_{Te}$. Since we also always have $\Omega_i \ll \Omega_e$, it is easy to deduce that when $\omega \gg kv_{Te} \gg kv_{Ti}$ the contribution of the ions is negligible and so formula (31.7) is valid. In the opposite limiting case, we have

$$\epsilon_i - 1 = \frac{1}{(ka_e)^2} + \frac{1}{(ka_i)^2} + i\sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{\omega}{(ka_i)^2 kv_{Ti}}, \quad (31.13)$$

$$\omega < kv_{Ti} < kv_{Te}.$$

The case where $kv_{Ti} \ll \omega < kv_{Te}$ will be discussed in §32.

All the calculations in §§30 and 31 have been made for the longitudinal part of the permittivity. The calculation of the transverse permittivity is of less interest, because the transverse field usually reduces to ordinary electromagnetic waves for which the frequency and the wave number are related by $\omega/k = c/\sqrt{\epsilon_t}$; then $\omega/k > c \gg v_{Te}$, i.e. $\omega \gg kv_{Te}$, so that the spatial dispersion is small and the permittivity is given by (31.9). For these waves there is also no Landau damping; since the phase velocity of the wave exceeds the speed of light, the plasma contains no particles capable of moving in phase with the wave. (The proof of this statement requires, strictly speaking, a relativistic treatment; see Problem 4.)

PROBLEMS

Problem 1. Find the potential of the electric field due to a small test charge e_1 at rest in the plasma.

Solution. When the plasma polarization is taken into account, the field is determined by the equation $\text{div } D = 4\pi e_1 \delta(r)$. For a constant field, the Fourier components of the induction and the potential are related by $D_k = \epsilon_l(0, k) E_k = -ik \in (0, k) \varphi_k$. Hence we have for φ_k the equation

$$ik \cdot D_k = k^2 \epsilon_t(0, k) \varphi_k = 4\pi e_1$$

Taking $\epsilon(0, k)$ from (31.13), we have

$$\varphi_k = \frac{4\pi e_1}{k^2 + 1/a^2}, \quad 1/a^2 = 1/a_e^2 + 1/a_i^2$$

The corresponding function of the coordinates is

$$\varphi = (e_1/r) e^{-r/a};$$

thus the permittivity (31.13) describes the screening of a static charge in accordance with SP1, §78. The condition for the charge to be small is $e_1 \ll Na^3e^4$, i.e. e_1 must be small in comparison with the charge on the plasma particles in a volume $\sim a^3$.

Problem 2. Calculate the transverse permittivity of a plasma.

Solution. With the electron polarization $P = -j/i\omega$ calculated by using j from (29.3), we obtain for the permittivity tensor †

$$\epsilon_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta} - \frac{4\pi e^2}{\omega} \int \frac{v_\alpha}{k \cdot v - \omega - i0} \frac{\partial f}{\partial p_\beta} d^3p. \quad (1)$$

The transverse part of ϵ_{mp} is separated as

$$\epsilon_t = \frac{1}{2} [\epsilon_{\alpha\alpha} - \epsilon_{\mu\beta} k_0 k_\theta / k^2],$$

and is given by the integral

$$\epsilon_1 = 1 - \frac{2\pi e^2}{\omega} \int v_1 \cdot \frac{\partial f}{\partial p_1} \frac{d^3p}{k \cdot v - \omega - i0} \quad (2)$$

where $p_1 = mv_1$ is the momentum component transverse to k . For a Maxwellian distribution f , integration over d^2p_1 gives finally

$$\epsilon_1 - 1 = \frac{\Omega_e^2}{\omega^2} F\left(\frac{\omega}{\sqrt{2}k v_{Te}}\right) \quad (3)$$

† This expression does not assume that the plasma is isotropic. with the function F given by (31.3); the ions make an analogous contribution to $\epsilon_1 - 1$. In the limiting cases,

$$\epsilon_1 - 1 = -\frac{\Omega_r^2}{\omega^2} \left[1 + \left(\frac{kv\tau_e}{\omega} \right)^2 \right] + i\sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{\Omega_r}{\omega k a_e} \exp\left(-\frac{\omega^2}{2k^2 v_{te}^2}\right) \quad (4)$$

$(\omega \geq kv\tau_e \gg kv_{tl}),$

$$\epsilon_t - 1 = -\frac{1}{(ka_e)^2} - \frac{1}{(ka_1)^2} + i\sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{\Omega_r}{\omega k a_e} \quad (5)$$

$(\omega < kv\tau_t \ll kv\tau_r).$

Problem 3. Determine the permittivity of an ultra-relativistic electron plasma, with the temperature $\Gamma \gg mc^2$ (V. P. Silin, 1960).

Solution. The transport equation retains its form (27.9) even in the relativistic case. accordingly, such formulae as (29.9) and (2) in Problem 2 remain valid. In the ultra-relativistic case, the electron speed $v \approx c$, the electron energy is cp , and the equilibrium distribution function is

$$f(p) = (N_e c^3 / 8\pi T_e^3) e^{cm} r_e$$

The longitudinal permittivity is found to be

$$\epsilon - 1 = \frac{4\pi e^2 c}{k T_e} \int_1^x \int_0^x \frac{f(p) \cos \theta \cdot 2\pi p^2 dp d \cos \theta}{kc \cos \theta - \omega - i0} \quad (6)$$

where θ is the angle between k and v . Integration of f over $2\pi \Gamma^2 dp$ gives N_r . and then integration over $d \cos \theta$, passing below the pole $\cos \theta = \omega/k$, leads to the result

$$\left. \begin{aligned} \epsilon'_i(\omega, k) - 1 &= \frac{4\pi N_r e^2}{k^2 T_e} \left[1 + \frac{\omega}{2kc} \log \left| \frac{\omega - ck}{\omega + ck} \right| \right] \\ \epsilon'_i(\omega, k) &= \pi\omega/2kc \\ &= 0 \end{aligned} \right\} \begin{array}{l} \text{when } \omega/k < c. \\ \text{when } \omega/k > c. \end{array} \quad (7)$$

Similarly, starting from (2), we find for the transverse permittivity

$$\left. \begin{aligned} \epsilon'_i(\omega, k) - 1 &= \frac{\pi e^2 N_r c}{\omega k T_e} \left[\left(1 - \frac{\omega^2}{c^2 k^2} \right) \log \left| \frac{\omega - ck}{\omega + ck} \right| - \frac{2\omega}{ck} \right] \\ \epsilon''_i(\omega, k) &= \pi \left(1 - \omega^2/c^2 k^2 \right) \end{aligned} \right\} \begin{array}{l} \text{when } \omega/k < c, \\ = 0 \quad \text{when } \omega/k > c. \end{array} \quad (8)$$

Problem 4. Find the imaginary part of ϵ for a non-relativistic ($T_r \ll mc^2$) electron plasma when $\omega/k \sim c \gg v_{1r}$ (V. P. Silin 1960).

Solution. From (29.9), which is valid for any electron speeds, we find by integration over $d \cos \theta$

$$\epsilon''(\omega, k) = \frac{8\pi^3 e^2 \omega}{k^3 T_r} \int_{p_m}^r \frac{f(p) p^2}{v} dp. \quad p_m = \frac{mc\omega}{\sqrt{(c^2 k^2 - \omega^2)}} \quad (9)$$

(the pole $\cos \theta = \omega/kv$ lies on the contour of integration with respect to $\cos \theta$ only if $\omega/kx < 1$; the lower limit of integration over dp therefore corresponds to $v = \omega/k$). The distribution function for $T_r \ll mc^2$, valid for all electron speeds, is

$$f(p) = \frac{N_r}{(2\pi m T_r)^{3/2}} \exp \left(\frac{mc^2}{T_e} - \frac{\epsilon(p)}{T_e} \right)$$

$$\epsilon = c(p^2 + m^2 c^2)^{1/2}$$

the value of the normalization integral being governed by the range $\epsilon - mc^2 \approx p^2/2m \sim T_r \ll mc^2$. In the integral (9), with $\omega/k \sim c \gg v_{re}$, the important range of values of p is that near the lower limit. Putting in the exponential

$$\begin{aligned} \epsilon(p) &\approx \epsilon(p_m) + [d\epsilon/dp]_m (p - p_m) \\ &= \epsilon(p_m) + (\omega/k) (p - p_m) \end{aligned}$$

and in the coefficient of the exponential $p \approx p_{m,v} \approx \omega/k$, and integrating with respect to $p - p_m$ from 0 to x , we obtain

$$\epsilon^2 t = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{\omega \Omega_r^2}{(kv_r^2)^3} \frac{1}{1 - (\omega/kc)^2} \exp \left\{ -\frac{mc^2}{T_r} \left[\frac{1}{\sqrt{[1 - (\omega/kc)^2]}} - 1 \right] \right\}.$$

This gives the form in which ϵ'' tends to zero as $\omega/kc \rightarrow 1$.

15.3.6 §32. Longitudinal plasma waves

Spatial dispersion makes possible the propagation of longitudinal electric waves in plasmas. The dependence of the frequency on the wave number (the dispersion relation) for these waves is given by the equation

$$\epsilon_f(\omega, k) = 0 \quad (32.1)$$

For, when $\epsilon_1 = 0$, the [ongitudinal electric field $\mathbf{E}$ has $\mathbf{D} = 0$. Putting also $\mathbf{B} = 0$, we satisfy identically the second pair of Maxwell's equations (28.2). There remains from the first pair $\text{curl } \mathbf{E} = 0$, which is satisfied because the field is longitudinal: $\text{curl } \mathbf{E} = \mathbf{i}k \times \mathbf{E} = 0$.

The roots of (32.1) are complex ($\omega = \omega' + i\omega''$). If the imaginary part of the permittivity $\epsilon_1'' > 0$, they lie in the lower half of the complex ω -plane, i.e. $\omega'' < 0$. The quantity $\gamma = -\omega''$ is the damping rate of the wave, since the damping is proportional to $e^{-\gamma}$. Of course, a propagating wave exists only if $\gamma \ll \omega'$: the damping rate must be much less than the frequency.

Such a root of equation (32.1) is obtained if we assume that

$$\omega \gg kv_{Te} \gg kv_{Ti} \quad (32.2)$$

Then the oscillations involve only electrons, and the function $\epsilon_1(\omega, k)$ is given by (31.7). The equation $\epsilon_1 = 0$ is solved by successive approximation. In the first approximation, omitting all terms which depend on k , we find that †

$$\omega = \Omega_e \quad (32.3)$$

i.e. the waves have a constant frequency independent of k . These are called plasma waves or Langmuir waves (I. Langmuir and L. Tonks 1926). They are long waves, in the sense that

$$ka_e \ll 1, \quad (32.4)$$

as follows from (32.2) with $\omega = \Omega_e$.

‡ The inclusion of ion oscillations would give only a slight shift of this frequency according to $\omega^2 = \Omega_r^2 + \Omega_1^2$.

To determine the k -dependent correction to the real part of the frequency, it is sufficient to put $\omega = \Omega_e$ in the correction term in ϵ' ; then

$$\omega = \Omega_e \left(1 + \frac{3}{2} k^2 a_e^2 \right) \quad (32.5)$$

(A. A. Vlasov, 1938).

The imaginary part of the frequency in this case is

$$\omega'' = -\frac{1}{2} \Omega_e \epsilon_1''(\omega, k), \quad (32.6)$$

and is exponentially small with ϵ_1'' . To determine it (and also the coefficient of the exponential), we have to substitute in ϵ_1^π the already corrected value (32.5), obtaining

$$\gamma = \sqrt{\frac{\pi}{8}} \frac{\Omega_e}{(ka_e)^3} \exp \left[-\frac{1}{2(ka_e)^2} - \frac{3}{2} \right] \quad (32.7)$$

(L. D. Landau, 1946). Since $ka_e \ll 1$, the damping rate for plasma waves is in fact found to be exponentially small. It increases with decreasing wavelength, and for $ka_e \rightarrow 1$ (when formula (32.7) is no longer valid) it becomes of the same order of magnitude as the frequency, so that the concept of propagating plasma waves ceases to be meaningful.

The above treatment relates, strictly speaking, only to an isotropic plasma, in which the permittivity tensor reduces, by (28.7), to two scalar quantities $\epsilon_{\mathbf{I}}$ and $\epsilon_{\mathbf{t}}$. In an anisotropic plasma, i.e. when the distribution function $f(p)$ depends on the direction of $\mathbf{p}$, there are no strictly longitudinal waves. Under certain conditions, however, "almost longitudinal" waves can propagate, in which the field component $\mathbf{E}^{(1)}$ transverse to $\mathbf{k}$ is small compared with the longitudinal component $\mathbf{E}^{(1)}$:

$$E^{(t)} \leq E^{(1)}. \quad (32.8)$$

To ascertain these conditions, we note first of all that, when $E^{(1)}$ is neglected, the equation $\text{div } D = 0$ gives

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{D} \approx k_\alpha \epsilon_{\alpha\beta} E_\beta^{(1)} = k_\alpha k_\beta \epsilon_{\alpha\beta} E^{(1)} / k = 0$$

This determines the dispersion relation for the waves, and may again be written in the form (32.1) if the "longitudinal" permittivity is defined as

$$\epsilon_l = k_\alpha k_\beta \epsilon_{\alpha\beta} / k^2 \quad (32.9)$$

this now depends on the direction of $\mathbf{k}$. However, $\epsilon_1 = 0$ does not imply that $\mathbf{D} = 0$; the quantity

$$D_\alpha \approx \epsilon_{\alpha\beta} E_\beta^{(1)} = \epsilon_{\alpha\beta} k_\beta E^{(1)} / k \equiv \epsilon_0 E^{(1)}$$

is not zero (whereas in an isotropic plasma $\epsilon_\alpha \equiv 0$ when $\epsilon_1 = 0$). Next, from Maxwell's equation $\text{curl } \mathbf{B} = (1/c) \partial \mathbf{D} / \partial t$ we estimate the magnetic field in the wave as

$$B \sim (\omega / ck) \epsilon E^{(1)}$$

and then obtain from the equation $\text{curl } \mathbf{E} = -(1/c) \partial \mathbf{B} / \partial t$ an estimate of the transverse electric field:

$$E^{(1)} \sim (\omega / ck) B \sim (\omega / ck)^2 \epsilon E^{(1)}. \quad (32.10)$$

Thus the condition (32.8) for the wave to be "almost longitudinal" is satisfied if the wave is "slow" in the sense that

$$\omega / k \ll c / \sqrt{\epsilon}. \quad (32.11)$$

Lastly, it may be noted that (29.10) remains valid for ϵ_1 defined by (32.9) in an anisotropic plasma, as is clear from its derivation from the expression

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{P} = (k_\alpha \epsilon_{\alpha\beta} E_\beta - \mathbf{k} \cdot \mathbf{E}) / 4\pi$$

with a longitudinal field $\mathbf{E}$. It is important here that the Lorentz force $e\mathbf{v} \times \mathbf{B}/c$ in the transport equation may be neglected in comparison with $e\mathbf{E}$ (although its product with $\partial f / \partial \mathbf{p}$ is not identically zero for an anisotropic function $f(\mathbf{p})$): the estimate (32.10) gives

$$|\mathbf{v} \times \mathbf{B}| / c E^{(1)} \sim \omega \bar{v} / kc^2 \leq 1.$$

This ratio is small both from the condition (32.11) for a "slow" wave and from the inequality $\bar{v} \ll c$.

PROBLEMS

Problem 1. Determine the dispersion relation for transverse oscillations of a plasma.

Solution. For transverse waves, the dispersion relation is given by $\omega^2 = c^2 k^2 / \epsilon_t$. The high-frequency oscillations ($\omega \gg kv_t$) correspond to ordinary electromagnetic waves. With ϵ from (31.9) (see also §31, Problem 2) we find

$$\omega^2 = c^2 k^2 + \Omega_{c'}$$

This is valid for any k ; there is no Landau damping, as already noted at the end of §31. For low-frequency oscillations ($\omega \leq k v_t$), the movement of the ions is again unimportant. For long waves ($ka_r \ll 1$), the principal term in the dispersion relation is

$$\omega = -i\sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{k^3 c^2 \tau_T}{\Omega_e^2};$$

the purely imaginary value of ω denotes aperiodic damping, so that wave propagation cannot occur.

Problem 2. Find the dispersion relation for plasma waves in an ultra-relativistic electron plasma (V. P. Silin 1960).

Solution. When $\omega \gg ck$, the formula in §31, Problem 3, gives

$$\epsilon(\omega, k) = 1 - \frac{\Omega_{e,rel}^2}{\omega^2} \left(1 + \frac{3k^2 c^2}{\omega^2} \right),$$

where

$$\Omega_{e,rel}^2 = 4\pi e^2 N_e c^2 / 3T_e$$

Equating to zero this expression for ϵ , we obtain the dispersion relation

$$\omega^2 = \Omega_{excl}^2 + \frac{3}{c} c^2 k^2 \quad (ck \ll \Omega_{e,rel}).$$

As k increases, this formula becomes invalid, but we still have $\omega > ck$ (and Landau damping is therefore absent). In the limit of large k , the frequency ω tends to ck according to

$$\omega = ck \left[1 + 2 \exp \left(-\frac{2k^2 c^2}{3\Omega_{e,rel}^2} - 2 \right) \right].$$

Problem 3. The same as Problem 2. but for transverse waves.

Solution. With the expression for $\epsilon_t(\omega, k)$ derived in § 31. Problem 3, we find the dispersion relation

$$\omega^2 = \Omega_{e,rel}^2 + ic^2 k^2 \text{ for } \omega \gg ck$$

The limiting expression for large k is

$$\omega^2 = 2\Omega_{e,rel}^3 + c^2 k^2.$$

Here too. we have $\omega > ck$, and so there is no damping.

15.3.7 §33. Ion-sound waves

As well as the plasma waves associated with electron oscillations, there can also propagate, in a plasma, waves in which both the electron density and the ion density oscillate significantly. This branch of the oscillation spectrum has weak damping (so that the concept of wave propagation has meaning) when the ion gas temperature in the plasma is small in comparison with the electron temperature:

$$T_i \leq T_e \quad (33.1)$$

It will be confirmed by the result of the calculation that the phase velocity of these waves satisfies the inequalities

$$v_{Ti} \leq \omega/k \leq v_{Te} \quad (33.2)$$

The smallness of the Landau damping under these conditions is obvious from the start: since the phase velocity is outside the principal ranges of the thermal speeds for both ions and

electrons, only a small fraction of the particles can move in phase with the wave and thus take part in energy exchange with it.

The contribution of the electrons to the permittivity under the conditions (33.2) is given by the limiting formula (31.10), and that of the ions by (31.7) with the electron quantities replaced by ion quantities. To the necessary accuracy, we have

$$\epsilon_1 = 1 - \frac{\Omega_i^2}{\omega^2} + \frac{1}{(ka_e)^2} \left[1 + i\sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{\omega}{kv_{Te}} \right] \quad (33.3)$$

Neglecting at first the relatively small imaginary part, we obtain from the equation $\epsilon_1 = 0$

$$\omega^2 = \Omega_i^2 \frac{k^2 a_e^2}{1 + k^2 a_e^2} = \frac{zT_e}{M} \frac{k^2}{1 + k^2 a_e^2} \quad (33.4)$$

in the latter expression we have used the fact that $N_e = \Sigma N_i$.

For the longest waves, with the condition $ka_e \ll 1$, the dispersion relation (33.4) reduces to

†

$$\omega = k\sqrt{(zT_e/M)}, \quad ka_e \ll 1. \quad (33.5)$$

The frequency is proportional to the wave number, as in ordinary sound waves. Waves having this dispersion relation are called ion-sound waves. The phase velocity of these waves is $\omega/k \sim (T_e/M)^{1/2}$, so that the condition (33.2) is in fact satisfied. Taking account of the imaginary part of ϵ_1 in the next approximation, we easily find the damping rate:

$$\gamma = \omega\sqrt{(\pi zm/8M)}. \quad (33.6)$$

This damping is due to the electrons. The contribution of the ions to γ is exponentially small, containing the factor $\exp(-zT_e/2T_i)$.

For shorter wavelengths, in the range $1/a_e \leq k \leq 1/a_i$ (which exists by virtue of the postulated inequality (33.1)), we have from (33.4) simply

$$\omega \approx \Omega_j. \quad (33.7)$$

These are ion waves analogous to electron plasma waves. It is easily verified that here again the conditions (33.2) are satisfied, and the damping is slight. As the wavelength decreases further, however, the damping increases, and for $ka_i \geq 1$ the ion contribution to the damping rate becomes comparable with the frequency, so that wave propagation ceases to have any meaning.

Figure 8 shows diagrammatically the spectrum (dispersion relation) for the low-frequency oscillations considered here (lower curve), in comparison with the spectrum of high-frequency electron plasma waves (upper curve). The broken lines mark the regions where the damping becomes large.

15.3.8 §34. Relaxation of the initial perturbation

Let us consider the problem of solving the transport equation with a selfconsistent field for given initial conditions (L. D. Landau, 1946). We shall take only the case of a purely potential electric field ($\mathbf{E} = -\nabla\varphi$) and zero magnetic field, assuming that only the electron distribution is perturbed (the ion distribution remaining unchanged).

^{1†} The law (33.5) was discovered by Langmuir and Tonks (1926); the need for the condition (33.1) was noted by G. V. Gordeev (1954).

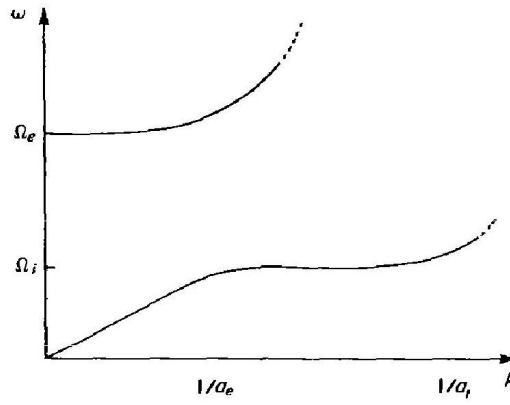


Fig. 8.

We shall also suppose that the initial perturbation is small: the initial electron distribution function is

$$f(0, \mathbf{r}, \mathbf{p}) = f_0(p) + g(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \quad (34.1)$$

where $f_0(p)$ is the equilibrium (Maxwellian) distribution, and $g \ll f_0$. The perturbation remains small at subsequent instants, of course, so that the equations may be linearized; we shall seek the distribution function in the form

$$f(t, \mathbf{r}, \mathbf{p}) = f_0(p) + \delta f(t, \mathbf{r}, \mathbf{p}) \quad (34.2)$$

For the small correction δf and the potential $\varphi(t, \mathbf{r})$ of the self-consistent field (a quantity of the same order of smallness) we find a set of equations comprising the transport equation

$$\frac{\partial \delta f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial \delta f}{\partial \mathbf{r}} + e \nabla \varphi \cdot \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{p}} = 0 \quad (34.3)$$

and Poisson's equation

$$\Delta \varphi = 4\pi e \int \delta f d^3 p \quad (34.4)$$

(the equilibrium electron charge is compensated by the ion charge).

Since these equations are linear and do not explicitly involve the coordinates, the required functions δf and φ may be expanded as Fourier integrals with respect to the coordinates, and equations may be written for each Fourier component separately. That is, it suffices to consider solutions having the form

$$\begin{aligned} \delta f(t, \mathbf{r}, \mathbf{p}) &= f_k(t, \mathbf{p}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \\ \varphi(t, \mathbf{r}) &= \varphi_k(t) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \end{aligned} \quad (34.5)$$

For such solutions, equations (34.3) and (34.4) become

$$\partial f_k / \partial t + i\mathbf{k} \cdot \mathbf{v} f_k + ie \varphi_k \mathbf{k} \cdot \partial f_0 / \partial \mathbf{p} = 0 \quad (34.6)$$

$$k^2 \varphi_k = -4\pi e \int f_k d^3 p \quad (34.7)$$

To solve these equations, it is sufficient to use a one-sided Fourier transformation, the transform $f_{\omega k}^{(+)}(p)$ of the function $f_k(t, p)$ being defined as

$$f_{\omega k}^{(++)}(\mathbf{p}) = \int_0^\infty e^{\omega t} f_k(t, \mathbf{p}) dt \quad (34.8)$$

The inverse transformation is given by

$$f_k(t, \mathbf{p}) = \int_{-\infty+i\sigma}^{\infty+i\sigma} e^{-i\omega t} f_{\omega k}^{(+)}(\mathbf{p}) \frac{d\omega}{2\pi} \quad (34.9)$$

where the integral is taken along a straight line in the complex ω -plane, parallel to and above the real axis ($\sigma > 0$), and also passing above all singularities of $f_{\omega k} \cdot \dagger$

We multiply both sides of (34.6) by $e^{-i\omega t}$ and integrate with respect to t . Noting that

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \frac{\partial f_k}{\partial t} e^{i\omega t} dt &= [f_k e^{i\omega t}]_0^\infty - i\omega \int_0^\infty f_k e^{i\omega t} dt \\ &= -g_k - i\omega f_{\omega k}^{(+)} \end{aligned}$$

where $g_k(p) \equiv f_k(0, p)$, and dividing both sides of the equation by $i(k \cdot v - \omega)$, we find

$$f_{\omega k}^{(+)} = \frac{1}{i(k \cdot v - \omega)} \left(g_k - ie\varphi_{\omega k}^{(+)} k \cdot \frac{\partial f_0}{\partial p} \right). \quad (34.10)$$

Similarly, from (34.7),

$$k^2 \varphi_{\omega k}^{(\tau)} = -4\pi e \int f_{\omega k}^{(+)}(p) d^3 p \quad (34.11)$$

Substitution of $f_{\omega k}^{(+)}$ from (34.10) in (34.11) gives an equation for $\varphi_{\omega k}^{(+)}$ alone, which yields the result

$$\varphi_{\omega k}^{(+)} = -\frac{4\pi e}{k^2 \epsilon_l(\omega, k)} \int \frac{g_k(\mathbf{p}) d^3 p}{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{v} - \omega)} \quad (34.12)$$

with the longitudinal permittivity ϵ_1 from (29.9). Again using the momentum component $p_x = mv_x$ along k , as in §29, we can rewrite this formula as

$$\varphi_{\omega k}^{(+)} = -\frac{4\pi e}{k^2 \epsilon_1(\omega, k)} \int_{-x}^\infty \frac{g_k(p_x) dp_x}{i(kv_x - \omega)} \quad (34.13)$$

where

$$g_k(p_x) = \int g_k(\mathbf{p}) dp_y dp_z$$

$\dagger$ The transformation (34.8), (34.9) is just the familiar Laplace transformation

$$f_\Gamma = \int_{\bar{n}}^\sigma f(t) e^{-pt} dt, \quad f(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-ix+\sigma}^{ix+\sigma} f_p e^{pt} dp,$$

in which p has been replaced by $-i\omega$ and the contour of integration correspondingly changed in the expression giving the function $f(t)$ in terms of its transform f_p .

In order to determine the time dependence of the potential by means of the inversion formula

$$\varphi_k(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-x+ix}^{\gamma+ir} e^{i\omega t} \varphi_{\omega k}^{(t+1)} d\omega \quad (34.14)$$

it is necessary first to establish the analytical properties of $\varphi_{\omega k}$ as a function of the complex variable ω .

An expression of the form

$$\varphi_{\omega k}^{(+)} = \int_0^x \varphi_k(t) e^{i\omega t} dt$$

as a function of the complex variable ω is meaningful only in the upper half-plane. The same applies correspondingly to the expression (34.13), where the integration is along a contour (the real p_x -axis) which passes below the pole $p_r = m\omega/h$. We have seen in §29 that the function of the variable ω defined by such an integral, when analytically continued into the lower half-plane, has singularities only at singularities of $g_a(p_s)$. We shall assume that $g_s(p_s)$ as a function of the complex variable p_x is an entire function (i.e. has no singularity at finite p_x); then the integral under consideration also defines an entire function of ω .

It has been noted in §31 that the permittivity ϵ_1 of a Maxwellian plasma is again an entire function of ω . Thus the function $\varphi_{\omega k}$, analytic throughout the ω -plane, is the quotient of two entire functions. Hence it follows that the only singularities (poles) of $\varphi_{\omega k}$ are the zeros of its denominator, i.e. of $\epsilon_1(\omega, h)$.

These arguments lead to the asymptotic form in which the potential $\varphi_k(t)$ decreases for large values of the time t . In the inversion formula (34.14), the integration is taken along a horizontal line in the ω -plane. However, if $\varphi_{\omega k}$ is taken to be the analytic function thus defined in the whole plane, we can move the contour of integration into the lower half-plane in such a way as not to cross any of the poles of the function. Let $\omega_k = \omega'_k + i\omega''_k$ be the root of $\epsilon_1(\omega, k) = 0$ that has the smallest (in magnitude) imaginary part, i.e. that lies nearest the real axis. The integration in (34.14) is taken along a contour moved sufficiently far beneath the point $\omega = \omega_k$ and passing round this point (and round other poles lying above it) in the manner shown in Fig. 9. Then only the residue at the pole ω_k is important in the integral (when t is large); the remaining parts of the integral, including that along the horizontal part of the contour, are exponentially small in comparison with that residue, since the integrand contains a factor $e^{-i\omega t}$ which decreases rapidly with increasing $|\text{im}\omega|$. Thus the asymptotic law of decrease of the potential is given by

$$\varphi_k(t) \propto e^{-i\omega_k t} e^{-|\omega''_k| t}, \quad (34.15)$$

i.e. the field perturbation is exponentially damped in the course of time, with damping rate $\gamma_k = |\omega''_k| \cdot \dagger$

For long-wavelength perturbations ($ka_e \ll 1$), the frequency ω'_k and the damping rate γ_k are the same as for plasma waves, and are given by (32.5) and (32.6). The damping rate for such perturbations is exponentially small. In the opposite case of short-wavelength perturbations, when $ka_e \sim 1$, the damping is very strong, and γ_k may even be much larger than $\omega'_k \dagger$

Lastly, let us consider the properties of the electron distribution function itself. The required function $f_k(t, p)$ is found by substituting (34.10) in the integral (34.9). Besides the poles in the lower half-plane that arise from $\varphi_{\omega k}$, the integrand has a pole at the point $\omega = k \cdot v$ on the real axis. This pole determines the asymptotic behaviour of the integral for large t . The residue there gives

$$f_k(t, p) \propto e^{-ik \cdot vt}. \quad (34.16)$$

[†]If the initial function $g_k(p_x)$ has a singularity, the competing values of ω include not only the zeros of $\epsilon_1(\omega, k)$ but also the singularities of φ_{0k} that result from the singularity of the integral in (34.13). In particular, if $g_k(p_x)$ has a singularity, for instance a break, on the real axis, then $\varphi_{\omega k}$ will have a singularity at a real value of $\omega = kv_x$. Such a perturbation is not damped at all in a collisionless plasma.

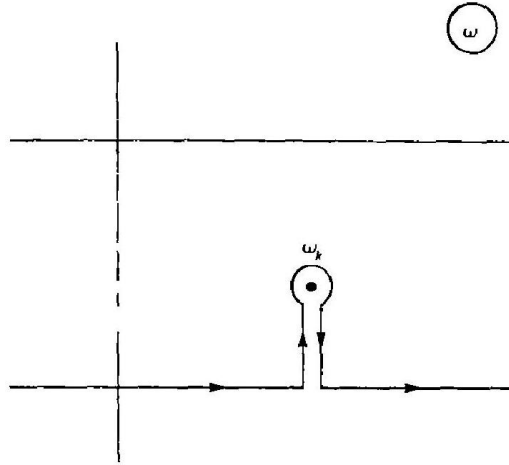


Fig. 9.

Thus the perturbation of the distribution function is not damped in the course of time, but the distribution becomes a more and more rapidly oscillating function of the velocity, the period of oscillation being $\sim 1/kt$. Hence the density perturbation, i.e. the integral $\int f_k d^3p$, is damped, like the potential φ_k .[†]

The variation of the distribution function in accordance with (34.16) pertains to times when the field may be regarded as damped; this formula corresponds simply to the free dispersal of the particles, each with its constant velocity. A function of the form

$$f(t, \mathbf{r}, \mathbf{p}) = g(\mathbf{p}) e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - k \cdot v t)} \quad (34.17)$$

is the solution of the free-particle transport equation

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} = 0 \quad (34.18)$$

with a given initial ($t = 0$) velocity distribution and a periodic ($\propto e^{ik \cdot r}$) coordinate distribution.

15.3.9 §35. Plasma echoes

The thermodynamic reversibility of Landau damping manifests itself in some unusual non-linear phenomena called plasma echoes. They result from the undamped oscillations of the distribution function (34.16) which remain after the collisionless relaxation of the density (and field) perturbations in the plasma. They are essentially kinematic in origin, and unconnected with the existence of a self-consistent electric field in the plasma. This will first of all be illustrated by the example of a gas of uncharged particles without collisions.

Let a perturbation in the gas be specified at the initial instant, such that the distribution function, remaining Maxwellian with respect to speeds at each point in space, varies periodically in the x -direction:

^{††} The question may be raised of the source of the large damping when the "phase velocity" will lie outside the main range of thermal speeds. In fact, however, the ratio ω/k cannot be called the phase velocity when $\gamma > \omega'$. If we again expand a function of the form $e^{-i\omega' t} e^{-\gamma t}$ as a Fourier integral, it will contain components with all frequencies from 0 to γ , and accordingly with "phase velocities" from 0 to $\sim \gamma/k$.

[‡] We may anticipate, however, by noting that the oscillatory nature of the distribution function for large 1 causes a large increase in the effective number of Coulomb collisions and thus accelerates the ultimate damping of the perturbation; see §41, Problem.

$$\delta f = A_1 \cos k_1 x \cdot f_0(p) \quad \text{at} \quad t = 0 \quad (35.1)$$

in this section, $p = mv$ denotes the x -component of the momentum, and the distribution function is assumed to be already integrated with respect to p_y and p_z . The perturbation of the gas density, i.e. the integral $\int \delta f dp$, varies in the same manner in the x -direction at $t = 0$. Subsequently, the perturbation of the distribution function varies according to

$$\delta f = A_1 \cos k_1(x - vt) \cdot f_0(p), \quad (35.2)$$

which corresponds to a free movement of each particle in the x -direction with its own speed v . The density perturbation, however, is damped (in a time $\sim 1/k_1 v_r$) because the integral $\int \delta f dp$ is made small by the speed-oscillatory factor $\cos k_1(x - vt)$ in the integrand. The asymptotic form of the damping at times $t \gg 1/k_1 v_T$ is given by

$$\delta N = \int \delta f dp \propto \exp\left(-\frac{1}{2}k_1^2 v_T^2 t^2\right) \quad (35.3)$$

the integral being estimated by the saddle-point method.

Now let the distribution function be again modulated at a time $t = \tau \gg 1/k_1 v_T$, with amplitude A and a new wave number $k_2 > k_1$. The resulting density perturbation is in turn damped (in a time $\sim 1/k_2 v_T$), but reappears at a time

$$\tau' = k_2 \tau / (k_2 - k_1), \quad (35.4)$$

since the second modulation creates in the distribution function for $t = \tau$ a second-order term of the form

$$\delta f^{(2)} = A_1 A_2 \cos(k_1 x - k_1 v \tau) \cos k_2 x \cdot f_0(p), \quad (35.5)$$

whose further development at $t > \tau$ changes it into

$$\begin{aligned} \delta f^{(2)} &= A_1 A_2 f_0(p) \cos[k_1 x - k_1 v t] \cos[k_2 x - k_2 v(t - \tau)] \\ &= \frac{1}{2} A_1 A_2 f_0(p) \{ \cos[(k_2 - k_1)x - (k_2 - k_1)vt + k_2 v \tau] \\ &\quad + \cos[(k_2 + k_1)x - (k_2 + k_1)vt + k_2 v \tau] \}. \end{aligned}$$

We now see that at $t = \tau'$ the oscillatory dependence of the first term on v disappears, so that this term makes a finite contribution to the perturbation of the gas density with wave number $k_2 - k_1$. The resulting echo is then damped in a time $\sim 1/v_T(k_2 - k_1)$, and the final stage of this damping follows a law similar to (35.3).

Let us now consider this effect in an electron plasma (R. W. Gould, T. M. O'Neil and J. H. Malmberg 1967). The mechanism is as before, but the particular law of damping is altered by the influence of the self-consistent field.

We shall suppose that the perturbations are created by pulses from an external potential φ^{ex} , due to "extrinsic" charges, applied to the plasma at times $t = 0$ and τ :

$$\varphi^{ex} = \varphi_1 \delta(t) \cos k_1 x + \varphi_2 \delta(t - \tau) \cos k_2 x \quad (35.6)$$

here it is assumed that $k_2 > k_1$ and $\tau \geq 1/k_1 v_T, 1/\gamma(k_1)$, with $\gamma(k)$ the Landau damping rate.

The perturbation of the distribution function ($f = f_0 + \delta f$) satisfies the collisionless transport equation, which with the second-order term is

$$\frac{\partial \delta f}{\partial t} + v \frac{\partial \delta f}{\partial x} + e \frac{\partial \varphi}{\partial x} \frac{df_0}{dp} = -e \frac{\partial \varphi}{\partial x} \frac{\partial \delta f}{\partial p}. \quad (35.7)$$

The potential φ of the field created in the plasma, including the "extrinsic" part φ^{ex} , satisfies the equation

$$\Delta (\varphi - \varphi^{ex}) = 4\pi e \int \delta f dp \quad (35.8)$$

We shall seek the solution of these equations as Fourier integrals:

$$\begin{aligned} \delta f &= \int f_{\omega'k} \cdot e^{i(k'x - \omega't)} \frac{d\omega' dk'}{(2\pi)^2} \\ \varphi &= \int \varphi_{\omega''k''} e^{i(k''x - \omega''t)} \frac{d\omega'' dk''}{(2\pi)^2} \end{aligned}$$

Substituting these expressions, multiplying the equations by $e^{-r(kx\omega t)}$, and integrating over $dxdt$, we obtain

$$(kv - \omega)f_{\omega k} + ek\varphi_{\omega k} df_0/dp = -e \int (k - k') \varphi_{\omega - \omega'; k - k'} \cdot \frac{df_{\omega'k}}{dp} \frac{d\omega' dk'}{(2\pi)^2} \quad (35.9)$$

$$-k^2 \varphi_{\omega k} = 4\pi e \int f_{\omega k} dp - k^2 \varphi_{\omega k}^{ex} \quad (35.10)$$

where

$$\varphi_{\omega k}^{ex} = \pi \varphi_1 [\delta(k + k_1) + \delta(k - k_1)] + \pi \varphi_2 [\delta(k + k_2) + \delta(k - k_2)] e^{i\omega\tau}$$

In the linear approximation, i.e. when the right-hand side of (35.9) is neglected, the solution of these equations is

$$f_{\omega k}^{(1)} = -e \frac{df_0}{dp} \frac{k}{kv - \omega} \varphi_{\omega k}^{(1)}, \quad \varphi_{\omega k}^{(1)} = \varphi_{\omega k}^{ex} / \epsilon_l(\omega, k), \quad (35.11)$$

where ϵ_l is the permittivity (29.10). This solution corresponds to perturbations damped from $t = 0$ and $t = \tau$, with respective damping rates $\gamma(k_1)$ and $\tau(k_2)$.

In the second approximation, we have to substitute (35.11) on the right of (35.9), obtaining for the second-order terms in the perturbations of the distribution function and the potential the equations

$$(kv - \omega)f_{\omega k}^{(2)} + ek\varphi_{\omega k}^{(2)} df_0/dp = dI_{\omega k}/dp \quad (35.12)$$

$$k^2 \varphi_{\omega k}^{(2)} = -4\pi e \int f_{\omega k}^{(1)} dp \quad (35.13)$$

where

$$I_{\omega k} = -e \int (k - k') \varphi_{\omega - \omega'; k - k'}^{(1)} f_{\omega'}^{(1)} \cdot d\omega' dk' / (2\pi)^2 \quad (35.14)$$

The effect under consideration, namely the echo with wave number $k_2 - k_1$, will be contained in the terms on the right of (35.12) which involve $\delta[k \pm (k_2 - k_1)]$. Let us collect together the terms of this kind in $I_{\omega k}$. At $t = \tau$, the perturbation $\varphi^{(1)}$ due to the pulse φ_1 applied at $t = 0$ is already damped. It is therefore evident that, on substituting (35.11) in (35.14), we have to take into account only the φ_2 term in $\varphi_{\omega k}^{(1)}$; the relevant terms, of the form

$$I_{\omega k} = I_{\omega}(k_1, k_2) \delta(k - k_2 + k_1) + I_{\omega}(-k_1, -k_2) \delta(k + k_2 - k_1), \quad (35.15)$$

are then obtained from the terms in $f_{\omega k}^{(1)}$ that contain φ_1 . After carrying out the integration over dk' in (35.14), we find as the result

$$I_{\omega}(k_1, k_2) = \frac{1}{4} e^2 \varphi_1 \varphi_2 k_1 k_2 \frac{df_0}{dp} \int_{-x}^x \frac{e^{i(\omega - \omega')}}{(k_1 v + \omega') \epsilon_1(\omega', k_1) \epsilon_1(\omega - \omega', k_2)'} \quad (35.16)$$

where the integration variable ω' is as usual to be understood as $\omega' + i0$.[†]

The integral (35.16) can be calculated on the basis of the assumption that τ is large ($\tau \gg 1/kv_T, 1/\gamma$). To do this we move the contour of integration into the lower

half of the complex ω' -plane; the contour must still pass above the poles and thus becomes "looped round" them. These are at the zeros of the functions ϵ_1 and at the point $\omega' = -k_1 v - i0$. The former have a non-zero negative imaginary part $-\gamma(k_1)$ or $-\gamma(k_2)$, and their contributions to the integral (the residues at the poles) are damped as $e^{-\gamma\tau}$ with increasing t . An undamped contribution comes only from the real pole $\omega' = -k_1 v - i0$. We thus have

$$I_{\omega}(k_1, k_2) = -e^2 \cdot \frac{1}{2} i\pi \frac{df_0}{dp} \frac{\varphi_1 \varphi_2 k_1 k_2 e^{i(\omega + k_1 v_1 v_1)}}{\epsilon_1(-k_1 v_2 k_1) \epsilon_1(\omega + k_1 v, k_2)} \quad (35.17)$$

Returning to the equations (35.12) and (35.13), and substituting $f_{\omega h}^{(2)}$ from the former in the latter, we find

$$\varphi_{\omega k}^{(2)} = -\frac{4\pi e}{k^2 \epsilon_1(\omega, k)} \int_{-\infty}^x \frac{dI_{\omega k}}{dp} \frac{dp}{kv - \omega - i0} \quad (35.18)$$

In calculating the derivative $dI_{\omega k}/dp$, only the exponential factor in (35.17) is to be differentiated, since $k_1 v_T \tau \gg 1$.

Now collecting the expressions (35.15)-(35.18) and applying an inverse Fourier transformation, we obtain the required echo potential with wave number $k_3 = k_2 - k_1$:

$$\varphi^{(2)}(t, x) = \text{re} \{ A(t) e^{ik_3 x} \}. \quad (35.19)$$

The amplitude $A(t)$ will be written in the asymptotic limit as $t - \tau \rightarrow \infty$. In that limit, the integral with respect to ω is determined by the residue of the integrand at the pole $\omega = k_3 v - i0$ only. The final result is

$$A(t) = -i\pi e^3 \varphi_1 \varphi_2 \tau \frac{k_1^2 k_2}{k_3^2} \int_{-x}^x \frac{df_0}{dp} \frac{e^{-ik_3(t-r')}}{\epsilon_1(k_3 v, k_3) \epsilon_1(-k_1 v, k_1) \epsilon_1(k_2 v, k_2)} \quad (35.20)$$

where $\tau' = k_2 \tau / k_3$.

This expression, the echo amplitude, is greatest at $t = \tau'$, and its maximum value is proportional to τ , the time interval between the two pulses. On either side of the maximum, $A(t)$ decreases, but in different ways. In the limit as $t - \tau' \rightarrow \infty$, the integral (35.20) is determined by the residue of the integrand at the pole with the negative imaginary part of least magnitude, which is at $\epsilon_1(k_3 v, k_3) = 0$, the imaginary part being $\text{im } v = -\gamma(k_3)/k_3$.[†] On the other side of the maximum, with $t - \tau' \rightarrow -\infty$, the integral is determined by the residue at the pole at $\epsilon_1(-k_1 v, k_1) = 0$, for which $\text{im } v = \gamma(k_1)/k_1$; the contour of integration must then be moved into the upper half of the complex v -plane. The result is

• In the calculation, it must be remembered that ϵ depends only on $|\mathbf{k}|$, and so, in the notation of this section (where $k \equiv k_x$), we have $\epsilon_t(\omega, -k) = \epsilon_t(\omega, k)$.

$$\left. \begin{aligned} A(t) &\propto \exp[-\gamma(k_3)(t - \tau')] \text{ as } t - \tau' \rightarrow \infty, \\ A(t) &\propto \exp[-(k_3/k_1)\gamma(k_1)(\tau' - t)] \text{ as } t - \tau' \rightarrow -\infty. \end{aligned} \right\} \quad (35.21)$$

Thus the echo amplitude, before reaching its maximum, increases with a growth rate $k_3\gamma(k_1)/k_1$, and beyond the maximum decreases at a rate $\gamma(k_3)$. Figure 10 illustrates this behaviour. The first two curves show the variation of the potential in the two pulses applied at $t = 0$ and $t = \tau$; the third curve shows the form of the echo. The corresponding growth and decay rates are marked beside the curves.

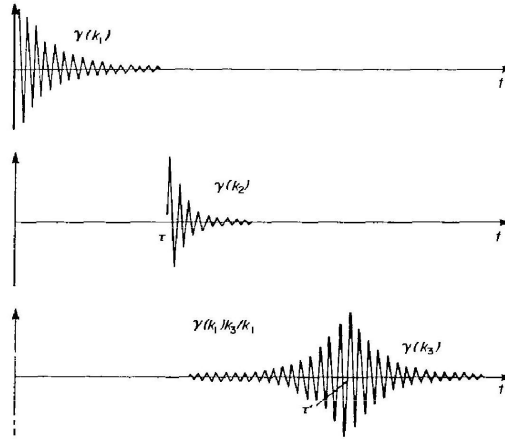


Fig. 10.

These calculations have neglected collisions. Hence the condition for the quantitative formula (35.20) to be valid is that at a given time t the oscillations of the distribution function have not yet been damped out by collisions. By means of the results to be obtained in §41, Problem, we may formulate this condition as

$$\nu(v_T)(kv_T)^2 t^3 \ll 1,$$

where $\nu(v_j)$ is the mean frequency of Coulomb collisions for an electron.

15.3.10 §36. Adiabatic electron capture

Let us consider the distribution of plasma electrons in a slowly applied potential electric field. Let L be the order of magnitude of the extent of the field and τ the characteristic time of variation of the field. We shall suppose that

$$\tau \gg L/\bar{v}_e, \quad (36.1)$$

and also that τ is small compared with the electron mean free time, so that the plasma is again collisionless.

By virtue of the condition (36.1), the field may be regarded as stationary during the passage of an electron through it. To the same accuracy, the electron distribution function in the field is stationary. It has been noted at the end of §27 that the solution of the collisionless transport equation depends only on the integrals of the motion of the particle; for a stationary distribution, these can only be the ones that do not depend explicitly on the time.

¹It is assumed that all wave numbers $k \ll 1/a_k$. Then $\gamma(k)$ is exponentially small, and decreases with increasing k . Since $k_3 < k_2$, the pole at $\epsilon_1(k_2v, k_2) = 0$ then certainly lies further from the real c -axis than that at $\epsilon(k_3v, k_3) = 0$.

We shall take only the one-dimensional case, in which the field potential φ depends on only one coordinate, x . Since the motion in the y - and z -directions is then unimportant, we shall consider the distribution function only f with respect to the momentum p_x (and the coordinate x).

In the one-dimensional case, the equation of motion has two integrals, of which only one is not dependent explicitly on the time (in a steady field), namely the electron energy

$$\epsilon = p_x^2/2m + U(x), \quad (36.2)$$

where $U(x) = -e\varphi(x)$.[†] Hence the stationary distribution function will depend on p_x and x only in the combination (36.2):

$$f = f[\epsilon(x, p_x)] \quad (36.3)$$

The form of the function $f(\epsilon)$ depends on the boundary conditions. Let the field $U(x)$ form a potential barrier (Fig. 11a). The function $f(\epsilon)$ is then determined by the distribution of the electrons reaching the barrier from infinity. For instance, if the electrons far from the barrier in either direction have an equilibrium distribution, uniform in space, with temperature T_e , then the Boltzmann distribution occurs throughout space:

$$f = \frac{N_0}{(2\pi m T_e)^{1/2}} \exp(-\epsilon/T_e) \quad (36.4)$$

The density of the electron gas is everywhere distributed according to the formula

$$N_e(x) = N_0 \exp[-U(x)/T_e] \quad (36.5)$$

where N_0 is the density far from the barrier.

Next let the field be a potential well (Fig. 11b). Then the distribution of electrons with positive energy ϵ is again determined by that of particles coming from infinity; with an equilibrium distribution at infinity, the electrons with $\epsilon > 0$ have a Boltzmann distribution throughout space. But in this case, as well as such particles, there are some with $\epsilon < 0$, which execute a finite motion within the potential well; they are "trapped". At infinity there are no particles with $\epsilon < 0$, and so the previous arguments in which the energy was regarded as a strictly conserved quantity are inadequate to give the distribution of trapped particles. We must take into account also the variation of the energy in a field that is not strictly stationary, and in consequence this distribution is found to depend in general on previous events, namely the way in which the field has been applied (A. V. Gurevich, 1967).

From the condition (36.1), the field varies only slightly during the period of the finite motion of the trapped particles. In such cases there is a conserved adiabatic invariant, the integral

$$I(t, \epsilon) = \frac{1}{2\pi} \cdot 2 \int_{x_1}^{x_2} [2m(\epsilon - U(t, x))]^{1/2} dx \quad (36.6)$$

taken between the limits of the motion (for given ϵ and t). This quantity acts here as an integral of the motion, in terms of which the trapped particle distribution function is to be expressed:

$$f_{\text{tr}} = f_{\text{tr}}(I(t, \epsilon)), \quad (36.7)$$

the energy ϵ in turn being assumed expressed in terms of x and p_x by (36.2). The form of the function (36.7) is determined by the fact that the distribution function is a continuous

[†]The second integral of the motion may be, for instance, the initial (at some specified instant) value x_0 of the particle coordinate, expressed as a function of time and the variable coordinate along the path, $x_0(t, x)$.

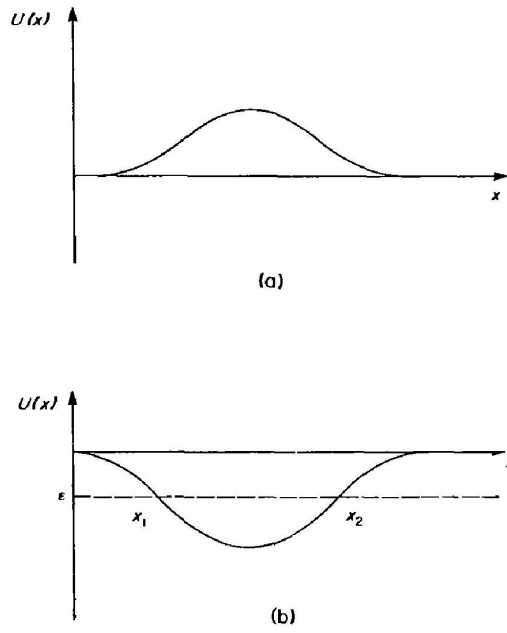


Fig. 11.

function of ϵ when the field is applied slowly. Hence, for the limiting value of the trapped particle energy, the function $f_{tr}(I)$ must be the distribution function for particles executing an infinite motion above the well.

The case of the potential well as shown in Fig. 11b is, however, particularly simple because the limiting energy has the constant value zero if the field is applied gradually. It then follows from the boundary condition stated that f_{tr} reduces to a constant:

$$f_{tr} = f(0), \quad (36.8)$$

where $f(\epsilon)$ is the distribution function for particles above the well. We shall now determine the spatial distribution of electrons in this case if $f(\epsilon)$ is the Boltzmann function (36.4).

Adding the numbers of electrons with $\epsilon > 0$ and $\epsilon < 0$ gives

$$N_e = 2 \int_{p_1}^x f(\epsilon) dp_x + 2 \int_0^{p_1} f(0) dp_x$$

$$p_1 = (2m|U|)^{1/2}$$

the factors 2 take account of particles with $p_x > 0$ and $p_x < 0$. Substituting $f(\epsilon)$ from (36.4), we have

$$N_\ell(t, x) = N_g \left\{ e^{|U|/T_\ell} \left[1 - \Phi \left(\sqrt{|U|/T_\ell} \right) \right] + 2\sqrt{|U|/\pi T_\ell} \right\} \quad (36.9)$$

where

$$\Phi(\xi) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\xi e^{-u^2} du \quad (36.10)$$

When $\xi \ll 1$, expanding the integrand in (36.10) in powers of u , we find

$$\Phi(\xi) \approx \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left(\xi - \frac{1}{3} \xi^3 \right)$$

The distribution of electrons trapped in a shallow well ($|U| \ll T_e$) is therefore

$$N_e = N_0 \left[1 + \frac{|U|}{T_e} - \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \left(\frac{|U|}{T_e} \right)^{3/2} \right] \quad (36.11)$$

The first correction term is the same as would result from the Boltzmann formula (36.5), but the next correction is already different from the Boltzmann form.

When $\xi \gg 1$, the difference $1 - \Phi(\xi)$ is exponentially small, $\propto \exp(-\xi^2)$. For a deep well ($|U| \gg T_e$), therefore, only the second term in the braces in (36.9) is important, and

$$N_e(t, x) = 2N_0 (||U||/\pi T_e)^{1/2} \quad (36.12)$$

As $|U|$ increases, the density increases much more slowly than would follow from the Boltzmann formula.

15.3.11 §37. Quasi-neutral plasmas

The equations of plasma dynamics allow a considerable simplification for a group of phenomena in which the characteristic scales of length and time satisfy the following conditions.

(1) The characteristic dimension L of inhomogeneities in the plasma is assumed large compared with the electron Debye length:

$$a_e/L \ll 1. \quad (37.1)$$

(2) The rate of the process is assumed to be governed by the motion of the ions, so that the characteristic scale of speed is given by v_{Ti} , which is small in comparison with the electron speeds. (3) The motion of the ions causes a slow change in the electric potential that is adiabatically followed by the electron distribution.

Let δN_e and δN_i be the changes in the electron and ion densities in the perturbed plasma. These changes give rise to a mean uncompensated charge density $\delta\rho = e(z\delta N_i - \delta N_e)$ in the plasma. The potential of the electric field due to the charges is determined by Poisson's equation,

$$\Delta\varphi = -4\pi e(z\delta N_i - \delta N_e) \quad (37.2)$$

In order of magnitude, $\Delta\varphi \sim \varphi/L^2$. Hence

$$\left| \frac{z\delta N_i - \delta N_e}{\delta N_e} \right| \sim \frac{1}{4\pi e L^2} \left| \frac{\varphi}{\delta N_e} \right| \quad (37.3)$$

If the field is weak ($e\varphi \ll T_e$), the change in the electron density is

$$\delta N_e \sim e\varphi N_e/T_e$$

(cf. (36.11)), and then

$$\left| \frac{z\delta N_i - \delta N_e}{\delta N_e} \right| - \frac{a_c^2}{L^2} \ll 1 \quad (37.4)$$

This inequality remains valid for a strong perturbation, with $e\varphi \sim T_p$: then $\delta N_e \sim N_e$, and (37.4) again follows from (37.3).

Thus the uncompensated charge density due to the perturbation is small compared with the perturbations of the electron and ion charge densities separately; such a plasma is said to be quasi-neutral. For the range of phenomena under consideration, this property enables the potential distribution in the plasma to be determined from just the "equation of quasi-neutrality",

$$N_e = zN_i, \quad (37.5)$$

together with the transport equation for ions and the equation giving the "adiabatic" distribution of electrons. [†]

At the initial instant, of course, (if we are considering a problem with initial conditions) the electron densities may be specified arbitrarily and need not satisfy the inequality (37.4). The resulting strong electric field, however, creates a movement of

the electrons, which rapidly (in the characteristic "electronic" times) restores quasi-neutrality; this process in the diffusion case has been analysed in §25.

The passage from the electrodynamic equation (37.2) to the condition (37.5) signifies not only a considerable simplification of the equations of plasma dynamics but also a fundamental change in their dimensionality structure: the potential φ appears in the transport equation and in the electron distribution only as a product with the charge e , and the charge does not occur at all in the condition (37.5), in contrast to equation (37.2). Hence, by the change

$$e\varphi \rightarrow \psi \quad (37.6)$$

the charge e is completely eliminated from the equations, and the length parameter (the Debye length a_e) disappears with it.

Since the equations contain no length parameter, self-similar motions of the plasma are possible. These occur when length parameters are also absent from the initial and boundary conditions, in which case all functions can depend on the coordinates and time only in the combination $\mathbf{r}/t$. For instance, let the plasma initially be confined to the half-space $x < 0$. At time $t = 0$, the constraint is removed, and the plasma begins to expand into a vacuum. The electrons begin to move first, so that the electron density forms a transition layer near the boundary, with characteristic width $\sim a_p$. After a time $t_1 \gg a_e/v_{Te}$, the electron motion is damped and the electron density follows the potential adiabatically in accordance with the Boltzmann formula. The variation of all quantities is then governed by the motion of the ions. Consequently, in a time $t_2 \gg a_e/v_{Ti} \gg a_e/v_{Te}$, the boundary is spread over distances large compared with a_c . The plasma becomes quasi-neutral, and the motion is self-similar. [†]

We can write down the dynamical equations for a quasi-neutral plasma in an expanded form, taking the particular case in which the electron density everywhere has a Boltzmann distribution:

$$N_e = N_0 e^{\psi/T_e} \quad (37.7)$$

as shown in §36, this distribution is not affected by a slowly varying field, if the field has no potential wells. From (37.7) and (37.5), the potential can be expressed directly in terms of the ion distribution function:

$$\begin{aligned} \psi &= T_e \log(zN_i/N_0) \\ &= T_e \log \left[(z/N_0) \int f_i d^3p \right] \end{aligned} \quad (37.8)$$

Substituting this expression in the transport equation for ions (with self-consistent field $\mathbf{E} = -\nabla\varphi$), we obtain

^{††} It must be emphasized that this result itself applies to plasmas with or without collisions. Note also that, since the derivation of the inequality (37.4) does not involve the assumption of a weak field, the quasi-neutrality property occurs even when the electromagnetic properties of the plasma cannot be described by means of the permittivity (i.e. by assuming a linear relation between $\mathbf{D}$ and $\mathbf{E}$).

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f_i}{\partial \mathbf{r}} - zT_e \frac{\partial f_i}{\partial \mathbf{p}} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \log \int f_i d^3p = 0 \quad (37.9)$$

† For further details see A. V. Gurevich, L. V. Pariiskaya and L. P. Pitaevskii, Soviet Physics JETP 22, 449, 1966.

Although this equation is non-linear, its solutions are independent of the mean plasma density: if $f_i(t, r)$ is a solution, so is Cf_i , with any constant factor C .

15.3.12 §38. Fluid theory for a two-temperature plasma

The theoretical treatment is particularly simple for a two-temperature plasma with

$$T_e \gg T_i. \quad (38.1)$$

We have already seen in §33 that in this case undamped ion-sound waves can propagate in the plasma, with speed $\sim (T_e/M)^{1/2}$. This speed is characteristic of the propagation of perturbations in plasmas. Since it is large in comparison with the thermal speeds of the ions, by (38.1), the thermal spread of the ion speeds can be neglected in most problems of plasma motion. The motion of the ion component of the plasma is then described in the one-fluid approximation by a velocity $\mathbf{v} \equiv \mathbf{v}_i$, which is a specified function of position in space (and of the time), and satisfies the equation

$$Mdv/dt = ez\mathbf{E}$$

or

$$\partial \mathbf{v} / \partial t + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} = (ez/M) \mathbf{E} \quad (38.2)$$

This is to be combined with the equation of continuity

$$\partial N_i / \partial t + \text{div}(N_i \mathbf{v}) = 0 \quad (38.3)$$

and Poisson's equation, which determines the electric field potential φ (and hence the field $\mathbf{E} = -\nabla \varphi$);

$$\Delta \varphi = -4\pi e(zN_i - N_e) \quad (38.4)$$

The electron distribution follows adiabatically the field distribution in plasma motions with speeds $v \leq (T_e/M)^{1/2} \ll v_{Te}$. As we have seen in §36, the specific expression for the electron density N_e then depends considerably on the nature of the field. For a field without potential wells, it is given simply by the Boltzmann formula (37.7), so that (38.4) becomes

$$\Delta \varphi = -4\pi e N_0 (zN_i/N_0 - e^{e\varphi/T_e}). \quad (38.5)$$

Equations (38.2), (38.3) and (38.5) form a complete set of equations for the functions v , N and φ . They can be further simplified for a quasi-neutral plasma: in this case, (37.8) gives

$$e\varphi = T_e \log(zN_i/N_0), \quad e\mathbf{E} = -(T_i/N_i) \nabla N_i, \quad (38.6)$$

and (38.2) may be rewritten as

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} = -\frac{zT_e}{M} \frac{\nabla N_i}{N_i}. \quad (38.7)$$

The equations (38.3) and (38.7) are formally identical with the mechanical equations for an isothermal ideal gas having particle mass M and temperature zT_p . The speed of sound in such

a gas is $(zT_e/M)^{1/2}$, in accordance with the expression (33.5) for the speed of ion-sound waves. In this approximation, there is no dispersion of the waves.

The above analogy with fluid mechanics needs a considerable reservation. The equations of fluid mechanics have by no means always solutions continuous throughout space. The absence of a continuous solution in ordinary fluid mechanics signifies the formation of shock waves, i.e. surfaces on which the physical quantities are discontinuous. In collisionless fluid mechanics, there are no shock waves, since these are essentially due to energy dissipation, which in this case does not occur. The absence of continuous solutions then implies that the assumption of a quasi-neutral plasma is violated in some region of space. In such regions (conventionally called collisionless shock waves), the dependence of the physical quantities on the coordinates and the time is oscillatory, and the characteristic wavelength of these oscillations is determined not only by the characteristic dimensions of the problem but also by an intrinsic property of the plasma, namely its Debye radius (R. Z. Sagdeev 1964). †

Let us now return to the more general equations (38.2)-(38.4), which do not assume a quasi-neutral plasma. An important property of these equations is that they have one-dimensional solutions, in which all quantities depend on the variables t and x only in the combination $\xi = x - ut$ with constant u . Such solutions describe waves propagating with speed u and without change of profile. If we change to a frame of reference moving with speed u relative to the original frame, the plasma motion becomes stationary. The most interesting solutions of this type are those periodic in space and those which decrease at infinity in both directions; the latter are known as solitary waves or solitons (A. A. Vedenov, E. P. Velikhov and R. Z. Sagdeev 1961).

If differentiation with respect to ξ is denoted by a prime, we have from (38.2) and (38.3)

$$(v - u)v' = -(e/M)\varphi', \quad (N_i v)' - uN_i' = 0$$

for simplicity, we take $z = 1$.

Integrating these equations with the boundary conditions $\varphi = 0, v = 0, N_i = N_0$ as $\xi \rightarrow \infty$, we find

$$(e/M)\varphi = \frac{1}{2}u^2 - \frac{1}{2}(u - v)^2, \quad (38.8)$$

$$N_i = N_0 u / (u - v) = N_0 u / [u^2 - 2e\varphi/M]^{1/2}, \quad (38.9)$$

†Such structures have been given for several particular cases by A. V. Gurevich and L. P. Pitaevskii, *Soviet Physics JETP* 38, 291, 1974.

Equation (38.4) gives $\varphi'' = -4\pi e(N_i - N_e)$ or, after multiplication by $2\varphi'$ and integration.

$$\varphi'^2 = -8\pi e \int_0^\varphi [N_i(\varphi) - N_e(\varphi)] d\varphi \quad (38.10)$$

The function $N_i(\varphi)$ is taken from (38.9), and $N_e(\varphi)$ is given by the formulae in §36. In the wave considered, we everywhere have $\varphi > 0$, as is seen from (38.8). The potential energy of an electron in such a field is $U = -e\varphi < 0$, i.e. the field forms a potential well for electrons.

Equation (38.10) reduces to quadratures the problem of determining the wave profile $\varphi(\xi)$. The speed u is directly related to the wave amplitude, i.e. the maximum value of $\varphi(\xi)$, which we denote by φ_m . When $\varphi = \varphi_m$, we must have $\varphi' = 0$. Equating to zero the integral on the right of (38.10) (and carrying out the integration of the first term), we obtain

$$\frac{Mu^2}{e} \left[1 - \left(1 - \frac{2e}{Mu^2} \varphi_m \right)^{1/2} \right] = \frac{1}{N_0} \int_0^{\varphi_m} N_e(\varphi) d\varphi \quad (38.11)$$

which in principle determines u as a function of φ_m . Here it is evident that we must have

$$2e\varphi_m/Mu^2 < 1 \quad (38.12)$$

This condition in general places an upper limit on the possible values of the wave amplitude φ_m , and therefore of the speed u .

For collisions to be entirely negligible, it is necessary that the field frequency ω be large in comparison with the characteristic collision frequencies of both electrons (ν_e) and ions (ν_i). Since $\nu_e \sim (M/m)^{1/2}\nu_i \gg \nu_i$ (see §43), a situation can occur in which $\nu_e \gg \omega \gg \nu_i$. The collisions then again have no effect on the motion of the ions, but the electrons may be regarded as having a Boltzmann distribution even when there are potential wells present.

PROBLEM

Determine the profile and speed of a weak solitary wave ($e\varphi_m/T_e \ll 1$) in a plasma of electrons distributed according to (36.11) (A. V. Gurevich, 1967).

Solution. In (36.10), all terms must be retained, since the formation of the solitary wave is due to the final non-linear term there. A calculation with (38.11) gives

$$u^2 = \frac{T_e}{M} \left[1 + \frac{16}{15} \left(\frac{e\varphi_m}{\pi T_e} \right)^{1/2} \right].$$

The wave profile is found by integration of (38.10):

$$\varphi = \varphi_m \cosh^{-4} \left[\frac{x}{\sqrt{15}a_e} \left(\frac{e\varphi_m}{\pi T_e} \right)^{1/4} \right]$$

15.3.13 §39. Solitons in a weakly dispersing medium

The existence (in a medium without dissipation) of non-linear waves with a stationary profile is closely related to the presence of dispersion. In a nondispersing medium, the wave cannot be stationary if non-linearity is taken into

account; the rate of propagation of various points on the profile is dependent on the amplitude at those points, which causes a distortion of the profile. For example, in the dynamics of an ideal compressible fluid, non-linear effects cause a gradual increase in the slope of the forward edge of the wave; see FM, §94. The dispersion, for its part, causes a gradual smoothing-out of the profile, and the two effects may cancel out, leaving a stationary profile.

In this section, the phenomena concerned will be investigated in a general form for a fairly wide class of cases of wave propagation in a non-dissipative weakly dispersive medium, including weak non-linearity.

Let u_0 be the rate of wave propagation in the linear approximation, when dispersion is neglected. In this approximation, for a one-dimensional wave propagating in one direction parallel to the x -axis, all quantities depend on x and t only in the combination $\xi = x - u_0 t$. This property can be expressed in differential form as

$$\partial b / \partial t + u_0 \partial b / \partial x = 0,$$

where b denotes any of the quantities oscillating in the wave.

A constant speed u_0 corresponds to a wave dispersion relation $\omega = u_0 k$. In a dispersive medium, this relation is just the first term in the expansion of the function $\omega(k)$ in powers of the small quantity k . Including the next term, we have †

$$\omega = u_0 k - \beta k^3, \quad (39.1)$$

where β is a constant that may in principle be either positive or negative. The differential equation which describes (in the linear approximation) the propagation, in one direction, of a wave in a medium with such a dispersion is

$$\frac{\partial b}{\partial t} + u_0 \frac{\partial b}{\partial x} + \beta \frac{\partial^3 b}{\partial x^3} = 0,$$

since this gives (39.1) for a wave in which $b \propto \exp(-i\omega t + ikx)$. Lastly, the inclusion of non-linearity causes terms of higher order in b to appear in the equation. These terms must certainly satisfy the condition of vanishing for a constant b (independent of x), corresponding simply to a homogeneous medium. Considering only the term containing the derivative of lowest order (k is small), we write the equation of propagation of a slightly non-linear wave as

$$\frac{\partial b}{\partial t} + u_0 \frac{\partial b}{\partial x} + \beta \frac{\partial^3 b}{\partial x^3} + \alpha b \frac{\partial b}{\partial x} = 0, \quad (39.2)$$

where α is a constant parameter which again may in principle have either sign. ‡

To simplify this equation, we replace x with a new variable ξ and b with a new unknown function a , defined by

$$\xi = x - u_0 t, \quad a = \alpha b. \quad (39.3)$$

This gives

$$\frac{\partial a}{\partial t} + a \frac{\partial a}{\partial \xi} + \beta \frac{\partial^3 a}{\partial \xi^3} = 0 \quad (39.4)$$

the Korteweg-de Vries equation. † We shall take first of all the particular case where $\beta > 0$.

We shall be interested in solutions which describe waves with a stationary profile. In such solutions, the function $a(t, \xi)$ depends only on the difference $\xi - v_0 t$ with some constant v_0 :

$$a = a(\xi - v_0 t) \quad (39.5)$$

and the wave propagation speed is

$$u = u_0 + v_0. \quad (39.6)$$

Substituting (39.5) in (39.4) and denoting differentiation with respect to ξ by a prime, we obtain the equation

$$\beta a''' + aa' - v_0 a' = 0. \quad (39.7)$$

This is invariant under the change

¹† The fact that $\omega(k)$ can be expanded in odd powers of k follows from a consideration of quantities that must be real. The initial set of physical equations of motion for the medium contains only real quantities and parameters. The imaginary unit i occurs only through the substitution in these equations of a solution proportional to $\exp(-i\omega t + ikx)$. The dispersion relation resulting from this substitution therefore determines $i\omega$ as a function of ik with real coefficients; the expansion of such a function must contain only odd powers of ik . In the general case of a dissipative medium, $\omega(k)$ is complex: $\omega = \omega' + i\omega''$. and the statement made then refers to the expansion of the real part $\omega'(k)$ of the frequency. The expansion of $\omega''(k)$ will, for the same reasons, contain only even powers of k .

‡ It must be emphasized, however, to avoid misunderstanding, that this form of slight non-linearity is not at all universal. For example, the slight non-linearity in wave propagation in plasmas that results from the last term in the electron distribution (36.11) (used in §38. Problem) would correspond to a term $x \sqrt{b} db/dx$ in an equation such as (39.2).

$$a \rightarrow a + V, \quad v_0 \rightarrow v_0 + V \quad (39.8)$$

with any constant V .

The first integral of equation (39.7) is

$$\beta a'' + \frac{1}{2}a^2 - v_0 a = \frac{1}{2}c_1.$$

Multiplication by $2a'$ and another integration gives

$$\beta a'^2 = -\frac{1}{3}a^3 + v_0 a^2 + c_1 a + c_2. \quad (39.9)$$

Instead of the three constants v_0, c_1, c_2 it is convenient to use the three roots of the cubic on the right of (39.9). If these are denoted by a_1, a_2, a_3 , then

$$\beta a'^2 = -\frac{1}{3}(a - a_1)(a - a_2)(a - a_3). \quad (39.10)$$

The constant v_0 is related to the new constants by

$$v_0 = \frac{1}{3}(a_1 + a_2 + a_3) \quad (39.11)$$

[†] It was derived by D. J. Korteweg and G. de Vries (1895) for waves on the surface of shallow water.

We shall be concerned only with solutions of (39.10) such that $|a(\xi)|$ is bounded; an unlimited increase of $|a|$ would contradict the assumption of slight non-linearity. It is easy to see that this condition is not satisfied if the roots a_1, a_2, a_3 are not all real. For, let a_1 and $a_2 (= a_1^*)$ be complex; then the right-hand side of (39.10) becomes $\frac{1}{3}|a - a_1|^2(a_3 - a)$ and there is nothing to prevent a from tending to $-\infty$.

Thus the constants a_1, a_2, a_3 must be real; let them be ordered so that $a_1 > a_2 > a_3$. Since the expression on the right of (39.10) must be positive, the function $a(\xi)$ can vary only in the range $a_1 \geq a \geq a_2$. We can put $a_3 = 0$ without loss of generality; this may always be achieved by a transformation of the type (39.8). With this choice, we rewrite (39.10) as

$$\beta a'^2 = \frac{1}{3}(a_1 - a)(a - a_2)a \quad (39.12)$$

The nature of the solution depends on whether a_2 is zero. If $a_2 = 0, a_1 > 0$, integration gives

$$a(\xi) = a_1 \cosh^{-2} \left(\frac{1}{2} \xi \sqrt{(a_1/3\beta)} \right); \quad (39.13)$$

the zero of ξ is taken at the maximum of the function. (Here and henceforward, to simplify the notation, we write the wave profile as a function of $\xi = x$ at some given instant $t = 0$.) This solution describes a solitary wave, or soliton: as $\xi \rightarrow \pm\infty$, the function $a(\xi)$ vanishes, together with its derivatives. The constant a_1 gives the soliton amplitude, and the width decreases as $a_1^{-1/2}$ with increasing amplitude. According to (39.11), $v_0 = \frac{1}{3}a_1$, and the speed of the soliton is therefore

$$u = u_0 + \frac{1}{3}a_1. \quad (39.14)$$

This exceeds u_0 , and increases with the amplitude.

The non-linearity, it will be remembered, is assumed slight for processes described by the Korteweg-de Vries equation. The condition has an obvious meaning: for example, if a is the

change in the density of the medium, this change must be small in comparison with the unperturbed density. At the same time, the degree of non-linearity of these processes is expressed by a further dimensionless parameter $L(a_1/\beta)^{1/2}$, where L is a characteristic length and a_1 the amplitude of the perturbation. This parameter defines the relative importance of non-linearity and dispersion, and may be either small (if dispersion predominates) or large (if non-linearity predominates). For a soliton, whose width $L \sim (\beta/a_1)^{1/2}$, the parameter is of the order of unity.

Let us now take the case where $a_2 \neq 0$. The solution of (39.12) then describes a wave of infinite extent, periodic in space. Integration of the equation gives

$$\begin{aligned}\xi &= \int_a^{a_1} \frac{V(3\beta)da}{[a(a_1 - a)(a - a_2)]^{1/2}} \\ &= (12\beta/a_1)^{1/2} F(s, \varphi),\end{aligned}\quad (39.15)$$

where $F(s, \varphi)$ is an elliptic integral of the first kind:

$$F(s, \varphi) = \int_0^\varphi \frac{d\varphi}{(1 - s^2 \sin^2 \varphi)^{1/2}} \quad (39.16)$$

with $\dagger$

$$\sin \varphi = \sqrt{\frac{a_1 - a}{a_1 - a_2}}, \quad s = \sqrt{1 - \frac{a_2}{a_1}}; \quad (39.17)$$

the zero of ξ is taken at one of the maxima of the function $a(\xi)$.

Inverting the formula (39.15) by means of the Jacobi elliptic function, we have

$$a = a_1 \operatorname{dn}^2 \left(\sqrt{(a_1/12\beta)} \xi, s \right) \quad (39.18)$$

This is a periodic function, whose period (wavelength) in the coordinate x is

$$\lambda = 4\sqrt{(3\beta/a_1)} F\left(\frac{1}{2}\pi, s\right) = 4\sqrt{(3\beta/a_1)} K(s), \quad (39.19)$$

where $K(s)$ is a complete elliptic integral of the first kind. The mean value over a period of (39.18) is

$$\bar{a} = \frac{1}{\lambda} \int_0^\lambda a(\xi) d\xi = a_1 E(s)/K(s) \quad (39.20)$$

where $E(s)$ is a complete elliptic integral of the second kind. It is natural to consider a periodic wave in which the mean value of the oscillating quantity is zero. This may always be achieved by means of the transformation (39.8), subtracting the quantity (39.20) from the function (39.18). The wave propagation speed is then

$$u = u_0 + \left[\frac{1}{3} (a_1 + a_2) - a_1 E(s)/K(s) \right]. \quad (39.21)$$

Small oscillation amplitudes $a_1 - a_2$ correspond to parameter values $s \ll 1$. Using the approximation

$$\operatorname{dn}(z, s) \approx 1 - \frac{1}{4}s^2 + \frac{1}{4}s^2 \cos 2z, \quad s \ll 1,$$

we find that the solution (39.18) becomes in this case, as it should, the harmonic wave

$$a = \frac{1}{2}(a_1 + a_2) + \frac{1}{2}(a_1 - a_2) \cos kx, \quad k = \sqrt{(a_1/3\beta)}.$$

The speed (39.21) becomes $u = u_0 - \frac{1}{3}a_1 = u_0 - \beta k^2$ in accordance with (39.1). The opposite limiting case of large amplitudes (in the wave model under consideration) corresponds to $a_2 \rightarrow 0$ and $s \rightarrow 1$. With the limiting expression

$$K(s) \approx \frac{1}{2} \log [16/(1 - s^2)], \quad s^2 \rightarrow 1,$$

we find that in this limit the wavelength increases logarithmically:

$$\lambda = \sqrt{(12\beta/a_1) \log (16a_1/a_2)} \quad (39.22)$$

† The parameter of the elliptic integral is denoted by s instead of the usual k , in order to avoid confusion with the wave number.

Thus the successive antinodes of the wave move further apart. The wave profile near each antinode is obtained from (39.18) by taking the limit of $\text{dn } z$ for $s = 1$, which is valid for finite z : $\text{dn } z = 1/\cosh z$. The result is again (39.13). In the limit $s \rightarrow 1$, therefore, a periodic wave separates into a sequence of widely spaced solitons.

So far we have assumed that $\beta > 0$. The case where $\beta < 0$ does not need special consideration, since a change in the sign of β in (39.4) is equivalent to the change $\xi \rightarrow -\xi, a \rightarrow -a$. Since this converts the argument $\xi - v_0 t$ in (39.5) into $-\xi - v_0 t$, the wave propagation speed becomes $\mathbf{n} = \mathbf{u}_0 - \mathbf{v}_0$. For instance, the above results for the soliton are altered only in that the function $a(\xi)$ becomes negative, and the speed of the soliton $u < u_0$.

The Korteweg-de Vries equation has certain specific properties which lead to a number of general theorems. These are based on the formal relation between the equation and the eigenvalue problem for an equation of the Schrödinger type (C. S. Gardner, J. M. Greene, M. D. Kruskal and R. M. Miura, 1967).

Let us consider the equation

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial \xi^2} + \left[\frac{1}{6\beta} a(t, \xi) + \epsilon \right] \psi = 0, \quad (39.23)$$

again taking the particular case $\beta > 0$. This has the form of Schrödinger's equation with $-a(t, \xi)$ as the potential energy depending on t as a parameter. Let $a(t, \xi)$ be positive in some range of ξ , and tend to zero as $\xi \rightarrow \pm\infty$. Then the equation (39.23) has eigenvalues ϵ corresponding to a finite motion in the potential well $-a(t, \xi)$; since a depends on t , these eigenvalues will in general also depend on t . We shall show that the eigenvalues ϵ do not depend on t if $a(\xi, t)$ satisfies the Korteweg-de Vries equation (39.4).

Expressing a from (39.23) as

$$a = -6\beta (\psi''/\psi + \epsilon),$$

and substituting in (39.4), we find by a direct calculation

$$\psi^2 d\epsilon/dt = (\psi' A - \psi A')', \quad (39.24)$$

where

$$A(t, \xi) = 6\beta \left(\frac{1}{\beta} \frac{\partial \psi}{\partial t} - \frac{3}{\psi} \psi' \psi'' + \psi''' - \frac{1}{6} \epsilon \psi' \right); \quad (39.25)$$

here it is important that the right-hand side of (39.24) is expressed in terms of the derivative with respect to ξ of an expression that vanishes as $\xi \rightarrow \pm\infty$ (the eigenfunctions of the discrete

spectrum of (39.23) are zero at infinity). Integration of (39.24) with respect to ξ over the whole range from $-\infty$ to ∞ therefore gives

$$\frac{d\epsilon}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^2 d\xi = 0$$

and, since this normalization integral of ψ is not zero, it follows that $d\epsilon/dt = 0$. We shall now show that equation (39.23) has only one discrete eigenvalue for a stationary "potential" $a(\xi)$ in the form (39.13), corresponding to one soliton. With this potential, (39.23) becomes

$$\psi'' + \left(\frac{U_0}{\cosh^2 \alpha \xi} + \epsilon \right) \psi = 0 \quad (39.26)$$

where

$$U_0 = a_1/6\beta, \quad \alpha = (a_1/12\beta)^{1/2}. \quad (39.27)$$

The discrete eigenvalues of (39.26) are

$$\epsilon_n = -\alpha^2(s-n)^2, \quad s = \frac{1}{2} \left[-1 + \sqrt{1 + 4U_0/\alpha^2} \right], \quad n = 0, 1, 2, \dots,$$

where we must have $n < s$; see *QM*, 823, Problem 4. With the parameter values (39.27), $s = 1$, so that there is only one eigenvalue.

$$\epsilon = -a_1/12\beta \quad (39.28)$$

If, however, $a(t, \xi)$ represents an assembly of solitons at large intervals (so that there is no "interaction" between them), the eigenvalue spectrum of equation (39.23) consists of the "levels" (39.28) in each potential well, each level being determined by the amplitude a_1 of the corresponding soliton.

Since the soliton propagation speed increases with the amplitude, a soliton of large amplitude will always eventually overtake one of smaller amplitude. An arbitrary initial assembly of solitons at large intervals, therefore, will ultimately, after a series of mutual "collisions", become an assembly of solitons arranged in order of increasing amplitude (all perturbations described by the Korteweg-de Vries equation propagate in the same direction).

The above results lead immediately to an interesting conclusion: the initial and final assemblies of solitons have the same total number and amplitudes, differing only in their order. This follows directly from the fact that each isolated soliton corresponds to one eigenvalue ϵ , and the eigenvalues do not depend on the time.

Any positive ($a > 0$) initial perturbation occupying a finite region of space and evolving in accordance with the Korteweg-de Vries equation ultimately breaks up into an assembly of isolated solitons whose amplitudes are independent of time. These amplitudes and the number of solitons can in principle be found by determining the spectrum of discrete eigenvalues of equation (39.23) with the initial distribution $a(0, \xi)$ as the potential. If the initial perturbation contains also regions with $a < 0$, however, its evolution will create a wave packet which gradually spreads out and does not break up into solitons.

To avoid misunderstanding, however, we should specify more precisely what is meant by the initial perturbation in the Korteweg-de Vries equation. An actual perturbation formed in the medium at some instant evolves (in a way described by the complete wave equation, of the second order in the time) and in general separates into two perturbations propagating in the positive and negative x directions. The "initial" perturbation for the Korteweg-de Vries equation is to be taken as one of these two, immediately after the separation.

PROBLEM

Determine the coefficients α and β in equation (39.2) for ion-sound waves in a plasma with $T_i < T_e$.

Solution. The dispersion coefficient β is found from (33.4) by expanding in terms of the small quantity ka_k :

$$\beta = a_e^2 u_{02}$$

where $\mu_0 = (zT_e/M)^{1/2}$.

In determining the non-linear coefficient α , we may neglect the dispersion, i.e. consider the limiting case $k \rightarrow 0$. In this limit, the plasma may always be regarded as quasi-neutral, and accordingly be described by the mechanical equations of an isothermal ideal gas (38.3), (38.7). Putting $N_1 = N_0 + \delta N$, we can write these equations as far as the second-order terms in the small quantities δN and v . In these second-order terms, we can put $v = u_0 \delta N / N_0$, as in the linear approximation for a wave propagating in the positive x -direction (u_0 being the speed of the waves in the linear approximation). The equations then become

$$\begin{aligned} \frac{\partial \delta N}{\partial t} + N_0 \frac{\partial v}{\partial x} &= -\frac{\partial}{\partial x}(v \delta N) = -\frac{2u_0}{N_0} \delta N \frac{\partial \delta N}{\partial x} \\ \frac{\partial v}{\partial t} + \frac{u_0^2}{N_0} \frac{\partial \delta N}{\partial x} &= \frac{u_0^2}{N_0^2} \delta N \frac{\partial \delta N}{\partial x} - v \frac{\partial v}{\partial x} = 0 \end{aligned}$$

Differentiating the first equation with respect to t , the second with respect to x , and eliminating $\partial^2 v / \partial t \partial x$, we find

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} - \mu_0 \frac{\partial}{\partial x} \right) \left(\frac{\partial}{\partial t} + \mu_0 \frac{\partial}{\partial x} \right) \delta N = -\frac{2\mu_0}{N_0} \frac{\partial}{\partial t} \left(\delta N \frac{\partial \delta N}{\partial x} \right)$$

With the same accuracy, we replace the derivative d/dt on the right, and in the difference $d/dt - 1$ md/dx on the left, by $-u_0 d/dx$. Lastly, cancelling the differentiation d/dx on both sides and comparing the result with (39.2), we have

$$\alpha = u_0 / N_{ik}$$

15.3.14 §40. Permittivity of a degenerate collisionless plasma

In calculating the permittivity of a collisionless plasma in §§29 and 31, we entirely neglected all quantum effects. The results thus obtained are resulcted, first of all, as to temperature by the condition that degeneracy be absent; for electrons, this condition is

$$T \gg \epsilon_F \sim \hbar^2 N_e^{2/3} / m, \quad (40.1)$$

Where $\epsilon_F = p_F^2 / 2m$ and p_F is the limiting momentum of the Fermi distribution at $T = 0$, which is related to the number density of electrons by $p_F^3 / 3\pi^2 \hbar^3 = N_e$.

Moreover, the possibility of applying the classical Boltzmann equation to a plasma in an external field involves the imposition of certain conditions on the field frequency ω and wave vector k . The characteristic distances ($\sim 1/k$) over which the field varies must be large compared with the electron de Broglie wavelength $\hbar/\bar{p}$, and the corresponding uncertainty ($\sim \hbar k$) in the momentum must be small compared with the width ($\sim T/\bar{v}$) of the region over which the electron thermal distribution extends. For a non-degenerate plasma, $\bar{p} \sim T/\bar{v} \sim (mT)^{1/2}$, so that the two conditions coincide. For a degenerate plasma, $\bar{p} \sim p_F$, $v \sim v_F = p_F/m$, but

$T/\bar{v} \leq \bar{p}$ since $T \leq \epsilon_F$. Thus in either case it is sufficient if

$$\hbar k \bar{v} \ll T. \quad (40.2)$$

Lastly, the frequency must satisfy the condition

$$\hbar \omega \ll \epsilon_F : \quad (40.3)$$

the field energy quantum must be small in comparison with the mean electron energy (but this condition is usually unimportant).

Let us now consider the dielectric properties of the plasma without imposing the conditions (40.1)-(40.3) on the electron component; the ion component may remain non-degenerate. We shall calculate the electronic part of the permittivity. The condition for the interaction of the plasma particles to be negligible will again be assumed satisfied:

$$e^2 N_e^{1/3} \ll \bar{\epsilon}; \quad (40.4)$$

when $\bar{\epsilon} \sim \epsilon_F$, this becomes $N_e^{1/3} \gg m e^2 / \hbar^2$, or $e^2 / \hbar v_F \ll 1$ (cf. SP 1, §80; SP 2, §85).

The abandonment of the condition (40.2) means that the quantum-mechanical equation for the density matrix must be applied from the start. Since the interaction between electrons is neglected, we can immediately write a closed equation for the one-particle density matrix $\rho_{\sigma_1 \sigma_2}(t, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ (where σ_1 and σ_2 are the spin indices). We shall assume that the electron distribution is independent of the spin, i.e. the dependence of the density matrix on the spin indices is separated as a factor $\delta_{\sigma_1 \sigma_2}$, which will be omitted. The spin-independent density matrix $\rho(t, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ satisfies the equation

$$i \hbar \partial \rho / \partial t = (\hat{H}_1 - \hat{H}_2^*) \rho, \quad (40.5)$$

where $\hat{H}$ is the electron Hamiltonian in the external field, and the suffixes 1 and 2 indicate the variable (r_1 or r_2) on which the operator acts (see *QM*, 814). This equation replaces the classical Liouville's theorem $df/dt = 0$ for the classical one-particle distribution function.

As in §29, we shall calculate the longitudinal permittivity. Accordingly, we consider an electric field with a scalar potential $\varphi(t, r)$, and the electron Hamiltonian thus becomes

$$\hat{H} = -(\hbar^2/2m) \Delta - e\varphi(t, r) \quad (40.6)$$

Assuming the field to be weak, we put

$$\rho = \rho_0(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) + \delta\rho(t, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \quad (40.7)$$

where ρ_0 is the density matrix of the unperturbed stationary and homogeneous (but not necessarily equilibrium) state of the gas; the homogeneity implies that ρ_0 depends only on the difference $\mathbf{R} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$. The density matrix $\rho_0(\mathbf{R})$ is related to the (unperturbed) electron momentum distribution function $n_0(p)$ by

$$n_0(\mathbf{p}) = \mathcal{N}_e \int \rho_0(\mathbf{R}) e^{-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{R} / \hbar} d^3x \quad (40.8)$$

where $\mathcal{N}_e$ is the total number of electrons; see SP 2 (7.20). The function $n(\mathbf{p})$ is defined as the occupation numbers of quantum states of electrons with definite values of the momentum and the spin component. The number of states in an element d^3p of momentum space and with either value of the spin component is $2d^3p/(2\pi\hbar)^3$. Hence $n(\mathbf{p})$ is related to the distribution function $f(\mathbf{p})$ used previously by

$$f(p) = 2n(p)/(2\pi\hbar)^3 \quad (40.9)$$

Substituting (40.7) in (40.8) and omitting terms of the second order of smallness, we obtain a linear equation for the small correction to the density matrix:

$$\left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} (\Delta_1 - \Delta_2) \right] \delta\rho(t, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = -e [\varphi(t, \mathbf{r}_1) - \varphi(t, \mathbf{r}_2)] \rho_0(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \quad (40.10)$$

Let $\dagger$

$$\varphi(l, \mathbf{r}) = \varphi_{\omega k} e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} \quad (40.11)$$

Then the dependence of the solution of (40.10) on the sum $r_1 + r_2$ (and on the time) can be separated by putting

$$\delta\rho = \exp \left[i\mathbf{k} \cdot \frac{1}{2} (\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2) - i\omega t \right] g_{\omega \mathbf{k}}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2). \quad (40.12)$$

Substituting this expression in (40.10), we obtain an equation for $g_{\omega k}(\mathbf{R})$:

$$\left[\hbar\omega + \frac{\hbar^2}{2m} \left(\nabla + \frac{1}{2} i\mathbf{k} \right)^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \left(\nabla - \frac{1}{2} i\mathbf{k} \right)^2 \right] g_{\omega \mathbf{k}}(\mathbf{R}) = -e\varphi_{\omega \mathbf{k}} (e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}^2} - e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}^2}) \rho_0(\mathbf{R})$$

We can now apply a Fourier expansion with respect to $\mathbf{R}$. Multiplying both sides by $\exp(-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{R}/\hbar)$ and integrating over d^3x , and using (40.8), we obtain

$$\left[\hbar\omega - \epsilon \left(\mathbf{p} + \frac{1}{2} \hbar \mathbf{k} \right) + \epsilon \left(\mathbf{p} - \frac{1}{2} \hbar \mathbf{k} \right) \right] g_{\omega k}(\mathbf{p}) = - (e\varphi_{\omega k}/\mathcal{N}_e) \left[n_0 \left(\mathbf{p} - \frac{1}{2} \hbar \mathbf{k} \right) - n_0 \left(\mathbf{p} + \frac{1}{2} \hbar \mathbf{k} \right) \right],$$

where $\epsilon(\mathbf{p}) = \mathbf{p}^2/2m$, or equivalently

$$g_{\omega k}(\mathbf{p}) = (e\varphi_{\omega k}/\hbar\mathcal{N}_e) \left[n_0 \left(\mathbf{p} + \frac{1}{2} \hbar \mathbf{k} \right) - n_0 \left(\mathbf{p} - \frac{1}{2} \hbar \mathbf{k} \right) \right] / (\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}). \quad (40.13)$$

$\dagger$ The Hamiltonian (40.6) must be Hermitian, and so the function φ in it (and consequently in (40.10) also) is real. But, having written down equation (40.10), which is linear, we can solve it for each of the complex monochromatic field components separately.

The value of the density matrix at $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_2 \equiv \mathbf{r}$ determines the number density of particles in the system: $N = 2\mathcal{N}\rho(t, \mathbf{r}, \mathbf{r})$; see SP2 (7.19). Hence the change in the electron density due to the field is

$$\delta N_e = 2\mathcal{N}_e \delta\rho(t, \mathbf{r}, \mathbf{r}) = 2\mathcal{N}_e e^{i(k, r - \omega t)} g_{\omega k}(\mathbf{R} = 0),$$

or, expressing $g_{\omega k}(\mathbf{R} = 0)$ in Fourier components,

$$\delta N_e = 2\mathcal{N}_e e^{i(\mathbf{k}, r - \omega t)} \int g_{\omega k}(\mathbf{p}) d^3p / (2\pi\hbar)^3 \quad (40.14)$$

The corresponding change in the charge density is $-e\delta N_e$.

The permittivity is now calculated as in §29: starting from the relation between the charge density and the dielectric polarization vector ($-e\delta N_e = -\text{div } \mathbf{P} = -i\mathbf{k} \cdot \mathbf{P}$), we write

$$\begin{aligned} e\delta N_e &= i(\epsilon_l - 1) \mathbf{E} \cdot \mathbf{k} / 4\pi \\ &= k^2 (\epsilon_l - 1) \varphi_{\omega k} / 4\pi \end{aligned}$$

We thus arrive at the following formula for the electronic part of the longitudinal permittivity of a plasma having an electron distribution function $\mathbf{n}(\mathbf{p})$ (the suffix $\mathbf{0}$ being now omitted);

$$\epsilon_1(\omega, k) - 1 = -\frac{4\pi e^2}{\hbar k^2} \int \frac{n(\mathbf{p} + \frac{1}{2}\hbar\mathbf{k}) - n(\mathbf{p} - \frac{1}{2}\hbar\mathbf{k})}{\mathbf{k} \cdot \mathbf{v} - \omega - i0} \frac{2d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \quad (40.15)$$

(Yu. L. Klimontovich and V. P. Silin, 1952); the pole in the integral is, as usual, avoided in the manner specified by the Landau rule.

In the quasi-classical case, when the conditions (40.2) and (40.3) are satisfied, the functions $n(\mathbf{p} \pm \frac{1}{2}\hbar\mathbf{k})$ can be expanded in powers of $\mathbf{k}$. Then

$$n\left(\mathbf{p} + \frac{1}{2}\hbar\mathbf{k}\right) - n\left(\mathbf{p} - \frac{1}{2}\hbar\mathbf{k}\right) \approx \hbar\mathbf{k} \cdot \partial n(\mathbf{p})/\partial \mathbf{p}$$

and (40.15) becomes the previous formula (29.9) when the relation (40.9) is taken into account. It must be emphasized, however, that the distribution $n(p)$ in (40.15) may relate to a degenerate plasma.

Let us apply this formula to a completely degenerate electron plasma at $T = 0$, with $n(\mathbf{p}) = 1$ for $p < p_F$ and $n(\mathbf{p}) = 0$ for $p > p_F$. Changing the variable of integration in each term in (40.15) by $\mathbf{p} \pm \frac{1}{2}\hbar\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{p}$, we obtain

$$\epsilon_1 - 1 = \frac{4\pi e^2}{\hbar k^2} \int_{p < p_F} \left\{ \frac{1}{\omega_+ - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v} + i0} - \frac{1}{\omega_- - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v} + i0} \right\} \frac{2d^3p}{(2\pi\hbar)^3}$$

where $\omega_{\pm} = \omega \pm \hbar k^2/2m$. An elementary though fairly laborious integration leads to the result

$$\begin{aligned} \epsilon_l(\omega, k) - 1 &= \frac{3\Omega_e^2}{2k^2v_F^2} \{1 - g(\omega_+) + g(\omega_-)\} \\ g(\omega) &= \frac{m(\omega^2 - k^2v_F^2)}{2\hbar k^3v_F} \log \frac{\omega + kv_F}{\omega - kv_F} \end{aligned} \quad (40.16)$$

the logarithm is to be taken as $\log|u| - i\pi$ if its argument $u < 0$. The "plasma frequency" Ω_e is again defined as $\Omega_e = (4\pi N_e e^2/m)^{1/2}$.

In the quasi-classical limit $\hbar k \ll p_F$, $\hbar\omega \ll \epsilon_F$, $\dagger$ formula (40.16) leads to a simple expression that does not involve $\hbar$:

$$\epsilon_1 - 1 = \frac{3\Omega_e^2}{k^2v_F^2} \left[1 - \frac{\omega}{2kv_F} \log \frac{\omega + kv_F}{\omega - kv_F} \right] + \begin{cases} 0 & \text{for } |\omega| > kv_F \\ i.3\pi\Omega_e^2\omega/2(kv_F)^3 & \text{for } |\omega| < kv_F \end{cases} \quad (40.17)$$

The static case is of particular interest. When $\omega = 0$, the expression (40.16) as a function of k has a singularity at the point where $\hbar k$ is equal to the diameter of the Fermi sphere,

$$\hbar k = 2p_F; \quad (40.18)$$

at this point, the argument of one of the logarithms is zero. Near it,

$$\begin{aligned} \epsilon_1(0, k) - 1 &= (e^2/2\pi\hbar\epsilon_F) [1 - \xi \log(1/|\xi|)], \\ \xi &= (\hbar k - 2p_F)/2p_F, \quad |\xi| \ll 1. \end{aligned} \quad (40.19)$$

We shall show that the presence of this singularity (called the Kohn singularity) leads to a change in the nature of the screening of the field of charges in the plasma, which ceases to be exponential. $\ddagger$

We write (40.19) in the form

$$\epsilon_l(0, k) = \beta - \alpha \xi \log(1/|\xi|) \quad (40.20)$$

where $\alpha = e^2/2\pi\hbar v_F$, and the constant β may include the non-singular contribution from the non-degenerate ionic component of the plasma.

The Fourier component of the field due to a small point charge e_1 at rest in the plasma is expressed in terms of the permittivity by

$$\varphi_{\mathbf{k}} = 4\pi e_1/k^2 \epsilon_l(0, k) \quad (40.21)$$

see §31, Problem 1. For the potential $\varphi(r)$ as a function of the distance from the charge e_1 , we have

$$\begin{aligned} \varphi(r) &= \int \varphi_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} d^3k / (2\pi)^3 \\ &= \frac{1}{2\pi^2 r} \operatorname{im} \int_0^\infty \varphi_{\mathbf{k}} e^{ikr} k dk \end{aligned} \quad (40.22)$$

As $k \rightarrow 0$, $\varphi(k)$ tends to a constant and has no singularity. Hence the asymptotic form of the integral in (40.22) as $r \rightarrow \infty$ is determined by the singularity of this function at $hk = 2p_F$. Near that point,

$$\varphi_k = \frac{e_1 \pi \hbar^2}{\beta p_F^2} \left[1 + \frac{\alpha}{\beta} \xi \log \frac{1}{|\xi|} \right].$$

The contribution from this region to the asymptotic value of the integral is

$$\begin{aligned} \varphi(r) &\approx (2e_1 \alpha / \pi \beta^2 r) \operatorname{im} \left(e^{2ip_F r / \hbar} J \right) \\ J &= \int_{-\infty}^\infty \xi \log \frac{1}{|\xi|} e^{2ip_F r / \hbar} d\xi \end{aligned}$$

because of the rapid convergence (see below), the integration with respect to ξ can be taken from $-\infty$ to x .

To calculate the integral J , we divide it into two parts, from $-\infty$ to 0 and from 0 to x , and in each part we turn the contour of integration in the complex ξ -plane until it lies along the positive imaginary axis. Then, putting $\xi = iy$, we obtain

$$J = \int_0^\infty e^{-2p_F ty / \hbar} \left[\log \frac{1}{-iy} - \log \frac{1}{iy} \right] y dy.$$

The difference in the brackets is just $i\pi$, so that $J = i\pi (\hbar/2p_F r)^2$. The final result is

$$\varphi(r) \approx \frac{e_1 \alpha \hbar^2}{2\beta^2 p_F^2} \frac{\cos 2p_F r / \hbar}{r^3} \quad (40.23)$$

Thus the potential of the screened field far from the charge oscillates with an amplitude that decreases according to a power law. This result, derived for a degenerate plasma with $T = 0$, remains valid for low temperatures at distances $r \ll \hbar v_H / T$.

¹At $T = 0$, these conditions are sufficient, since the limiting value of ϵ_I as $\hbar k v_F / \epsilon_F \rightarrow 0$ and $T \rightarrow 0$ is independent of the order of passage to the limits. The relation between $\hbar k v_F$ and T is therefore unimportant.

[‡] The physical consequences of the singularity which results when the condition (40.18) is satisfied were noted by W. Kohn (1959).

PROBLEM

Determine the spectrum of electron oscillations of a degenerate plasma at $T = 0$ in the quasi-classical range of values of k .

SOLUTION. The function $\omega(k)$ is given by $\epsilon(\omega, k) = 0$, with ϵ_1 from (40.I7). For small k ($kv_F \ll \Omega_\epsilon$), it is found that $kv_F/\omega < 1$: expanding $\epsilon(\omega, k)$ in powers of this ratio, we find

$$\omega = \Omega_\epsilon \left[1 + \frac{3}{10} \left(\frac{\hbar r_F}{\Omega_\epsilon} \right)^2 \right] \quad (\text{I})$$

(A. A. Vlasov (938). † This part of the spectrum corresponds to ordinary plasma oscillations: cf. (32.5).

For large k ($kv_F \gg \Omega_\epsilon$, but still $\hbar k \ll p_r$), we find that $\omega \approx kv_F$. Solving the equation $\epsilon_l = 0$ by successive approximation, we find

$$\omega = kv_F \left[1 + 2 \exp \left(-2k^2 v_F^3 / 3\Omega_\epsilon^2 - 2 \right) \right] \quad (\text{2})$$

† The condition $\hbar\Omega_\epsilon \ll \epsilon_F$ for the frequency Ω_ϵ to be quasi-classical in a degenerate plasma is the same as the condition (40.4) for an ideal plasma.

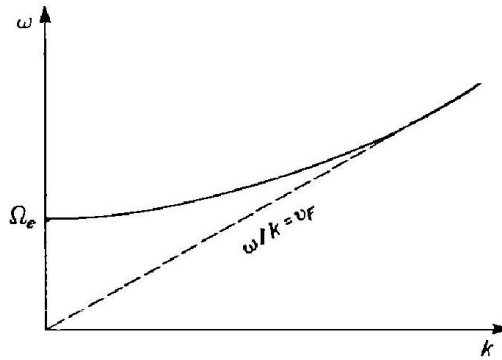


Fig. 12.

(I. I. Gol'dman, 1947). This part of the spectrum is analogous to zero sound in an uncharged Fermi gas; cf. SP 2 (4.16).

Figure 12 shows diagrammatically the form of the spectrum. We have everywhere $\omega/k > v_F$: since $T = 0$, there are no particles with $v > v_F$, and the Landau damping is exactly zero.

15.4 IV Collisions in Plasma by Landau

15.4.1 §41. The Landau Collision Integral

The study of the properties of plasmas, with collisions between particles taken into account, must start with the derivation of the transport equation for the electron and ion distribution functions.

The specific feature of this case is the slow decrease of the Coulomb interaction forces between charged particles. If the Boltzmann collision integral is used as it stands, the result is that the integrals diverge for large distances between the colliding particles. This means that distant encounters are important. At large distances, the particles are deflected with only a slight change in their momenta. The collision integral can consequently be put in a form similar to that which it has in the Fokker-Planck equation. In contrast to this, however, the collision integral is no longer linear in the required distribution functions. But the relative smallness of the changes of momentum in collisions certainly means that the process described

by the collision integral may be treated as diffusion in momentum space. Accordingly, it may be written as

$$C(f) = -\operatorname{div}_p s \equiv -\partial s_a / \partial p_a,$$

where s is the particle flux in momentum space. The problem is to express this flux in terms of the distribution functions.

We write as

$$w f(\mathbf{p}) f'(\mathbf{p}') d^3 q d^3 p'$$

the number of collisions occurring per unit time between a particle with momentum $\mathbf{p}$ and particles with momentum $\mathbf{p}'$ in the range $d^3 p'$; in a collision, $\mathbf{p}$ and $\mathbf{p}'$ become respectively $\mathbf{p} + \mathbf{q}$ and $\mathbf{p}' - \mathbf{q}$. The conservation of momentum in collisions has been taken into account here. The arguments t and $\mathbf{r}$ of the distribution functions are omitted, for brevity. The particles $\mathbf{p}$ and $\mathbf{p}'$ may be of the same or different types (electrons, ions). We shall take w to be expressed as a function of half the sum of the momenta of each particle before and after the collision, and of the momentum transfer q :

$$w\left(\mathbf{p} + \frac{1}{2}\mathbf{q}, \mathbf{p}' - \frac{1}{2}\mathbf{q}; \mathbf{q}\right);$$

it depends, of course, also on the types of particle involved. By virtue of the principle of detailed balancing (2.8), the function w is symmetrical with regard to the interchange of the initial and final particles:

$$w\left(\mathbf{p} + \frac{1}{2}\mathbf{q}, \mathbf{p}' - \frac{1}{2}\mathbf{q}; \mathbf{q}\right) = w\left(\mathbf{p} + \frac{1}{2}\mathbf{q}, \mathbf{p}' - \frac{1}{2}\mathbf{q}; -\mathbf{q}\right). \quad (41.1)$$

The function w contains a delta-function factor which expresses the conservation of energy in collisions (the conservation of momentum has already been taken into account).

Let us consider a unit area at some point $\mathbf{p}$ in momentum space (of particles of a given kind), perpendicular to the p_α -axis. By definition, the flux component s_α is the excess of particles (of that kind) crossing this area from left to right per unit time over those crossing it from right to left. The movement in momentum space is due to collisions. If a particle receives in a collision an α -component of momentum equal to $q_\alpha (> 0)$, the result of such collisions will be for those particles to cross the area from left to right whose values of this component before the collision were from $p_\alpha - q_\alpha$ to p_α . Hence the total number of particles crossing the area from left to right is

$$\sum \int_{q_\alpha > 0} d^3 q \int d^3 p' \int_{p_\alpha - q_\alpha}^{p_\alpha} w\left(p + \frac{1}{2}q, p' - \frac{1}{2}q; q\right) f(p) f'(p') dp_\alpha$$

The summation is taken over all types of particle to which the primed quantities refer (including, of course, the given type to which the unprimed quantities refer). Similarly, the number of particles crossing that area from right to left may be written

$$\sum \int_{q_\alpha > 0} d^3 q \int d^3 p' \int_{p_\alpha - q_\alpha}^{p_\alpha} w\left(\mathbf{p} + \frac{1}{2}\mathbf{q}, \mathbf{p}' - \frac{1}{2}\mathbf{q}; -\mathbf{q}\right) f(\mathbf{p} + \mathbf{q}) f'(\mathbf{p}' - \mathbf{q}) dp_\alpha$$

Because of (41.1), the functions w in the two integrals are the same. The difference of these integrals therefore has in the integrand the difference

$$f(p) f'(p') - f(p + q) f'(p' - q')$$

We now use the fact that the momentum transfer q is small (more precisely, that the values of $\mathbf{q}$ important in the integrals are small in comparison with $\mathbf{p}$ and $\mathbf{p}'$). Expanding the above difference in powers of q , we find as far as the first-order terms

$$\left[-\frac{\partial f(\mathbf{p})}{\partial p_\beta} f'(\mathbf{p}') + f(\mathbf{p}) \frac{\partial f'(\mathbf{p}')}{\partial p'_\beta} \right] q_\beta$$

We can then, to the same accuracy, put in the integrands

$$w\left(\mathbf{p} + \frac{1}{2}\mathbf{q}, \mathbf{p}' - \frac{1}{2}\mathbf{q}; \mathbf{q}\right) \approx w(\mathbf{p}, \mathbf{p}'; \mathbf{q}).$$

The integration over dp_α , which covers the short range from $p_\alpha - q_\alpha$ to p_α , may be replaced by a simple multiplication by the length q_α of this range. The result is

$$s_\alpha = \sum \int_{q_\alpha > 0} d^3q \int w(\mathbf{p}, \mathbf{p}'; \mathbf{q}) \left[f(\mathbf{p}) \frac{\partial f'(\mathbf{p}')}{\partial p'_\beta} - f'(\mathbf{p}') \frac{\partial f(\mathbf{p})}{\partial p_\beta} \right] q_\alpha q_\beta d^3p' \quad (41.2)$$

Because of (41.1), $w(\mathbf{p}, \mathbf{p}'; \mathbf{q})$ is an even function of $\mathbf{q}$, and therefore so is the whole integrand in (41.2). This enables us to replace the integral over the half-space $q_\alpha > 0$ by half the integral over the whole of $\mathbf{q}$ -space.

In rewriting (41.2) we also express w in terms of the collision cross-section by

$$wd^3q = |v - v'| d\sigma$$

As already explained in connection with the form (3.9) for the collision integral, we can then suppose that the number of independent integrations has already been decreased by using the law of conservation of energy. Thus the momentum flux in the momentum space of particles of each type is

$$s_\alpha = \sum \int \left[f(\mathbf{p}) \frac{\partial f'(\mathbf{p}')}{\partial p'_\beta} - f'(\mathbf{p}') \frac{\partial f(\mathbf{p})}{\partial p_\beta} \right] B_{\alpha\beta} d^3p' \quad (41.3)$$

where

$$B_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} \int q_\alpha q_\beta |\mathbf{v} - \mathbf{v}'| d\sigma \quad (41.4)$$

It remains to calculate the quantities $B_{\alpha\beta}$ for collisions of particles with Coulomb interaction.

For a deviation through a small angle, the change q in the momentum of the colliding particles is perpendicular to their relative velocity $\mathbf{v} - \mathbf{v}'$. The tensor $B_{\alpha\beta}$ also is therefore transverse to this vector:

$$B_{\alpha\beta} (v_\beta - v'_\beta) = 0 \quad (41.5)$$

It may be noted at once that this automatically ensures the vanishing of the fluxes (41.3) for an equilibrium distribution of all the particles. With Maxwellian distributions f and f' (having the same temperature T), the integrand in (41.3) becomes

$$(ff'/T) (v'_\beta - v_\beta) B_{\alpha\beta} = 0$$

The vector $\mathbf{v} - \mathbf{v}'$ is also the only vector on which the tensor $\mathbf{B}_{\alpha\beta}$ can depend. Such a tensor, transverse to $\mathbf{v} - \mathbf{v}'$, must have the form

$$B_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} B \left[\delta_{\alpha\beta} - \frac{(v_\alpha - v'_\alpha)(v_\beta - v'_\beta)}{(v - v')^2} \right]$$

where the scalar

$$B = B_{\alpha\alpha} = \frac{1}{2} \int q^2 |\mathbf{v} - \mathbf{v}'| d\sigma$$

Let χ be the angle of deviation of the relative velocity (in the centre-of-mass system of the two particles). For small values of this angle, the momentum change has magnitude $q \approx \mu |v - v'| \chi$, where μ is the reduced mass of the particles. Hence

$$B = \frac{1}{2} \mu^2 |\mathbf{v} - \mathbf{v}'|^3 \int \chi^2 d\sigma = \mu^2 |\mathbf{v} - \mathbf{v}'|^3 \sigma_t$$

where

$$\sigma_t = \int (1 - \cos \chi) d\sigma \approx \frac{1}{2} \int \chi^2 d\sigma$$

is the transport cross-section. The differential cross-section for small-angle scattering in a Coulomb field is given by the Rutherford formula

$$d\sigma \approx \frac{4 (ee')^2 d\sigma}{\mu^2 (\mathbf{v} - \mathbf{v}')^4 \chi^4} \approx \frac{8\pi (ee')^2}{\mu^2 (\mathbf{v} - \mathbf{v}')^{\frac{1}{2}} \chi^3} \frac{d\chi}{\chi^3}, \quad (41.6)$$

where e and e' are the charges on the colliding particles. Hence the transport cross-section is

$$\sigma_t = \frac{4\pi (ee')^2}{\mu^2 (v - v')^4} L, \quad L = \int d\chi / \chi \quad (41.7)$$

The value of $B_{\alpha\beta}$ is consequently

$$B_{\alpha\beta} = \frac{2\pi (ee')^2}{|\mathbf{v} - \mathbf{v}'|} L \left[\delta_{\alpha\beta} - \frac{(v_\alpha - v'_\alpha)(v_\beta - v'_\beta)}{(\mathbf{v} - \mathbf{v}')^2} \right]. \quad (41.8)$$

The integral L is logarithmically divergent. The divergence at the lower limit has a physical cause—the slowness of the decrease of the Coulomb forces, which leads to a high probability of small-angle scattering. In reality, however, in an electrically neutral plasma the Coulomb field of a particle at sufficiently large distances is screened by other charges; let $\chi_{\min}$ denote the order of magnitude of the smallest angles for which the scattering can still be regarded as Coulomb scattering. The divergence at the upper limit arises simply because all formulae have been written on the assumption of small angles, and cease to be valid when $\chi \sim 1$. Since a logarithm of a large argument is fairly insensitive to small changes in that argument, we can take the limits of integration from estimates of their orders of magnitude, writing

$$L = \log (1/\chi_{\min}) \quad (41.9)$$

This quantity is called the Coulomb logarithm. It must be stressed at once that such a method of determining it restricts the whole discussion to what is called logarithmic accuracy, which neglects quantities small compared not only with the large quantity $1/\chi_{\min}$ but also with its logarithm.

A practical estimate of $\chi_{\min}$ depends on whether the scattering of particles is to be described in classical or quantum-mechanical terms; the expression (41.8) itself is valid in either case, since purely Coulomb scattering is described by the Rutherford formula in both classical and quantum mechanics. †

†In the quantum case, the exchange effect has to be taken into account in the scattering of like particles (electrons). This effect does not, however, alter the limiting form (41.6) of the cross-section at small angles.

The Coulomb field of a particle in a plasma is screened at distances of the order of the Debye length a . In the classical case, $x_{\min}$ is defined as the scattering angle for a passage at impact parameter $\sim a$. The corresponding momentum change $q \sim |ee'| |a\bar{v}_{\text{rel}}|$, the product of the force $\sim |ee'| |a^2|$ and the transit time $\sim a | \bar{v}_{\text{rel}} |^{-1}$. Dividing q by the momentum $\sim \mu \bar{v}_{\text{rel}}$, we have $\chi_{\min} \sim |ee'| / a\mu\bar{v}_{\text{rel}}^2$. The condition for classical scattering is $|ee'| / \hbar\bar{v}_{\text{rel}} \gg 1$; see *QM*, 127. Thus we have

$$L = \log (a\mu\bar{v}_{\text{rel}}^2 |ee'|) \quad \text{with} \quad |ee'| / \hbar\bar{v}_{\text{rel}} \gg 1 \quad (41.10)$$

In the opposite limiting case $|ee'| / \hbar\bar{v}_{\text{rel}} < 1$, the scattering must be treated quantum-mechanically, using the Born approximation. The scattering cross-section in this case is expressed in terms of the Fourier component of the scattering potential with wave vector $q/\hbar$. The contribution to this component from the screening charge "cloud" (with dimensions $\sim a$) becomes small when $qa/\hbar \geq 1$; this is then the condition for purely Coulomb scattering. The angle $\chi_{\min}$ is therefore found from the condition

$$a_{\min}a/\hbar \sim \mu\tilde{t}_{\chi_{\min}}a/\hbar \sim 1.$$

In this case, then,

$$L = \log (\mu a\bar{v}_{\text{rel}} / \hbar) \quad \text{with} \quad |ee'| / \hbar\bar{v}_{\text{rel}} \leq 1. \quad (41.11)$$

When $|ee'| \sim \hbar\bar{v}_{\text{rel}}$, the expressions (41.10) and (41.11) coincide, of course.

Let us now write the final expression for the fluxes in momentum space by substituting (41.8) in (41.3):

$$s_{\alpha} = \sum 2\pi (ee')^2 L \int \left(f \frac{\partial f'}{\partial p'_{\beta}} - f' \frac{\partial f}{\partial p_{\beta}} \right) \frac{(v - v')^2 \delta_{\alpha\beta} - (v_{\alpha} - v'_{\alpha})(v_{\beta} - v'_{\beta})}{|v - v'|^3} d^3p' \quad (41.12)$$

The corresponding transport equations are

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + e(\mathbf{E} + v \times \mathbf{B}/c) \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = -\text{div}_{\mathbf{p}} \mathbf{s}, \quad (41.13)$$

where e is the charge on the particles to which f relates, i.e. $-e$ for electrons and ze for ions. The collision integral in the logarithmic approximation for a gas with Coulomb interaction between the particles was determined by L. D. Landau (1936).

The validity of the Landau collision integral depends on the fulfilment of certain conditions. The characteristic lengths $1/k$ over which the distribution function varies significantly must be large compared with the screening radius a , and the characteristic times $1/\omega$ must be large compared with $a/\bar{v}_{\text{rel}}$; in the logarithmic approximation, however, it is sufficient in practice if these conditions are satisfied

in the weak form

$$\bar{k}a < 1, \quad \omega < \bar{v}_{\text{rel}}/a,$$

with $<$ in place of $\ll$.

¹† Here, and in all analogous places below, $\bar{v}_{\text{rel}}$ is the mean relative velocity $|\mathbf{v} - \mathbf{v}'|$ of the two particles. If they are of the same type it is the mean value $\bar{v}$; if they are of different types, it is the larger of $\bar{v}$ and $\bar{v}'$.

PROBLEM

It has been shown in § 34 that, after the perturbations of the electron density with wave vector $\mathbf{k}$ have been removed by Landau damping, the perturbations of the distribution function continue to oscillate as $e^{-ik \cdot vt}$ (34.16). Find the damping of these oscillations by Coulomb collisions at times $t \gg 1/k\bar{v}$.

Solution. We seek the distribution function in the form

$$f = f_0 + \delta f, \quad \delta f = a(t, v) e^{-ik \cdot vt + ik \cdot r}. \quad (t)$$

where δf is the perturbation of the equilibrium distribution f_0 , and a is a slowly varying function of the velocity (changing appreciably only over ranges $-i \gg 1/kt$). On substituting (I) in (4I.12), we need retain in the integrand only the term

$$-f_0(p') \partial \delta f(p) / \partial p \approx (i/m) k t \delta f(p) f_0(p');$$

The remaining terms make only a small contribution, either because the integral is made small by the rapidly oscillating factor $\exp(-ik \cdot vt)$ or because they do not contain the factor $kt \gg 1/\bar{v}$. For the latter reason, too, only the exponential factor need be differentiated in the calculation of div_p . The transport equation then gives

$$\partial a / \partial t = -k_c k_p b_{ap} t^2 a,$$

where in order of magnitude the coefficients $b_{ab} \sim \bar{\mathfrak{P}} \nu$, with ν the collision frequency, Hence

$$a(l, v) = a_0(v) \exp \left\{ -\frac{1}{3} k_{tr} k_\beta b_{\alpha\beta} t^3 \right\}, \quad (2)$$

and so the damping time of the oscillations is

$$\tau_d \sim \nu^{-1/3} (k\bar{v})^{-2/3}.$$

Since the whole theory of Landau damping is valid only if $k\bar{c} \gg \nu$, we have $\tau_d \ll 1/\nu$. The result (2) is correct if the exponent in it is small compared with the exponent kvt in (1); for this to be so, we must have $t \ll (\nu k\bar{v})^{1/2}$. In this time, the oscillations are damped by a factor $\exp[-\sqrt{(k\bar{v}/\nu)}]$.

15.4.2 §42. Energy transfer between electrons and ions

The large difference between the electron mass m and the ion mass M impedes the transfer of energy between electrons and ions: when a heavy and a light particle collide, the energy of each is almost unchanged. The establishment of equilibrium among the electrons alone and the ions alone therefore takes place considerably more quickly than that between electrons and ions. This may easily give rise to a situation where the electron and ion components of the plasma each have a Maxwellian distribution but with different temperatures T_e and T_i , of which T_e is usually the greater.

The difference between the electron and ion temperatures causes an energy transfer between the two components of the plasma, which may be determined as follows (L. D. Landau 1936).

We shall temporarily denote by a prime the quantities pertaining to electrons, leaving unmarked those pertaining to ions. The change in the ion energy per unit volume and unit time is given by the integral

$$dE/dt = \int \epsilon C(f) d^3p = - \int \epsilon \text{div}_p s d^3p$$

or, integrating by parts,

$$dE/dt = \int \mathbf{s} \cdot (\partial \epsilon / \partial \mathbf{p}) d^3 p = \int \mathbf{s} \cdot \mathbf{v} d^3 p \quad (42.1)$$

the integral over an infinite surface in momentum space is, as usual, zero.

In the sums (41.3) which determine the electron and ion fluxes in momentum space, the only terms remaining are those which correspond to electron-ion collisions; the electron-electron and ion-ion terms are zero for Maxwellian distributions. Substituting in these remaining terms the Maxwellian distributions with temperatures T' and T , we obtain for the ion flux

$$s_\alpha = \int f f' \left(\frac{v_\beta}{T} - \frac{v'_\beta}{T'} \right) B_{\alpha\beta} d^3 p'$$

From (41.5), $B_{\alpha\beta} v'_\beta = B_{\alpha\beta} v_\beta$; making this change and substituting the flux in (42.1), we find

$$\frac{dE}{dt} = \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T'} \right) \iint f f' v_\alpha v_\beta B_{\alpha\beta} d^3 p d^3 p' \quad (42.2)$$

Since the electrons have small masses, their mean speeds are large compared with those of the ions. We can therefore put $v'_\alpha - v_\alpha \approx v'_\alpha$ in $B_{\alpha\beta}$. Then the quantities $B_{\alpha\beta}$ no longer depend on the v_α , and in (42.2) we can carry out the integration over $d^3 p$:

$$\int f v_\alpha v_\beta d^3 p = \frac{1}{3} \delta_{\alpha\beta} N \overline{v^2} = \delta_{\alpha\beta} NT/M$$

Thus

$$\frac{dE}{dt} = \frac{NT}{M} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T'} \right) \int f' B d^3 p' \quad (42.3)$$

Finally, substituting here from (41.8) $B = 4\pi e^4 z^2 L/v'$ (where ze is the ion charge), and noting that for a Maxwellian distribution

$$\int f' d^3 p' / v' = N' \sqrt{(2m/\pi T')}$$

we obtain

$$\frac{dE}{dt} = \frac{4NN'z^2 e^4 \sqrt{(2\pi m)L}}{MT^{3/2}} (T' - T) \quad (42.4)$$

The same expression, with the opposite sign, gives the decrease in the energy of the electron component of the plasma, $-dE'/dt$. Expressing the electron energy per unit volume in terms of the electron temperature by $E' = 3N'T'/2$ and resuming the use of the suffixes e and i for electron and ion quantities, we can write the following final expression for the rate of change of the electron temperature:

$$\frac{dT_e}{dt} = -\frac{T_e - T_i}{\tau_{ei}^\epsilon}, \quad \tau_{ei}^\epsilon = \frac{T_e^{3/2} M}{8N_i z^2 e^4 L_e (2\pi m)^{1/2}} \quad (42.5)$$

The Coulomb logarithm here is

$$L_e = \begin{cases} \log(aT_e/ze^2) & \text{for } ze^2/\hbar v_{Te} \geq 1, \\ \log[\sqrt{(mT_e)a/\hbar}] & \text{for } ze^2/\hbar v_{Te} \ll 1. \end{cases} \quad (42.6)$$

The quantity τ_{ei}^ϵ is the relaxation time for the establishment of electron-ion equilibrium.

15.4.3 §43. Mean Free Path of Plasma Particles

We have seen from the derivation in §41 that the transport cross-section σ_t (41.7) serves as a collision parameter in the transport equation. It must therefore also occur in the definition of the mean free path.

For electron-electron (ee) and electron-ion (ei) collisions, the reduced mass $\mu \sim m$, and, since the speeds of the electrons are much greater than those of the ions, we have

$$\mu (v_e - v_i)^2 \sim m v_{Te}^2 \sim T_e$$

Hence follows the estimate of the electron mean free path

$$l_e \sim T_e^2 / 4\pi e^4 N L_e \quad (43.1)$$

with L_e from (42.6). The factors z are omitted from the estimates, it being assumed that $z_i \sim 1$. The electron mean free time τ_e (or its reciprocal, the collision frequency ν_e) is

$$\tau_e \sim 1/\nu_e \sim l_e / v_{Te} \sim T_e^{3/2} m^{1/2} / 4\pi e^4 N L_e \quad (43.2)$$

Note that

$$l_e / a_e \sim (1/L_e) (T_e / N^{1/3} e^2)^{3/2}$$

and $l_e \gg a_e$ by virtue of the condition (27.1) for the plasma to be rarefied. Accordingly, the collision frequency is small in comparison with the electron plasma frequency:

$$\nu_e \ll v_{Te} / a_e = \Omega_e \quad (43.3)$$

Similarly, the ion mean free path with regard to ion-ion collisions is

$$l_i \sim T_i^2 / 4\pi e^4 N L_i, \quad L_i = \log (a T_i / e^2) \quad (43.4)$$

where L_i is the Coulomb logarithm with ion quantities in place of electron ones. The corresponding mean free time is

$$\tau_{ii} \sim 1/\nu_{ii} \sim T_i^{3/2} M^{1/2} / 4\pi e^4 N L_i. \quad (43.5)$$

The quantity τ_e determines the order of magnitude of the relaxation time for the establishment of local thermal equilibrium of the electron component of the plasma, and τ_{ii} the corresponding time for the ion component. Since the frequencies ν_{ee} and ν_{ei} for ee and ei collisions are of the same order, τ_e is not the relaxation time for the establishment of equilibrium between the electrons and the ions; it describes only the rate of momentum transfer from the electrons to the ions, not the rate of energy exchange between them. The relaxation time for electron-ion equilibrium is given by the quantity τ_{ei}^e determined in § 42. A comparison of these various times shows that

$$\tau_{ee} : \tau_{ii} : \tau_{ei}^e \sim 1 : (M/m)^{1/2} : (M/m). \quad (43.6)$$

The mean free path can be used to estimate the transport coefficients of the plasma. To estimate the electrical conductivity σ , we use the familiar elementary "kinetic theory of gases" formula. The particles (carriers) with charge e and mass m , in free motion during a time τ , acquire from the electric field E an "ordered" speed $V \sim \tau e E / m$. The electric current density created by this motion is $j \sim e N V$. The conductivity, which is the proportionality factor between j and E , is therefore

$$\sigma \sim e^2 N \tau / m \sim e^2 N \| m v_T, \quad (43.7)$$

where l, m and v_T are to be taken as the quantities pertaining to the lighter particles, i.e. the electrons. An estimate using this formula gives

$$\sigma \sim T_e^{3/2} / e^2 m^{1/2} L_e. \quad (43.8)$$

The thermal conductivity is estimated similarly with the elementary formula (7.10). Electrons play the main part, and we have $\kappa \sim N_e l_e v_{Te} C_e$ (where $c_e \sim 1$ is the electronic specific heat), whence

$$\kappa \sim T_e^{5/2} / e^4 m^{1/2} L_e \quad (43.9)$$

The viscosity of the plasma, unlike the electrical and thermal conductivities, is due mainly to the movement of the ions, since most of the momentum of the plasma is concentrated in the ion component. Moreover, the momentum of an ion is not much changed by collisions with electrons, and for this reason it is sufficient to consider ii collisions only. From (8.11), the viscosity is estimated as $\eta \sim N_i M l_i v_{ti}$, whence

$$\eta \sim M^{1/2} T_i^{5/2} / e^4 L_i. \quad (43.10)$$

The calculation of the coefficients for the expressions (43.8)-(43.10) requires the solution of the linearized transport equation with the Landau collision integral, which can be done only by approximate numerical methods. As an example, in a hydrogen plasma ($z = 1$) the coefficients in the expressions for σ, κ and η are respectively 0.6, 0.9 and 0.4.

15.4.4 §44. Lorentzian plasmas

In calculating the electron contribution to the transport coefficients in a plasma, it is in general necessary to take account of both ei and ee collisions. However, if the ion charge is sufficiently large, ei collisions may have a predominant effect: the ee collision cross-section is proportional to $(e^2)^2$ and the frequency ν_{re} of such collisions is proportional also to the electron density N_e ; similarly, the frequency of ei collisions is proportional to $(ze^2)^2 N_1 = e^4 z_t N_e$, so that $\nu_{ei} \gg \nu_{ee}$ if $z > 1$. A plasma in which ee collisions may be neglected in comparison with ei collisions is called a Lorentzian plasma. Although this is not a very realistic case, it is interesting both methodologically and for possible application to other systems. †

Since the ion speeds are small compared with the electron speeds, they may be neglected in the first approximation, i.e. the ions may be regarded as at rest with a given distribution. In the problem of the behaviour of the plasma in an external electric field there is a preferred direction, that of the field $\mathbf{E}$. If the electron distribution function differs only slightly from the equilibrium form, $f = f_0(p) + \delta f$, the small correction δf is linear in the field, i.e. has the form $\delta f = \mathbf{p} \cdot \mathbf{E} g(p)$. Under these conditions, the electron-ion collision integral has the same form as that of the collision integral in § 11 for the problem of diffusion of a light gas in a heavy gas:

$$C(f) = -\nu_{ei}(v) \delta f \quad (44.1)$$

with the speed-dependent effective collision frequency

$$\nu_{ei}(\nu) = N_i v \sigma_i^{(ei)}, \quad (44.2)$$

and $\sigma_i^{(ei)}$ the transport cross-section for scattering of electrons by ions. With this quantity given by (41.7), and $zN_i = N_e$, we find

$$\nu_{ei}(v) = 4\pi z e^4 N_e L / m^2 v^3. \quad (44.3)$$

In the rest of this section we shall write $\nu(v)$ simply, omitting the suffixes ei . Let us now calculate the permittivity of a Lorentzian plasma in a spatially uniform (wave vector $k = 0$) but periodically varying ($\propto e^{-i\omega t}$) electric field. The correction δf to the equilibrium distribution depends on the time in the same manner, and the transport equation for it is

$$-i\omega\delta f - e\mathbf{E} \cdot \partial f_0 / \partial \mathbf{p} + \nu(v)\delta f = 0 \quad (44.4)$$

Noting also that $\partial f_0 / \partial \mathbf{p} = -v f_0 / T$, we therefore have

$$\delta f = -(e | T) \mathbf{E} \cdot v f_0 | [\nu(v) - i\omega] \quad (44.5)$$

The permittivity is found by means of the relation (29.4): $-i\omega \mathbf{P} = \mathbf{j}$, or

$$-i\omega(\epsilon - 1)\mathbf{E}/4\pi = -e \int v \delta f d^3p \quad (44.6)$$

Substitution of (44.5) and averaging over the directions of $\mathbf{v}$ (with $\langle v_\alpha v_\beta \rangle = \frac{1}{3} \delta_{\alpha\beta} \mathbf{v}^2$), we obtain

$$\epsilon(\omega) = 1 - \frac{4\pi e^2}{3\omega T} \int \frac{v^2 f_0 d^3p}{\omega + i\nu(v)} \quad (44.7)$$

In the limit $\omega \gg \nu$,[†] this gives

$$\epsilon(\omega) = 1 - \frac{4\pi e^2 N_e}{m\omega^2} + i \frac{4\pi e^2 N_e}{3\omega^3 T} \langle v^2 \nu(v) \rangle, \quad (44.8)$$

where the averaging is over the Maxwellian electron distribution. Calculating the mean value for $\nu(v)$ as in (44.3), we obtain

$$\epsilon(\omega) = 1 - \frac{\Omega_e^2}{\omega^2} + i \frac{4\sqrt{2\pi}}{3} \frac{ze^4 L N_e}{T^{3/2} m^{1/2}} \frac{\Omega_e^2}{\omega^3} \quad (\omega \gg \nu). \quad (44.9)$$

However, the range of validity of this formula also has an upper limit given by the general condition (41.4) for the logarithmic approximation in the collision integral to be applicable, $\omega \ll v_{Te}/a_e = \Omega_e$ (the frequency must be small in comparison with the electron plasma frequency).[‡]

Formula (44.9) has a special significance, since it is valid for any (not only large) values of z . When $\omega \gg \nu$, the collisions cause only small corrections, and so the ei and ee collisions may be treated independently. In the absence of ions, a uniform electric field would cause only a shift of the electrons as a whole, and collisions in such a system could not cause dissipation (represented by the imaginary part ϵ'' of the permittivity); under such conditions, the dissipation is due only to the ei collisions taken into account in (44.9).

In the opposite limiting case, when $\omega \ll \nu$, the permittivity is

$$\epsilon = i.4\pi\sigma/\omega, \quad \sigma = (e^2 N_e / 3T) \langle v^2 / \nu(v) \rangle. \quad (44.10)$$

The quantity σ in this limiting expression is the static conductivity of the plasma: see ECM, §58. The calculation with $\nu(v)$ from (44.3) gives

$$\sigma = \frac{4\sqrt{2}}{\pi^{3/2}} \frac{T^{3/2}}{ze^2 L m^{1/2}} \quad (44.11)$$

[†] For example, a weakly ionized gas, where ei collisions are replaced by collisions between electrons and neutral atoms.

The same result could, of course, also be reached by a direct calculation of the electric current density

$$\mathbf{j} = -e \int \mathbf{v} \delta f d^3p$$

with δ from (44.5) (with $\omega = 0$).

We shall also calculate the other transport coefficients for a Lorentzian plasma, which are related to its behaviour in a constant ($\omega = 0$) electric field and a temperature gradient. Let us first recall the definition of these coefficients (see ECM, §25).

The conditions of thermal equilibrium require, as we know, not only the constancy of temperature but also that of $\mu + U$ throughout the medium, where μ is the chemical potential of the particles and U their energy in the external field. In the present case, we are concerned with equilibrium with respect to the electrons, so that μ is to be taken as their chemical potential, and $U = -e\varphi$, where φ is the electric field potential. Accordingly, the electric current $\mathbf{j}$ and the dissipative energy flux $\mathbf{q}$ are simultaneously zero only if $T = \text{constant}$ and $\mu - e\varphi = \text{constant}$, i.e. $\nabla T = \mathbf{0}$, $\nabla\mu + e\mathbf{E} = \mathbf{0}$. The expressions for $\mathbf{j}$ and $\mathbf{q}'$ are written as follows, satisfying the condition stated:

$$\mathbf{E} + \frac{1}{e}\nabla\mu = \frac{1}{\sigma}\mathbf{j} + \alpha\nabla T \quad (44.12)$$

$$\mathbf{q}' = \mathbf{q} - (\varphi - \mu/e)\mathbf{j} = \alpha T\mathbf{j} - \kappa\nabla T \quad (44.13)$$

Here σ is the electrical conductivity of the medium, κ the thermal conductivity, α the thermoelectric coefficient; the relation between the coefficients of ∇T in (44.12) and $\mathbf{j}$ in (44.13) follows from Onsager's principle. The quantity $(\varphi - \mu/e)\mathbf{j}$ which is subtracted from the total energy flux is the convective energy flux. †

To calculate the transport coefficients, we start from the transport equation

$$-e\mathbf{E} \cdot \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{p}} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{r}} = -\nu(v)\delta f. \quad (44.14)$$

Substituting the equilibrium distribution in the form ‡

$$f_0 = \exp[(\mu - \epsilon)/T], \quad (44.15)$$

we find

$$\delta f = -\frac{f_0}{T\nu(v)}(eE + \nabla\mu) \cdot \mathbf{v} + f_0 \frac{\mu - \epsilon}{T^2\nu(v)} \mathbf{v} \cdot \nabla T. \quad (44.16)$$

The thermoelectric coefficient is calculated from the coefficient in the equation $\mathbf{j} = -\alpha\omega\nabla T$ with $\mathbf{E} + \nabla\mu/e = \mathbf{0}$. We write

$$\begin{aligned} \mathbf{j} &= -e \int \mathbf{v} \delta f d^3p \\ &= -\frac{e}{T^2} \int f_0 \frac{\mu - \epsilon}{\nu(v)} \mathbf{v} (\mathbf{v} \cdot \nabla T) d^3p \end{aligned}$$

[†] The symbol ν (without argument) means the value of $\nu(v)$ for $v = v_T$. In the present case, $\nu = 4\pi ze^4 N_e L / m^{1/2} T_e^{3/2}$.

‡ The calculation of ϵ'' for $\omega \geq \Omega_e$ is discussed in §48.

¹ The relations (44.12) and (44.13) are written with a different notation in ECM, §25, where φ and $\mathbf{E}$ stood for $\varphi - \mu/e$ and $\mathbf{E} + \nabla\mu/e$. That definition is permissible in the phenomenological approach, but not appropriate in the kinetic theory, where $-e\mathbf{E}$ must be the force acting on the electron.

‡ The use of the same letter ϵ to denote both the permittivity and the electron energy $\frac{1}{2}mv^2$ is unlikely to cause any misunderstanding.

and find after the averaging over directions

$$\alpha = \frac{N_e e}{3\sigma T^2} \left\langle \frac{v^2(\mu - \epsilon)}{\nu(v)} \right\rangle = \frac{1}{eT} \left\{ \mu - \frac{\langle v^2 \epsilon \mid \nu(v) \rangle}{\langle v^2 / \nu(v) \rangle} \right\}. \quad (44.17)$$

Calculation with $\nu(r)$ from (44.3) gives [†]

$$\alpha = \frac{1}{e} \left(\frac{\mu}{T} - 4 \right). \quad (44.18)$$

To calculate the thermal conductivity we note that for $j = 0$ we must have $\mathbf{E} + \nabla\mu/e = \alpha \nabla T$. Substituting this value in (44.16), with α from (44.18), gives

$$\delta f = \frac{f}{T\nu(v)} \left(4 - \frac{\epsilon}{T} \right) v \cdot \nabla T$$

With this function, the calculation of the energy flux

$$q = \int v \epsilon \delta f d^3 p$$

leads to

$$\kappa = \frac{N_e}{3T^2} \left\langle \frac{v^2 \epsilon (4T - \epsilon)}{v(v)} \right\rangle \quad (44.19)$$

and finally

$$\kappa = \frac{16\sqrt{2}}{\pi^{3/2}} \frac{T^{5/2}}{ze^4 L m^{1/2}} \quad (44.20)$$

PROBLEM

Find the collisional part of the damping of electron plasma waves.

Solution. If the imaginary part of the permittivity is small, the contributions to it from Landau damping and from collisions are additive. Then ϵ is given by (44.9), and equating it to zero gives $\omega = \Omega_e - i\gamma$, where the damping ratio is

$$\gamma = \frac{\nu_{er}}{3\sqrt{(2\pi)}} = \frac{2\sqrt{(2\pi)}}{3} \frac{ze^4 L N_e}{m^{1/2} T_e^{3/2}}$$

The ratio

$$\gamma/\Omega_e = (\sqrt{2}zL/3) \left(e^2 N_e^{1/n} / T_e \right)^{1/2} \leq I$$

by viriue of the condition for the plasma to be rarefied, and this justifies the use of (44.9).

[†]In classical statistical physics, the chemical potential contains a term of the form ζT with an indefinite constant ζ (corresponding to the indefinite additive constant in the entropy). This in turn gives an indefinite constant ζ/e in α . The indefiniteness does not, however, influence any observable effects, since such terms (ζ/e) ∇T cancel on the two sides of (44.12). If f_0 is written in the form (44.15), this fixes the choice of the constant ζ : $\mu = T \log [N_e / (2\pi m T)^{3/2}]$.

15.4.5 §45. Runaway electrons

The rapid decrease of the Coulomb cross-section with increasing speed of the colliding particles has the result, as we shall see, that in an electric field, however weak, the distribution function of sufficiently fast electrons in a plasma is highly distorted.

An electron moving at the thermal speed v in an electric field E acquires during its mean free time a directed speed

$$V \sim eEl/mv \sim eE/mvN_e v_t(v) \sim v^3 mE/4\pi e^3 L N_e,$$

with the cross-section σ_t from (41.7). For $v \gg v_c$, where

$$v_c = (4\pi N_e e^3 L / mE)^{1/2} \quad (45.1)$$

we have $V \sim v$, and for $v > v_d$ the mean free path and time are governed by the speed V . The momentum acquired by the electron in the mean free time is then

$$eElV \sim eE/VN_e \sigma_t(V) \sim V^3 m^2 E / 4\pi e^3 L N_e \sim mV (V/v_c)^2$$

The momentum transferred by the electron at the end of its free path is $\sim mV$. Hence we see that electrons with sufficiently high speeds will be accelerated without limit; these are called runaway electrons. If $v_c \gg (T_e/m)^{1/2}$, the phenomenon will be observed only in the tail of the Maxwellian distribution; the electric field must then satisfy the condition

$$E \ll E_c = 4\pi e^3 L N_e / T_e. \quad (45.2)$$

Under these circumstances the problem of runaway electrons may be solved as a stationary one. The majority of the electrons, whose distribution is Maxwellian, act as a large reservoir from which a small steady flux moves towards high energies. †

It is evident, from the fact that the runaway electrons result from directed acceleration by the electric field, that they move chiefly at small angles θ to the direction of the field. If, however, we seek to calculate only the flux of runaway electrons, their distribution function need not be determined completely; it is sufficient to find the energy distribution $\bar{f}$ averaged over angles.

The transport equation for the electron momentum distribution in the electric field is

$$\frac{\partial f}{\partial t} - e\mathbf{E} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} + \text{div}_{\mathbf{p}} \mathbf{s} = 0 \quad (45.3)$$

† The phenomenon of runaway electrons was pointed out by H. Dreicer (1958); the quantitative theory given here is due to A. V. Gurevich (1960).

where s is the collisional flux in momentum space. In spherical polar coordinates p, θ, φ in momentum space, with the polar axis along the force $-e\mathbf{E}$, we have

$$\begin{aligned} -e\mathbf{E} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} &= eE [\cos \theta \frac{\partial f}{\partial p} - (\sin \theta / p) \frac{\partial f}{\partial \theta}] \\ &= eE \left[\frac{\cos \theta}{p^2} \frac{\partial}{\partial p} (p^2 f) - \frac{1}{p \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (f \sin^2 \theta) \right]. \end{aligned}$$

The divergence of the flux is

$$\text{div}_p s = \frac{1}{p^2} \frac{\partial}{\partial p} (p^2 s_p) + \frac{1}{p \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (s_\theta \sin \theta).$$

We average (45.3) over angles, i.e. multiply by $2\pi \sin \theta d\theta / 4\pi$ and integrate. All terms containing $\partial/\partial \theta$ disappear, and the factor $\cos \theta$ may in the first approximation be replaced by unity. We thus obtain for the averaged function $\bar{f}$ the equation

$$\frac{\partial \bar{f}}{\partial t} + \frac{eE}{p^2} \frac{\partial}{\partial p} (p^2 \bar{f}) + \frac{1}{p^2} \frac{\partial}{\partial p} (p^2 \bar{s}_p) = 0. \quad (45.4)$$

This contains only the radial component of the flux in momentum space, which is related to the energy transfer in collisions. The contribution to it from ei collisions is evidently small in comparison with that from ee collisions.

Since the runaway electrons are only a very small fraction of the total, in calculating the flux s_p we need consider only their collisions with the main mass of Maxwellian electrons (not with one another), whose speeds are much less than those of the runaway electrons. Under these conditions there is no need to calculate s_p afresh; we can write by direct analogy with (22.5)

$$s_p = -T_e \nu_{ef}(v) m \left[\frac{\partial f}{\partial p} + \frac{p}{mT_e} f \right] \quad (45.5)$$

where $\nu_{ce}(v) = 4\pi e^4 N_e L / m^2 v^3$ is the frequency of Coulomb collisions between fast and slow electrons (cf. (44.3)). † Since the expression (45.5) refers to electrons with speeds $v \sim v_c$, we have for the Coulomb logarithm

$$L = \log (mv_c^2 a / e^2) \quad (45.6)$$

The quantity

$$\bar{S}_p = \bar{s}_p + eE \bar{f} \quad (45.7)$$

is seen from the form of (45.4) to be the total radial flux (from collisions and from the action of the field) in momentum space. According to the foregoing discussion, the distribution of runaway electrons may be sought in a stationary form, i.e. the time derivative in the transport equation (45.4) may be neglected. Then

$$4\pi p^2 \bar{S}_p = \text{constant} \equiv n_{\text{run}} \quad (45.8)$$

This equation, with $\bar{s}_p$ given by (45.5), is a differential equation determining the distribution function $\bar{f}$. The constant n_{run} gives the required total number of runaway electrons per unit time and volume.

We use the dimensionless variable u and constant b defined by

$$u = p/p_c, \quad b = E/E_c, \quad p_c = (mT_e/b)^{1/2} \quad (45.9)$$

Then equation (45.8) becomes

$$-\frac{b}{u} \frac{d\bar{f}}{du} - (1 - u^2) \bar{f} = C \quad (45.10)$$

where the constant C differs from n_{run} by a constant factor. Since we assume the field $E \ll E_c$, the parameter $b \ll 1$; in the present problem, this is the small parameter which gives the order of the approximation. †

The solution of (45.10) is

$$\bar{f} = F - CF \int_0^u (u/F) du \quad (45.11)$$

¹HI deriving (22.5), we used only the smallness of the energy transfer in collisions, and that of the target particle speed relative to the incident electron speed. To change to the present case, we need only replace M in (22.5) by m and take as the mean free path ! that for ee collisions.

where

$$F = \frac{N_e}{(2\pi m T_e)^{3/2}} \exp \left\{ \frac{1}{2b} \left(\frac{1}{2} u^4 - u^2 \right) \right\} \quad (45.12)$$

is the solution of the homogeneous equation. The normalization factor in F is determined from the condition that as $u \rightarrow 0$ the function $\bar{f}$ should become the Maxwellian distribution

$$f_0 = \frac{N_e}{(2\pi m T_e)^{3/2}} \exp(-u^2/2b)$$

As $u \rightarrow \infty$, the function F increases without limit, whereas $\bar{f}(u)$ must remain finite. Hence we have the condition $\bar{f}/F \rightarrow 0$ as $u \rightarrow \infty$, from which the constant C is found: ‡

$$C = \frac{N_e}{(2\pi m T_e)^{3/2}} \left[\int_0^x \exp \left\{ -\frac{1}{2b} \left(\frac{1}{2} u^4 - u^2 \right) \right\} u du \right]^{-1} \quad (45.13)$$

The integral is calculated by the saddle-point method, the exponent being expanded near its maximum at $u = 1$. This yields the following dependence of the number of runaway electrons per unit time and volume on the field E :

$$t_{\text{run}} \sim N_e \nu_{ee}(v_{\text{Te}}) \exp(-E_c/4E). \quad (45.14)$$

†In particular, analysis of the angular part of the transport equation shows that the directions of motion of the runaway electrons lie in the range of angles $\theta \sim b^{1/s}$.

‡ The formulation of the boundary conditions here is analogous to that in § 24.

The coefficient of the exponential here is only dimensionally correct; a more accurate calculation would go beyond the approximation being used and call for a more accurate solution of the transport equation from the start.

15.4.6 §46. Convergent collision integrals

The transport equation with the Landau collision integral allows problems of plasma physics to be solved only with logarithmic accuracy: the large argument of the Coulomb logarithm is not fully determined. This uncertainty is due to the divergence of the integrals at large and small scattering angles. As already mentioned, the divergence at large angles has no fundamental significance: it results only from the expansion in powers of the momentum transfer q , and does not occur in the Boltzmann collision integral itself. The divergence at small angles is due to neglecting the screening effect of the plasma on the scattering of particles by one another in it. To calculate the collision integral to a higher than logarithmic accuracy, we must consistently take account of screening throughout, and not only when determining the range of integration in the Coulomb logarithm.

It has been noted in §41 that the conditions for the collision integral with screened interaction between charged particles to be applicable require that the distribution functions should not vary greatly in times $\sim a/\bar{v}_{\text{rel}}$ and over distances $\sim a$. These same conditions enable us to treat the screening of the charges macroscopically as the result of dielectric polarization of the plasma.

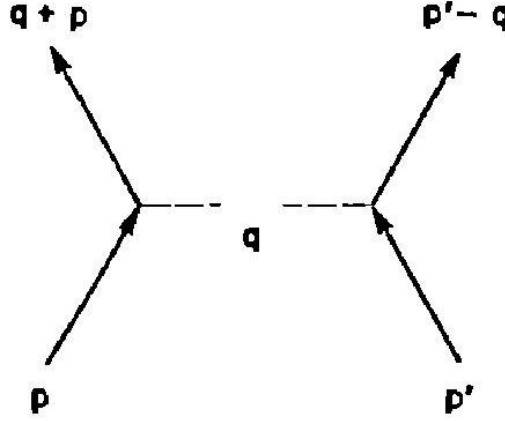
We shall consider the problem in two limiting cases: (1) when the Born approximation of quantum mechanics can be applied to particle collisions, (2) when the collision process is quasi-classical.

The Born case

The first case occurs when

$$|ee'|/\hbar\bar{v}_{\text{rel}} \ll 1. \quad (46.1)$$

The influence of the dielectric medium on particle scattering is most clearly expressed in the language of the diagram technique. In the Born approximation, the scattering of two particles is described (in the non-relativistic case) by the diagram †



in which the broken line corresponds to the function $4\pi/q^2$, the Fourier component of the Coulomb potential of a unit charge (q being the momentum transferred in scattering). The only effect of the medium is to replace this function by the potential component in the medium, $4\pi/q_\alpha q_\beta \epsilon_{\alpha\beta}$, where $\epsilon_{\alpha\beta}(\omega, q/\hbar)$ is the permittivity tensor of the medium, and $\hbar\omega$ is the energy transferred; cf. SP 2, §85. The scattering amplitude correspondingly contains an extra factor $q^2/q_N q_\beta \epsilon_{\alpha\beta}$, and the cross-section contains the squared modulus of this. Thus

$$d\sigma = d\sigma_{\text{Ru}} q^4 / |\epsilon_{c\beta\beta} q_u q_\beta|^2 \quad (46.3)$$

For simplicity, we shall henceforward assume the plasma to be isotropic. Then the tensor $\epsilon_{\alpha\beta}$ reduces to two scalars ϵ_t and ϵ_l , and the product $\epsilon_{\alpha\beta} q_\alpha q_\beta = \epsilon_l q^2$ involves only one of these; we shall omit the suffix l , and denote by ϵ the longitudinal permittivity.

Thus the scattering cross-section becomes

$$d\sigma = d\sigma_{\text{Ru}} / |\epsilon(\omega, q/\hbar)|^2 \quad (46.4)$$

where $d\sigma_{\text{Ru}}$ is the ordinary Rutherford cross-section for scattering in a vacuum. † Note also that the energy transferred in a collision is related to the momentum transfer by

$$\hbar\omega = \mathbf{q} \cdot \mathbf{V} \quad (46.5)$$

where V is the velocity of the centre of mass of the colliding particles. ‡ The magnitude of the vector q is related to the scattering angle χ in the centre-of-mass system by the usual formula

$$q = 2\mu |\mathbf{v} - \mathbf{v}'| \sin \frac{1}{2}\chi \quad (46.6)$$

where $\mu = mm'/(m + m')$.

The collision integral which automatically gives a correct treatment of large and small scattering angles, and is free from divergence, is obtained by substituting (46.4) in the usual Boltzmann integral (cf. (3.9)):

¹÷ As in §41. the unprimed and primed quantities refer to the two colliding particles (which may be of the same or different types).

$$C(f) = \sum \int \{f(\mathbf{p} + \mathbf{q})f'(\mathbf{p}' - \mathbf{q}) - f(\mathbf{p})f'(\mathbf{p}')\} \frac{|\mathbf{v} - \mathbf{v}'| d\sigma_{\text{Ru}}}{|\epsilon(\omega, q/\hbar)|^2} d^3p' \quad (46.7)$$

the summation is over all types of particle to which the primed quantities refer.

The transport equation with the collision integral (46.7) is very complicated, not only because the integrand cannot be expanded in powers of q , but because the permittivity of the plasma is itself defined in terms of the distribution functions sought. An important simplification is attainable only in the case of a slight departure from equilibrium, when the transport equation can be linearized. Then the permittivity is to be calculated with the equilibrium distribution functions, and so is independent of the corrections sought.

The quasi-classical case

Let us now go to the opposite limiting case, where

$$|ee'|/\hbar\vec{v}_{\text{rel}} \gg 1 \quad (46.8)$$

and the quasi-classical approximation is applicable to the scattering of particles. In this case, we cannot take into account the effect of the medium on the scattering in the same manner for small and large scattering angles (as was possible in the Born case); it is necessary to consider these two ranges separately and then join the results at intermediate angles.

The field of a charge e moving with velocity $\mathbf{v}$ in a dielectric medium is given by the equation

$$\text{div } D = 4\pi e\delta(\mathbf{r} - \mathbf{v}t)$$

In Fourier components, this gives for the field potential [†]

$$\varphi_k = \frac{4\pi e}{k^2\epsilon(k \cdot v, k)} e^{-ik \cdot vt} \quad (46.9)$$

For small scattering angles, the change in the momentum of the particle is given (see Mechanics, §20) by the classical formula

$$\mathbf{q} = - \int (\partial U / \partial \mathbf{r}) dt \quad (46.10)$$

where U is the interaction energy of the two particles, and the integration is taken along the straight path $\mathbf{r} = \boldsymbol{\rho} + \mathbf{v}'t$ ($\boldsymbol{\rho}$ being the impact parameter vector). [‡] Expressing the energy $U = e'\varphi$ as a Fourier integral:

$$U = 4\pi ee' \int \frac{e^{2(k \cdot r - \omega)}}{k^2\epsilon(\omega, k)} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \quad (46.11)$$

with $\omega = k \cdot v$, and substituting in (46.10), we obtain

$$\mathbf{q} = -4\pi ee' \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \left\{ \frac{\mathbf{k}e^{ik \cdot p}}{k^2\epsilon(\omega, k)} \int_{-x}^x e^{-|k \cdot (v-v')|} dt \right\}$$

[†]H In the scattering of identical particles (through angles that are not small), $\mathbf{q}$ is to be taken as the Coulomb scattering cross-section with exchange effects (see QM, § 137).

[‡] This is easily shown by expressing the velocities $\mathbf{v}$ and $\mathbf{v}'$ of the particles in terms of $\mathbf{V}$ and the velocity $v - v'$ of their relative motion, and using the fact that V and $|v - v'|$ are unchanged in scattering.

The inner integral gives $2\pi\delta(k_1)/|\mathbf{v} - \mathbf{v}'|$, where k_1 is the component of the vector $\mathbf{k}$ in the direction of $\mathbf{v} - \mathbf{v}'$. Then, eliminating the delta function by integration over dk_1 , we find

$$q = -\frac{4\pi i e e^*}{|\mathbf{v} - \mathbf{v}'|} \int \frac{\mathbf{k}_\perp e^{i\mathbf{k}_\perp \cdot \boldsymbol{\rho}}}{k_\perp^2 \epsilon(\omega, k_\perp)} \frac{d^2 k_\perp}{(2\pi)^2} \quad (46.12)$$

where $\mathbf{k}_\perp$, like $\boldsymbol{\rho}$, is a two-dimensional vector in the plane perpendicular to $\mathbf{v} - \mathbf{v}'$. The frequency is

$$\omega = \mathbf{k}_\perp \cdot \mathbf{v} = \mathbf{k}_\perp \cdot \mathbf{V} \quad (46.13)$$

In the rest of this section we shall omit the suffix $\perp$ and denote by k this two-dimensional vector.

We now calculate from (46.12) the quantities

$$B_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} \int q_\alpha q_\beta |\mathbf{v} - \mathbf{v}'| d^2 \rho \quad (46.14)$$

which appear in the collision integral when it is expanded in powers of the small quantity q : the cross-section $d\sigma$ in (41.4) is here written as the impact area $d^2 \rho$. Writing the product of two integrals (46.12) as a double integral over $d^2 k d^2 k'$, we carry out the integration over $d^2 \rho$ by means of the formula

$$\int e^{i\rho(k+k')} d^2 \rho = (2\pi)^2 \delta(k + k')$$

The integration over $d^2 k'$ then simply removes the delta function, leaving

$$B_{\alpha\beta} = \frac{2e^2 e'^2}{|v - v'|} \int \frac{k_\alpha k_\beta d^2 k}{k^4 |\epsilon(k \cdot V, k)|^2} \quad (46.15)$$

where we have also used the fact that $\epsilon(-\omega, k) = \epsilon^*(\omega, k)$ by (28.9). These integrals converge for small k , since $|\epsilon|^{-2} \rightarrow 0$ as $\omega, k \rightarrow 0$.[†]

Equation (46.15) involves the permittivity at the non-zero frequency $\omega = k \cdot V$; it is therefore sometimes said to take account of dynamic screening. The integrand in (46.15) depends on the direction of V through the argument $k \cdot V$ of the function ϵ . This dependence disappears when the integral is calculated in the logarithmic approximation, in which the integration is limited to the range from $k \sim 1/a$ to $k \sim \mu\bar{v}^2 |ee'|$. The most important values of k in the integral are those far from both these limits; in that range, $|\epsilon|^2 = 1$, and the integral reduces to $\int k_\alpha k_\beta d^2 k / k^4$. Averaging the integrand over all directions of $\mathbf{k}$ in the plane perpendicular to $\mathbf{v} - \mathbf{v}'$, we return to the previous expression (41.8) with $L = \int dk/k$.

To eliminate the divergence at large momentum transfers we must, as already mentioned, join the collision integral expanded in powers of q to the unexpanded integral (J. Hubbard 1961, O. Aono 1962).

Let us consider the difference

[†]The derivation of (46.9) assumes a linear relation between $\mathbf{D}$ and $\mathbf{E}$, and therefore a sufficiently weak field. This condition is certainly satisfied (in a slightly non-ideal gas) at distances $r \geq a$, from which arises the divergence that is to be eliminated by the use of formula (46.9). These distances correspond to values of $k \leq 1/a$, for which the permittivity is considerably different from unity.

[‡]It does not matter whether q is calculated as the change in momentum of each of the colliding particles, or as the change in momentum of their relative motion.

^{††}The elimination of the divergence due to Coulomb field screening in the Landau collision integral is due to R. Balescu (1960) and A. Lenard (1960). The completely convergent expression (46.7) was given by A. A. Rukhadze and V. P. Silin (1961).

$$C_{cl}(f) - C_B(f), \quad (46.16)$$

where C_t is the required convergent collision integral, and C_B is given by (46.7), which in the Born case is the correct collision integral, but here has only an auxiliary role.

We divide the range of variation of the scattering angle into two parts: (I) $\chi < \chi_1$, (II) $\chi > \chi_1$, where χ_1 is chosen so that

$$|ee'|/\mu a \bar{v}_{rel}^2 \ll \chi_1 \ll 1. \quad (46.17)$$

In classical scattering through small angles in a Coulomb field, the scattering angle χ is related to the impact parameter ρ by

$$\rho = 2|ee'|/\mu(\mathbf{v} - \mathbf{v}')^2 \chi$$

Hence the value $\chi = \chi_1$ corresponds, with the condition (46.17), to $\rho = \rho_1 \ll a_1$, so that the screening at this distance is unimportant and the scattering may in fact be regarded as purely Coulomb scattering. The same applies to the whole of the range $\rho < \rho_1$, i.e. $x > x_1$. The scattering cross-section in this range consequently has the Rutherford form, and the corresponding contribution to the collision integral is

$$C_{cl}^{ul}(f) = \sum \int_{x>x_1} [f(p+q)f'(p^*-q) - f(p)f'(p')] |v-v'| d\sigma_{Ru}$$

The contribution from the range $x > x_1$ to the integral (46.7) is exactly similar: in that range, $q > q_1$, and by the condition (46.8)

$$q_1/\hbar \sim \mu \bar{v}_{rel} \chi_1/\hbar \gg |ee'|/\hbar \bar{v}_{rel} a \gg 1/a,$$

so that we may put $|\epsilon|^2 = 1$ in (46.7). Thus a contribution to the difference (46.16) arises only from the range $\chi < \chi_1$ ($\rho > \rho_1$), which remains to be considered.

Throughout this range, the momentum transfer is small, and so the collision integral may be expanded in powers of q . The quantities $B_{\alpha\beta}$ which appear in the expanded C_{cl} are calculated as the integrals (46.14) with q from (46.12). The contribution to these integrals from the range $\rho > \rho_1$ is

$$(B_{\alpha\beta})_{il}^1 = \frac{(ee')^2}{2\pi^2 |\mathbf{v} - \mathbf{v}'|} F_{\alpha\beta}$$

$$F_{\alpha\beta} = \int_{\rho_1}^{\infty} d^2\rho \left(\int_0^x \frac{ik_{\alpha} e^{i\mathbf{k}\cdot\rho}}{k^2\epsilon} d^2k \int_0^x \frac{ik_{\beta} e^{i\mathbf{k}\cdot\rho}}{k^2\epsilon} d^2k \right) \quad (46.18)$$

where the limits in the double integrals (over $d^2\rho$ and d^2k) are conventionally shown by the limits for ρ and k . We can rewrite the $F_{\alpha\beta}$ identically as

$$\begin{aligned}
F_{\alpha\beta} = & \int_0^x d^2\rho \left(\int_0^{q_1/k} \dots d^2k \right)_{\Omega} \left(\int_0^{q_1/h} \dots d^2k \right)_{\beta} \\
& - \int_0^{p_1} d^2\rho \left(\int_0^{q_1/h} \dots d^2k \right)_{\alpha} \left(\int_0^{q_1/h} \dots d^2k \right)_{\beta} \\
& + \int_{p_1}^x d^2\rho \left(\int_0^x \dots d^2k \right)_{\alpha} \left(\int_{q_1/h}^x \dots d^2k \right)_{\beta} \\
& + \int_{p_1}^x d^2\rho \left(\int_{q_1/h}^x \dots d^2k \right)_{\alpha} \left(\int_0^{q_1/h} \dots d^2k \right)_{\beta}
\end{aligned} \tag{46.19}$$

The first term here, when transformed as in the derivation of (46.15), gives a contribution to (46.18)

$$\frac{2(ee')^2}{|v-v'|} \int_0^{q_1/h} \frac{k_a k_{\beta}}{k^4 |\epsilon|^2} d^2k$$

This expression is the same as would be obtained by an expansion of the integral (46.7) taken over the range $\chi < \chi_1$; † it therefore makes no contribution to the difference (46.16).

To transform the remaining terms in (46.19), we note that we may put $\epsilon = 1$ in their integrands: the integrals then remain convergent, and their values are determined by the range $k \sim q_1/h$, in which $ka \gg 1$ and therefore $|\epsilon| \approx 1$. It is also important that, by virtue of the condition (46.8),

$$q_1 \rho_1 / h = 2|ee'|/h v_{\text{rel}} \gg 1 \tag{46.20}$$

we need therefore retain only the terms that remain finite as $q_1 \rho_1 / h \rightarrow 0$. In this limit, the third and fourth terms in (46.19) vanish. Thus there remains only

$$(B_{\alpha\beta})_{\text{cl}}^1 - (B_{\alpha\beta})_B^1 = -\frac{(ee')^2}{2\pi^2 |v-v'|} \int_0^{p_1} d^2\rho \left(\int_0^{q_1/h} i k_{\alpha} e^{ik \cdot \rho} \frac{d^2k}{k^2} \int_0^{q_1/h} i k_{\beta} e^{ik \cdot \rho} \frac{d^2k}{k^2} \right) \tag{46.21}$$

where the suffixes cl and B signify that the values of $B_{\alpha\beta}$ relate to the expansions of the integrals C_{cl} and C_B respectively.

Each of the two integrals over d^2k is parallel to the vector ρ ; after integration over these directions (in the plane perpendicular to $\mathbf{v} - \mathbf{v}'$), we obtain for the difference (46.21) the expression (41.8) with the opposite sign and

$$L = \int_0^{\rho_1} \rho d\rho \left[\frac{i}{2\pi} \int_0^{q_1/h} \int_0^{2\pi} \cos \varphi \cdot e^{ik\rho \cos \varphi} d\varphi dk \right]^2$$

† The Rutherford cross-section for scattering through small angles, expressed in terms of q , is

$$d\sigma_{\text{Ru}} = \frac{4(ce')^2}{q^4 |v-v'|^2} d^2q,$$

if we use the formulae $q \approx \mu |v-v'| \chi$, $d\chi \approx d^2q/\mu^2 (v-v')^2$.

Using the familiar integral representation of the Bessel functions, and the equation $J'_0(x) = -J_1(x)$, we can rewrite this integral as

$$\begin{aligned}
L &= \int_0^{\rho_1} \rho d\rho \left[\int_0^{q_1/\hbar} J_1(k\rho) dk \right]^2 \\
&= \int_0^{\rho_1 q_1/\hbar} [J_0(x) - 1]^2 \frac{dx}{x}
\end{aligned}$$

or, integrating by parts,

$$L = \log(q_1 \rho_1 / \hbar) + 2 \int_0^\infty J_1(x) [J_0(x) - 1] \log x dx$$

Here we have used the fact that the parameter $\rho_1 q_1 / \hbar$ (which does not involve the auxiliary quantity χ_1) is large; accordingly, the upper limit is replaced by infinity in the remaining integral, and in the first term we put $J_0(q_1 \rho_1 / \hbar) \approx 0$. With the values

$$\begin{aligned}
\int_0^x J_1(x) \log x dx &= -C + \log 2 \\
\int_0^x J_0(x) J_1(x) \log x dx &= \frac{1}{2}(\log 2 - C)
\end{aligned}$$

where $C = 0.577 \dots$ is Euler's constant ($\gamma = e^C = 1.78 \dots$), and with (46.20), we have finally

$$L = \log \frac{\gamma |ee'|}{\ddot{H} |\mathbf{v} - \mathbf{v}'|} \quad (46.22)$$

The total result of these calculations is that in the quasi-classical case the collision integral without divergence may be expressed as

$$C_c(f) = C_B(f) - C_L(f). \quad (46.23)$$

where C_B is given by (46.7), and C_L is the Landau collision integral with the Coulomb logarithm (46.22). It must be emphasized that, in the latter, $|v - v'|$ is the exact variable, not the mean value $\bar{v}_{\text{rel}}$.

Because of the approximations made in the derivation, this result is of course valid only with "improved logarithmic" accuracy: the transport equation with the collision integral (46.23) enables us to improve the accuracy of the calculations only as regards determining the exact coefficient in the argument of the large logarithm. To this accuracy, the quantity $\hbar$ naturally drops out of all the results; in (46.23) it acts only as an auxiliary parameter.

PROBLEMS

Problem I. In the Born case with improved logarithmic accuracy. calculate the imaginary part of the permittivity of a singly charged ($z = I$) equilibrium ($T_i = T_e$) plasma for frequencies $\omega \geq \nu_s$.

Solution. In calculating ϵ'' when $\omega \gg \nu$, we need consider only ei collisions, as explained in connection with the derivation of (44.8). Since the collision integral (46.7) differs from the usual Boltzmann integral only by the factor $|\epsilon|^{-2}$ in front of $d\sigma_{\text{Ru}}$, the required ϵ'' can be calculated by means of the same formula (44.8):

$$\epsilon''(\omega) = \frac{4\pi e^2 N_i N_e}{3T\omega^3} \langle v_e^3 (\sigma_i)_i \rangle_e \quad (\text{I})$$

where $\langle \dots \rangle_e$ and $\langle \dots \rangle_i$, denote averaging over the equilibrium distribution of electron velocities $\mathbf{v}_e$ and ion velocities $\mathbf{v}_i$ respectively. The only difference from the calculations in §44 is that σ_i is now defined as

$$\sigma_t = \int (1 - \cos \chi) |\epsilon(q \cdot v_t/\hbar, q/\hbar)|^{-2} d\sigma_{\text{Ru}} \quad (2)$$

and that σ_1 has to be averaged over the ion velocities (which of course are not negligible here); in the argument $\omega = q \cdot V/\hbar$ of the function ϵ , the velocity of the centre of mass of the electron and the ion has been replaced, as an approximation, by the velocity of the ion. The Rutherford cross-section is written as

$$d\sigma_{\text{Ru}} = \frac{(ze^2)^2 m^2}{4p_e^4} \cdot \frac{2\pi \sin X dX}{\sin^{\frac{81}{2}} X} = \frac{8\pi (ze^2)^2 m^2}{p_e^2 q^3} dq \quad (3)$$

where

$$q = 2p_e \sin \frac{1}{3}\chi, \quad 1 - \cos \chi = q^2/2p_e^2, \quad 0 \leq q \leq 2p_e$$

and $\mathbf{p}_e = m\mathbf{v}_e$ is the electron momentum.

The function $\epsilon(\omega, q/\hbar) - 1$ is determined by (31.11), and consists of electronic and ionic parts. Since its argument in (2) $\hbar\omega = q \cdot v_1 \ll qv_e$, the electronic part may be taken with $\omega = 0$. Then

$$\epsilon(\mathbf{q}, v_i/\hbar, q/\hbar) - 1 = (\hbar^2/q^2 a_e^2) \left\{ 2 + F(v_{iq}/\sqrt{2}v_{\pi i}) \right\}, \quad (4)$$

where v_q is the component of v_q along q , and we have used the fact that $a_q = a_q$ if $z = I$. Substitution of (3) and (4) in (2) and an obvious change of variables gives

$$(\sigma_1)_i = \frac{2\sqrt{\pi}e^4}{p_e^3} \int_0^{4r_e^2 a_e^2/\hbar^2} \int_0^x \frac{\zeta e^{-\xi^2} d\xi d\zeta}{[\zeta + 2 + F^2(\xi)]^2 + [F^2(\xi)]^2}$$

where $F = F' + iF''$. The integration over $d\zeta$ is elementary; in substituting the limits, we must note that $\hbar^2/p_e^2 a_e^2 \ll 1$, and reject all terms $\sim \hbar^2/p_e^2 a_e^2$ and those of higher orders. The result is

$$(\sigma_r)_i = (4\pi e^4/m^2 v_e^4) [\log(2mv_e a_e/\hbar + A)] \quad (5)$$

where

$$A = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-\sigma'} \left\{ \frac{2 + F'}{F''} \left[\tan^{-1} \frac{2 + F'}{F''} - \frac{1}{2}\pi \right] - \frac{1}{2} \log [(2 + F')^2 + F'^2] \right\} d\xi$$

Here we have used the fact that F^r and F'' are respectively even and odd functions. A numerical calculation gives $A = -0.69$.

The averaging in (I) is carried out by means of the formulae

$$(v^{-1}) = (2m/\pi T)^{1/2} \\ \left\langle \frac{\log v}{v} \right\rangle = \left(\frac{m}{2\pi T} \right)^{1/2} \left[\log \frac{2T}{m} - C \right]$$

C being Euler's constant. The final result is

$$\epsilon'' = \frac{4\sqrt{(2\pi)}}{3} \frac{e^4 N_e}{T^{3/2} m^{1/2}} \frac{\Omega_e^2}{\omega^3} L_B, \quad L_B = \log \frac{\alpha_B (mT)^{1/2} a_e}{\hbar}, \\ \log \alpha_B = \frac{3}{2} \log 2 - \frac{1}{2} C + A = \log 1.06 \quad (6)$$

(V. I. Perel' and G. M. Éliashberg 1961).

Problem 2. The same as Problem I, but in the quasi-classical case.

Solution. From (46.23) the expression for σ_1 in the quasi-classical case is found by subtracting $\log(\gamma e^2/\hbar x)$ from the logarithm in (5):

$$(\sigma_1)_4 = \frac{2\pi e^4}{m^2 v_e^3} \left[\log \frac{2m v_r^2 a_e}{\gamma e^2} + A \right] \quad (7)$$

For ϵ^* , we get formula (6), with the logarithm L_B replaced by

$$L_{a1} = \log(\Gamma a_r \alpha_{a1}/e^2). \quad \log \alpha_{a1} = 2 \log 2 - 2C + A = \log 0.63 \quad (8)$$

Problem 3. Determine with improved logarithmic accuracy the rate of energy transfer from electrons to ions in a singly charged ($z = 1$) plasma, assuming the temperature difference between the electrons and the ions to be small ($\delta T = T_r - T_i \ll T_r$).[†]

SOLUTION Since the ratio m/M is small (and therefore so is the energy transfer per event), it is clear from the start that the equation for the electron distribution function reduces to one of the Fokker-Planck type. It is (see §21)

$$\frac{\partial f_e}{\partial t} = \frac{1}{p_e^2} \frac{\partial}{\partial p_e} \left\{ p_e^2 B(p_e) \left[\frac{\partial f_e}{\partial p_e} + \frac{v_e}{T_r} f_e \right] \right\}$$

We multiply by $p_e : 12m$ and integrate over $4\pi p_e^2 dp_e$. After integrating by parts, we find as the rate of change of the electron energy

$$\frac{dE_r}{dt} = - \int B v_r \left[\frac{\partial f_r}{\partial p_r} + \frac{v_r}{T_4} f_e \right] d'p_r$$

Assuming the electron distribution function Maxwellian, and the temperature difference small, we have

$$\begin{aligned} \frac{dE_e}{dt} &= \left(\frac{1}{T_e} - \frac{1}{T_r} \right) \int B v_e^2 f_e d^2 p_e \\ &\approx - (\delta T/T^2) N_e (B v_e^2)_e \end{aligned} \quad (9)$$

The coefficient B , as in (21.1), is expressed in terms of the mean square of the change in the electron momentum in a collision with an ion:

$$B = \frac{\Sigma (\Delta p_e)^2}{2\delta I} = \frac{1}{2} N_v v_e \int ((\Delta p_e)^2)_4 d\sigma \quad (10)$$

The value of $\int p_e$ is given by (46.5):

$$\Delta p_e \approx -\mathbf{V} \cdot \mathbf{q}/v_e \approx -\mathbf{v}, \mathbf{q}/v_e \equiv v_{iq} q/v_e$$

Substituting in (10) and thence in (9), and using the relation between q and the scattering angle x from Problem I, we get

$$dE_l/dt = - (\delta T/T^2) N m^2 \left(v_l^3 (v_{4q}^2 \sigma_t)_l \right)_l \quad (N_t = N_e \equiv N) \quad (11)$$

Formula (II) is exactly analogous to (I) in Problem I, and the subsequent calculations are therefore practically identical. In the Born case,

$$(v_{sq}^2 \sigma_t)_l = \frac{4\pi e^4 T}{m^2 M v_c^4} \left[\log \frac{2m v_r a_e}{\hbar} + A_1 \right]$$

where t_1 is an integral which differs from A in Problem I by having an additional factor $2\xi^2$ in the integrand, a numerical calculation gives $A_1 = -0.52$. The averaging over electron velocities is as in Problem 1. The final result is

$$\frac{dE_e}{dt} = -\frac{4\sqrt{(2\pi m)N^2e^2}}{MT^{3/2}}L_B\delta T, \quad L_B = \log\left(\beta_B(mT)^{1/2}a_e/\hbar\right) \quad (12)$$

where

$$\log \beta_B = \frac{3}{2} \log 2 - \frac{1}{2}C + A_1 = \log 1.26.$$

Similarly, in the quasi-classical case, we obtain an expression in the same form (12) but with L_B replaced by

$$L_{cl} = \log(Ta_c\beta_{cl}/e^2), \quad \log \beta_{al} = 2 \log 2 - 2C + A_1 = \log 0.75. \quad (13)$$

Formulae (12) and (13) refine the results of §42 by determining (for the case of a small temperature difference) the numerical factor in the argument of the logarithm in (42.6).

15.4.7 §47. Interaction via plasma waves

In some cases, the inclusion of dynamic screening of the Coulomb interaction of particles in a plasma not only refines the argument of the Coulomb logarithm, but also leads to qualitatively new effects. To investigate these, we can put the collision integral in a form that gives the exact contribution from small-angle scattering, but only with logarithmic accuracy the contribution from large-angle scattering.

In the quasi-classical case, the large scattering angles ($\chi \sim 1$) arise from small impact parameters:

$$\rho \leq |ee'|/\mu\bar{v}_{rel}^2$$

The required collision integral has the Landau form, with the $B_{\omega\beta}$ from (46.15):

$$B_{\alpha\beta} = \frac{2(ee')^2}{|\mathbf{v} - \mathbf{v}'|} \int \frac{k_\alpha k_\beta d^2k}{k^4 |\epsilon(\mathbf{k} \cdot \mathbf{V}, k)|^2} \quad (47.1)$$

where the integration is taken over the range up to

$$k_{\max} \sim \mu\bar{v}_{rel}^2/|ee'|. \quad (47.2)$$

In the opposite (Born) case, the required form of the collision integral is found by expanding the integrand in (46.7) in powers of q . The result is again a Landau integral, with the $B_{\alpha\beta}$ given by the same formula (47.1), except that

$$k_{\max} \sim \mu\bar{v}_{rel}/\hbar; \quad (47.3)$$

the value of k is $q/\hbar$ for a momentum transfer $q \sim \mu\vec{v}_{rel}$. Let us mention once more that the physical significance of the cut-off at large k is the same in the classical and Born cases: it takes place at scattering angles $\chi \sim 1$. The different relations between k and χ in the two cases lead, however, to different expressions for $k_{\max}$.

The Landau collision integral with the $B_{\alpha\beta}$ from (47.1) is called the Balescu-Lenard integral

† We can rewrite (47.1) in a form more convenient for the subsequent analysis:

$$B_{\alpha\beta} = 2(ee')^2 \int_{-\infty}^{\infty} \int_{k \leq k_{\max}} \delta(\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}) \delta(\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}') \frac{k_\alpha k_\beta d^3k d\omega}{k^4 |\epsilon(\omega, \mathbf{k})|^2} \quad (47.4)$$

[†] This problem was discussed by R. R. Ramazashvili, A. A. Rukhadze and V. P. Silin (1962).

where the integration is now over three-dimensional (instead of two-dimensional) vectors $\mathbf{k}$. The two delta functions in the integrand ensure the equality $\mathbf{k} \cdot \mathbf{v} = \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}'$, i.e. that $\mathbf{k}$ is transverse to $\mathbf{v} - \mathbf{v}'$. The integration over ω replaces the argument ω in $\epsilon(\omega, k)$ by the necessary value $\omega = \mathbf{k} \cdot \mathbf{v} = \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}' = \mathbf{k} \cdot \mathbf{V}$.

Note that the factor $|\epsilon(\omega, k)|^{-2}$ in the integrand in (47.4) becomes infinite for values of $\omega = \mathbf{k} \cdot \mathbf{V}$ and $\mathbf{k}$ such that $\epsilon(\omega, k) = 0$, i.e. for values corresponding to the dispersion relation for longitudinal plasma waves. These values of k may make a large contribution to the collision integral. This contribution may be physically described as the result of interaction between particles by their emission and absorption of plasma waves. The effect will be considerable, however, only if the plasma contains sufficiently many particles whose speeds are comparable with or greater than the phase velocity $v_{ph} = \omega/k$ of the waves, since only such particles can satisfy the necessary relation $\omega = \mathbf{k} \cdot \mathbf{V}$.

Let us consider a plasma in which the electrons and ions have different temperatures T_e and T_i . When $T_e \approx T_i$, only electron plasma waves with phase velocity $v_{ph} \gg v_{Te}$ can propagate in the plasma without appreciable damping; the number of electrons that can "exchange" waves in this case is therefore exponentially small.

If $T_e \gg T_i$, however, ion-sound waves also are able to propagate in the plasma; their phase velocity satisfies the inequalities

$$v_{Ti} \ll \omega/k \ll v_{Te}. \quad (47.5)$$

These waves can make an important contribution to the collision integral between electrons (V. P. Silin 1962).

Let $B_{\alpha\beta}^{tpl}$ denote the part due to this effect in the electron-electron quantities $B_{\alpha\beta}^{(ee)}$. It arises from the range of integration in (47.4) that lies near the root of $\epsilon(\omega, k) = 0$ corresponding to the dispersion relation for ion-sound waves. This root $\omega(k)$ has a small imaginary part (the damping ratio of the wave); when ω has real values in the range of integration, the real part of the function $\epsilon = \epsilon' + i\epsilon''$ passes through zero, while the imaginary part remains small. Using formula (30.9), we write the factor $|\epsilon|^{-2}$ in the integrand in (47.4) as

$$\frac{1}{|\epsilon|^2} = \frac{1}{\epsilon'^2 + \epsilon''^2} = \frac{\pi}{|\epsilon''|} \delta(\epsilon')$$

For the electron-electron collision integral, the velocities $\mathbf{v}$ and $\mathbf{v}'$ in (47.4) relate to electrons, and because of the inequality $\omega \ll kv_{Te}$ the terms ω may be omitted from the arguments of the two delta functions. Thus the relevant part of $B_{\alpha\beta}^{(ee)}$ is

$$B_{\alpha\beta}^{(p)} = 2\pi e^4 \int_{-x}^x \int \delta(\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}) \delta(\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}') \delta(\epsilon') \frac{k_\alpha k_\beta d^3 k d\omega}{k^4 |\epsilon''(\omega, k)|} \quad (47.6)$$

the integration over $d^3 k$ being over the range (47.5) for a given ω . We can transform the integral over $d^3 k$ to new variables

$$\kappa = \mathbf{k} \cdot \mathbf{n}, \quad k_1 = \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}, \quad k_2 = \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}',$$

where $\mathbf{n}$ is a unit vector along $\mathbf{v} \times \mathbf{v}'$. Direct calculation of the Jacobian of the transformation shows that $d^3 k$ is replaced by $d\kappa dk_1 dk_2 |v \times v'|$. The integration over $dk_1 dk_2$ removes the delta functions (which make $k_1 = k_2 = 0$), and then $\mathbf{k} = \kappa \mathbf{n}$. The variable κ takes both positive and negative values; with integration over positive values only, we write

$$B_{\alpha\beta}^{(p)} = \frac{2\pi e^4 n_\alpha n_\beta}{|v \times v'|} 2 \iint_{-\infty}^{\infty} \frac{\delta[\epsilon'(\omega, \kappa)]}{\kappa^2 |\epsilon''(\omega, \kappa)|} d\omega d\kappa \quad (47.7)$$

¹⁵ The formal derivation of this integral will be given at the end of § 51.

The permittivity of a two-temperature plasma in the ion-sound wave region (47.5) is given by †

$$\epsilon' = 1 - \Omega_i^2/\omega^2 + 1/k^2 a_e^2 \left\{ \frac{\Omega_e^2}{v_{Te}^3} + \frac{\Omega_i^2}{v_{Ti}^3} \exp(-\omega^2/2k^2 v_{Ti}^2) \right\} \quad (47.8)$$

The main contribution to the integral over $d\kappa$ in (47.7) comes (as will be confirmed by the subsequent calculation) from the range $a_e \kappa \geq 1$; the last term in $\epsilon'(\omega, \kappa)$ is therefore negligible. Since

$$\delta(1 - \Omega_i^2/\omega^2) = \frac{1}{2} \Omega_i [\delta(\omega - \Omega_i) + \delta(\omega + \Omega_i)]$$

the integration over $d\omega$ in (47.7) gives

$$B_{\alpha\beta}^{(p)} = n_\alpha n_\beta \frac{4\pi e^4 \Omega_j}{|v \times v'|} \int \frac{d\kappa}{\kappa^2 \epsilon''(\Omega_i, \kappa)},$$

or, substituting the expression for ϵ'' and using the variable $\xi = \kappa^2 a_i^2$,

$$B_{\alpha\beta}^{(p)} = n_\alpha n_\beta \frac{2\sqrt{(2\pi)} e^4 v_T a_e^2}{|v \times v'| a_i^2} \int \frac{d\xi}{1 + \exp(-1/2\xi + \frac{1}{2}L_1)} \quad (47.9)$$

where

$$L_1 = \log(\Omega_i^4 v_{re}^6 / \Omega_e^4 v_{Ti}^6) = \log(z^2 M T_e^3 / m T_i^3) \quad (47.10)$$

Because of the conditions (47.5), the integration in (47.9) must be taken over the range $(\Omega_i a_i / \Omega_e a_e)^2 \ll \xi \ll 1$. Since the integral converges for small ξ , the lower limit may be taken as zero.

As $L_1 \rightarrow \infty$, the integral in (47.9) tends to zero; assuming that L_1 is fairly large, we shall calculate it in the logarithmic approximation, i.e. take only the first term in the expansion in powers of $1/L_1$. The main contribution to the integral comes from the range where the exponential term in the denominator is negligible. For this, we must have $-1/2\xi + \frac{1}{2}L_1 > 1$, i.e. the integral is to be taken from 0 to $1/(L_1 - 1) \approx 1/L_1$,

which gives simply $1/L_1$. The final result is therefore

$$B_{\alpha\beta}^{(n)} = n_\alpha n_\beta \frac{2\sqrt{(2\pi)} e^4 z v_{Te} T_e}{|v \times v'| T_i L_1} \quad (47.11)$$

The total value of the $B_{\alpha\beta}^{(ee)}$ in the electron-electron collision integral is found by adding (47.11) to the ordinary Coulomb expression (41.8), with the Debye length

$$a = (a_e^2 + a_i^{-2})^{-1/2} \approx a_i$$

in the argument of the Coulomb logarithm L . The contribution (47.11) of the plasma waves becomes predominant when

$$z T_e / T_i L L_1 \gg 1 \quad (47.12)$$

† See (33.3). The ionic contribution to ϵ'' is also included in (47.8). Although it is exponentially small in the region (47.5), it determines the range of integration in (47.9) below.

15.4.8 §48. Plasma absorption in the high-frequency limit

The frequency range in which the formula (44.9) is valid for the imaginary part of the plasma permittivity is limited by the inequalities $\Omega_r \gg \omega \gg \nu_{er}$. The first inequality is the general condition for the collision integral with screened Coulomb interaction to be applicable. Let us now consider the limit opposite to this, for which

$$\omega \gg \Omega_e \quad (48.1)$$

We can note immediately that here the real part ϵ' of the permittivity is certainly close to unity, and the imaginary part ϵ'' is small.

Dissipation of the energy of the variable external field is caused by ei collisions, whose duration is of the order of, or less than, the period of the field. This means that, for $\omega \gg \Omega_e$, collisions will be important which occur at distances $\sim v_e / \omega \ll v_t / \Omega_e = a_e$. At such distances the Coulomb field of the ions is not screened, and the collisions are therefore purely two-particle ones, not multi-particle as they essentially are when the interaction is screened. Under these conditions, the individual field energy absorption events become processes inverse to bremsstrahlung in pair collisions of charged particles. This enables us to use the principle of detailed balancing to express ϵ'' in terms of the bremsstrahlung cross-section (V. L. Ginzburg 1949).

The dissipation Q of the electromagnetic field energy per unit volume of the medium and per unit time is expressed in terms of ϵ'' by (30.5). In order to relate this quantity to the bremsstrahlung cross-section, we assume that the field is created by a monochromatic plane wave in which the energy density is

$$\mathcal{E} = (\overline{E^2} + \overline{\mathbf{H}^2}) / 8\pi = |\mathbf{E}|^2 / 8\pi$$

in the latter expression, it is assumed that $\mathbf{E}$ is expressed as a complex quantity (cf. the third footnote to §30). Since the permittivity is nearly unity, we put here $\epsilon = 1$. Then formula (30.5) may be written

$$Q = \omega \epsilon'' \mathcal{E}. \quad (48.2)$$

On the other hand, the dissipation is equal to the difference between the energy Q_{is} absorbed in electron-ion collisions and the energy radiated in these collisions. That is, the energy Q_s of the stimulated (not the spontaneous) emission, which generates photons coherent with the original field and in that sense indistinguishable from it.

The cross-section for spontaneous emission of a photon, i.e. the ordinary bremsstrahlung, may be written as

$$d\sigma_{wp} = \frac{w(\mathbf{p}', \mathbf{p})}{v} \delta(\epsilon - \epsilon' - \hbar\omega) \frac{d^3k}{(2\pi)^3} d^3p' \quad (48.3)$$

where $\mathbf{k}$ is the photon wave vector, $\mathbf{p}$ and $\mathbf{p}'$ the initial and final momenta of the electron. The product $N_i v d\sigma_p$, where N_i is the number density of ions, is the probability per unit time for the electron to undergo emission of a photon; the function $w(\mathbf{p}', \mathbf{p})$ depends also on the polarization of the photon emitted. Integrating over the directions of p' and k , and summing over the polarizations of the photon, we obtain the frequency-differential bremsstrahlung cross-section $d\sigma_\omega$; the delta function in (48.3) is removed by integration with respect to $\epsilon' = p'^2/2m$. Thus

^{1‡} In the range that is important in the integral, $\xi \sim I/L_1$, i.e. $\kappa \sim |a_1 L_1|^{1/2}$. Then $\kappa a_e \sim a_e / a_t L_1|^{1/2} \sim (T_d/T_1 L_1)^{1/2} > 1$, in accordance with the assumption made above.

$$d\sigma_\omega = (4m^2v'/\pi vc^3) \bar{w}\omega^2 d\omega$$

where $\bar{w}(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$ is the value of $w(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$ averaged over the directions of $\boldsymbol{\gamma}$ and $\mathbf{p}'$: this value is independent of the polarization of the photon, and hence the summation over the latter amounts to multiplication by 2. With the "effective emission" κ_ω defined by

$$\hbar\omega d\sigma_\omega = \kappa_\omega d\omega$$

we can then write

$$\bar{w} = (\pi vc^3/4m^2v'\hbar\omega^3) \kappa_\omega \quad (48.4)$$

The stimulated emission cross-section differs from (48.3) only by the factor N_{ke} , the number of photons in the quantum state with wave vector $\mathbf{k}$, and polarization $\mathbf{e}$ parallel to $\mathbf{E}$ (see *RQT*, 844). Hence the total energy of the stimulated emission is

$$Q_{st} = N_i \sum_{\mathbf{e}} \int N_{\mathbf{ke}} \hbar\omega w(\mathbf{p}', \mathbf{p}) f(\mathbf{p}) \delta(\epsilon - \epsilon' - \hbar\omega) \frac{d^3k}{(2\pi)^3} d^3p d^3p'$$

where $f(p)$ is the electron distribution function. We shall take this function to be Maxwellian, depending only on the magnitude p . Averaging over the directions of p and $\mathbf{p}'$, and noting that from the monochromaticity of the field

$$\sum_{\mathbf{e}} \int N_{ke} \frac{d^2k}{(2\pi)^3} = \mathcal{E}/\hbar\omega,$$

we can write

$$Q_{st} = N_i \mathcal{E} \int \bar{w} f(p) \delta(\epsilon - \epsilon' - \hbar\omega) d^3p d^3p' \quad (48.5)$$

The energy absorbed in the inverse transitions with change of electron momentum $\mathbf{p}' \rightarrow \mathbf{p}$ (inelastic electron scattering in the electromagnetic field) is calculated similarly. According to the principle of detailed balancing, the probability functions w which determine the cross-sections for the direct and reverse processes are equal. We therefore get an expression for Q_{abs} that differs from (48.5) only in that the distribution function $f(p)$ is replaced by $f(p')$. The dissipation $Q = Q_{abs} - Q_{st}$; a comparison with (48.2) shows that

$$\epsilon'' = (N_i/\omega) \int \bar{w} [f(p') - f(p)] \delta(\epsilon - \epsilon' - \hbar\omega) d^3p d^3p' \quad (48.6)$$

We shall consider only frequencies such that

$$\hbar\omega \ll T. \quad (48.7)$$

Then the difference $p' - p$ is small, and we can put

$$f(p') - f(p) = -(df/d\epsilon)\hbar\omega = (\hbar\omega/T)f(p)$$

and in the remaining factors $p = p'$. Substituting this in (48.6) and expressing $\bar{w}$ in terms of κ_ω by (48.4), we finally obtain the following expression for the imaginary part of the permittivity:

$$\epsilon''(\omega) = N_1 N_e (\pi^2 c^3 / T \omega^3) \langle v \kappa_\omega \rangle \quad (48.8)$$

where the angle brackets denote averaging over the Maxwellian distribution of electrons.

Let us apply this formula in two limiting cases: the quasi-classical case and the Born case. In the first of these, i.e. when

$$ze^2/\hbar v \gg 1. \quad (48.9)$$

the frequency range $\omega \gg \Omega_e$ can be reduced further to

$$mv_{Te}^3 | ze^2 \gg \omega \gg \Omega_e. \quad (48.10)$$

The quantity on the left is the reciprocal of the electron time of flight at a distance from the ion such that the scattering angle is of the order of unity. It is easily seen that (48.7) necessarily follows from the conditions (48.9) and (48.10). In the quasi-classical case the effective emission at the frequencies (48.10) in a collision between an electron and an ion at rest is given by

$$\kappa_\omega = (16z^2e^6/3v^2c^3m^2) \log(2mv^3/\gamma\omega ze^2) \quad (48.11)$$

where $\gamma = e^C = 1.78\dots$, and C is Euler's constant; see Fields (70.21). Substituting in (48.8) and carrying out the averaging we obtain †

$$\epsilon'' = \frac{4\sqrt{(2\pi)}}{3} \frac{ze^4N_e}{T^{3/2}m^{1/2}} \frac{\Omega_e^2}{\omega^3} \log \frac{2^{5/2}T^{3/2}}{\gamma^{5/2}\omega ze^2m^{1/2}} \quad (48.12)$$

In the Born case, i.e. when $ze^2/\hbar v \ll 1$, the effective emission at frequencies $\hbar\omega \ll T$ is given by ‡

$$\kappa_\omega = (16z^2e^6/3v^2c^4m^2) \log(2mv^2/\hbar\omega). \quad (48.13)$$

A calculation with (48.8) gives

$$\epsilon'' = \frac{4\sqrt{(2\pi)}}{3} \frac{ze^4N_e}{m^{1/2}T^{3/2}} \frac{\Omega_e^2}{\omega^3} \log \frac{4T}{\gamma\hbar\omega'} \quad (48.14)$$

which differs from (44.9) only in the argument of the logarithm.

15.4.9 §49. Quasi-linear theory of Landau damping

The theory of plasma oscillations in §§29 – 32 is based on solving the transport equation in the linear approximation of perturbation theory. The condition for its validity is that the correction δf (29.2) to the distribution function be small in comparison with the unperturbed function f_0 :

$$\frac{c\mathbf{E}}{|\mathbf{k} \cdot \mathbf{v} - \omega|} \cdot \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{p}} \ll f_0. \quad (49.1)$$

For only slightly damped plasma oscillations with frequency $\approx \Omega_e$ and wave number $k \ll \Omega_e/v_{Te}$, it is thus necessary that

$$(eE/\Omega_e) \partial f_0/\partial p \ll f_0.$$

For a Maxwellian plasma, this condition (with both sides squared) can be written

$$E^2/4\pi \ll N_e T_e. \quad (49.2)$$

+Using the result that

$$\int_0^x e^x \log x dx = -C$$

‡ See RQT (92.16). In going from this formula to (48.14), we have also used the fact that when $\hbar\omega < T = mv$ the electron loses only a small part of its energy by radiation.

This form has a simple physical significance: the wave-field energy density must be much less than the kinetic energy density of the plasma electrons.

The condition (49.2) ensures that the correction δf is small for most of the electrons. However, even if it is satisfied, there are a relatively small number of resonant particles for which (49.1) may not be satisfied, which are moving almost in phase with the wave ($k \cdot v \approx \omega$) and thus take part in Landau damping; their distribution function may be considerably altered by even a weak field. This change is a non-linear effect, and its nature therefore depends greatly on the spectrum (in ω and k) of the wave field, since it is only in the linear approximation that the various Fourier components of the field act independently on the particles.

Here we shall consider electromagnetic perturbations in a plasma that are an assembly of plasma waves with wave vectors taking a continuous range of values in some interval $\Delta \mathbf{k}$.

If the initial perturbation includes a wide range of wave numbers $k \sim \Omega_k/v_{Te}$, the Landau damping extends to a large number of electrons that are in the same conditions as regards the effect of the field on them. In consequence, the distortion of the distribution function is relatively small at all speeds; the linear theory, with the condition (49.2), is therefore valid throughout the development of the perturbation.

On the other hand, if the perturbation contains wave vectors in only a narrow range Δk near a value $k_0 \ll \Omega_e/v_{Te}$, then the resonance range of electron velocities,

$$|\Delta v| \sim \Delta (\Omega_e/k) \sim (v_0/k_0) |\Delta \mathbf{k}|, \quad v_0 = (\Omega_e/k_0) k_0/k_0 \quad (49.3)$$

is also small and lies near $v_0 \gg v_{Te}$. Thus only a comparatively small number of electrons participate in Landau damping, and the electron distribution function may be greatly changed.

The quantitative theory of this phenomenon will be given here for the case where the perturbation is an almost monochromatic wave whose amplitude and phase are modulated in space according to some statistical law. The spectrum of k values for the initial perturbation is narrow:

$$|\Delta \mathbf{k}|/k_0 \ll 1, \quad (49.4)$$

but at the same time

$$|\Delta k|/k \gg (1/v_0) (e |\varphi_0|/m)^{1/2}, \quad (49.5)$$

where φ_0 is the order of magnitude of the wave electric field potential amplitude (the significance of this condition will be explained below). By (49.2) (where $E \sim k\varphi_0$) the expression on the right of the inequality (49.5) is small, $e |\varphi_0|/mv_0^2 \ll 1$. We shall also assume the field to be uniform on average throughout the plasma; this means that $\mathbf{E}^2$ averaged over the statistical distribution of wave phases and amplitudes is independent of the coordinates. Such an averaging is equivalent to one over regions of space with dimensions $\Delta x \gg 1/|\Delta k|$.

The field $\mathbf{F}$ at the initial instant is expressed as a Fourier integral:

$$\mathbf{E} = \int \mathbf{E}_k e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} d^3k / (2\pi)^3 \quad (49.6)$$

where $\mathbf{E}_{-\mathbf{k}} = \mathbf{E}_k^*$ since $\mathbf{E}$ is real. The hypothesis (49.4) as to the nature of the initial perturbation signifies that the integration in (49.6) is in practice taken only over the neighbourhoods of the points $k = \pm k_0$. The condition of spatial uniformity of the perturbation is easily formulated by writing the quadratic tensor $E_\alpha E_\beta$ as a double integral:

$$E_\alpha E_\beta = \iint E_{\mathbf{k}\alpha} E_{\mathbf{k}'\beta} e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}} \frac{d^3k d^3k'}{(2\pi)^6}$$

After averaging over the statistical distribution, this expression should be independent of $\mathbf{r}$.[†] For this to be so, the mean value $\langle E_{\mathbf{k}\alpha} E_{\mathbf{k}'\beta} \rangle$ must contain the delta function $\delta(\mathbf{k} + \mathbf{k}')$. Since the plasma waves are longitudinal, we then write

$$\langle E_{\mathbf{k}\alpha} E_{\mathbf{k}'\beta} \rangle = (2\pi)^2 \frac{k_\alpha k_\beta}{k^2} (\mathbf{E}^2)_{\mathbf{k}} \delta(\mathbf{k} + \mathbf{k}') \quad (49.7)$$

This relation is to be regarded as a definition of the quantities symbolically denoted by $(\mathbf{E}^2)_{\mathbf{k}}$. These are real quantities. The expression (49.7) is zero except when $\mathbf{k} = -\mathbf{k}'$, and is symmetrical with respect to the interchange of $\mathbf{k}$ and $\mathbf{k}'$. Hence $(\mathbf{E}^2)_{\mathbf{k}} = (\mathbf{E}^2)_{-\mathbf{k}}$; and a change in the sign of k is equivalent to taking the complex conjugate. The mean square $\langle \mathbf{E}^2 \rangle$ is expressed in terms of these quantities by

$$\langle \mathbf{E}^2 \rangle = \int (\mathbf{E}^2)_{\mathbf{k}} d^3k / (2\pi)^3 \quad (49.8)$$

The integration in (49.6), and therefore in (49.8), is (as already mentioned) taken over the neighbourhoods of the points $\mathbf{k}_0$ and $-\mathbf{k}_0$. It is, however, more convenient to eliminate $-\mathbf{k}_0$ by putting (49.6) in the form

$$\mathbf{E} = \int_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_0} \mathbf{E}_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} + \text{c.c.} \quad (49.9)$$

where the integration is taken only over the neighbourhood of the point $k = k_0$, and c.c. denotes the complex conjugate. Accordingly, (49.8) is written as

$$\langle \mathbf{E}^2 \rangle = 2 \int_{k=k_0} (\mathbf{E}^2)_{\mathbf{k}} d^3k / (2\pi)^3 \quad (49.10)$$

and the relations (49.7) as

$$\left. \begin{aligned} \langle E_{\mathbf{k}\alpha} E_{\mathbf{k}'\beta}^* \rangle &= (2\pi)^3 (\mathbf{E}^2)_{\mathbf{k}} \frac{k_\alpha k_\beta}{k^2} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \\ \langle E_{\mathbf{k}\alpha} E_{\mathbf{k}\beta} \rangle &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (49.11)$$

The time variation of the perturbation (49.9) is represented by

$$\mathbf{E} = \int_{k=k_0} e^{i(k\cdot\mathbf{r}-\omega t)} \mathbf{E}_{\mathbf{k}}(t) \frac{d^3k}{(2\pi)^3} + \text{c.c.} \quad (49.12)$$

where $\omega(k) \approx \Omega_e$ is the plasma wave frequency, and the coefficients $\mathbf{E}_{\mathbf{k}}(t)$ vary slowly on account of Landau damping. The electron distribution function is expressed similarly:

$$f = f_0(t, \mathbf{p}) + \left\{ \int_{k=k_0} f_{\mathbf{k}}(t, \mathbf{p}) e^{i(k\cdot\mathbf{r}-\omega t)} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} + \text{c.c.} \right\}. \quad (49.13)$$

The expression in the braces is the "random" part of the variation of the distribution function, oscillating rapidly in space and time; it vanishes on statistical averaging of the waves. The term $f_0(t, \mathbf{p})$ is the slowly varying averaged distribution. [†]

Our object is to derive a set of equations to determine the time variation of averaged characteristics of the state of the plasma, namely the functions $(\mathbf{E}^2)_{\mathbf{k}}$ and $f_0(t, \mathbf{p})$. For such a

[†] For perturbations of the type under consideration, the integrals $E_{\mathbf{k}} = \int \mathbf{E}(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} d^3\mathbf{x}$ in fact diverge, since $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ is not zero at infinity. This, however, is not important in the formal derivations, which involve mean squares that are certainly finite.

set of equations to be closed, these characteristics must embrace all electrons participating in the non-linear effects concerned. In turn, the velocity range (49.3) corresponding to the spread of wave vectors $\Delta \mathbf{k}$ must then always widely overlap the amplitude of the electron velocity oscillations due to the field of the waves in resonance with the electrons. This is the condition expressed by the inequality (49.5); $(e|\varphi_0|/m)^{1/2}$ is the order of magnitude of the amplitude in question. For, in coordinates moving with the phase velocity of the wave, the wave field is static and consists of a sequence of potential humps with height $|\varphi_0|$. In these coordinates, a resonant electron oscillates between two humps, and its speed varies in the range between $\pm (2e|\varphi_0|/m)^{1/2}$.

One of the equations relating $(\mathbf{E}^2)_\mathbf{k}$ and f_0 expresses the Landau damping of each Fourier component of the field:

$$d(\mathbf{E}^2)_\mathbf{k}/dt = -2\gamma_\mathbf{k}(\mathbf{E}^2)_\mathbf{k} \quad (49.14)$$

where

$$\gamma_\mathbf{k} = 2\pi^2 e^2 \Omega_e \int \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{p}} \cdot \frac{\mathbf{k}}{k^2} \delta(\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}) d^3 p \quad (49.15)$$

is, from (32.6) and (30.1), the wave amplitude damping ratio; the factor 2 on the right of (49.14) appears because $(\mathbf{E}^2)_\mathbf{k}$ is quadratic.

The second equation is derived from the transport equation for a collisionless plasma:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} - eE \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = 0. \quad (49.16)$$

Let us first apply this in the linear approximation to an individual Fourier component of the perturbation. In the last term in the equation, which already contains

the small quantity $E_k e^{i(k \cdot r - \omega t)}$, we put $f \approx f_0$. In the first term, we neglect the slow variation of f_k with t . Then we get for f_k the usual expression

$$f_\mathbf{k} = \frac{ie\mathbf{E}_\mathbf{k}}{\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}} \cdot \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{p}'} \quad (49.17)$$

where, in the subsequent integrations, ω is to be taken to have the customary meaning $\omega + i0$.

Next, we substitute in (49.16) the complete expressions (49.12) and (49.13) for $\mathbf{E}$ and f , with f_k from (49.17), and average over the statistical distribution of waves by means of (49.11). All terms linear in the perturbation drop out; the quadratic terms determine the derivative $\partial f_0/\partial t$ as

$$\frac{\partial f_0}{\partial t} = e^2 \frac{\partial}{\partial p_\alpha} \left\{ \frac{\partial f_0}{\partial p_\beta} \int_{k=k_0} \frac{k_\alpha k_\beta}{k^2} (\mathbf{E}^2)_\mathbf{k} \left[\frac{i}{\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v} + i0} - \frac{i}{\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v} - i0} \right] \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \right\}$$

Replacing the difference in the square brackets by $2\pi\delta(\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v})$ according to (29.8), we have finally

$$\frac{\partial f_0}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial p_\alpha} \left(D_{\alpha\beta}^{(n)} \frac{\partial f_0}{\partial p_\beta} \right) \quad (49.18)$$

where

$$D_{c\beta}^{(n)}(\mathbf{p}) = 2\pi e^2 \int_{k=k_0} (\mathbf{E}^2)_\mathbf{k} \frac{k_\alpha k_\beta}{k^2} \delta(\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}) \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \quad (49.19)$$

¹† Not to be confused with the Maxwellian equilibrium distribution.

Equations (49.14) and (49.18) constitute the required complete set. The theory of plasma waves based on them is called the quasi-linear theory. †

Equation (49.18) has the form of a diffusion equation in velocity space, with $D_{\alpha\beta}^{(nl)}$ as the diffusion coefficient tensor; the superscript nl indicates that this "diffusion" is due to non-linearity effects. The coefficients as functions of the electron velocity are zero except in a range $\Delta\mathbf{v}$ near $\mathbf{v}_0$, which is related to the spread $\Delta\mathbf{k}$ by (49.3). In this velocity range, diffusion occurs and there is a corresponding distortion of the distribution function (which remains Maxwellian for the bulk of the electrons). The nature of the distortion is evident from the general properties of diffusion processes: diffusion causes a smoothing, or in this case a plateau of width $\sim \Delta v$ on the tail of the function $f_0(p)$ at $v \approx v_0 \gg v_{Te}$, as shown diagrammatically in Fig. 13. With this type of distortion, the principal change is in the derivative $\partial f_0 / \partial p$, while f_0 itself remains close to the Maxwellian value.

Let us estimate the relaxation time τ_{nl} for this process. Since the equalization is to take place over a range $\Delta p = m\Delta v$, we have

$$\tau_{nl} \sim m^2 (\Delta v)^2 / D^{(nl)} \quad (49.20)$$

To estimate the diffusion coefficient, we note that from (49.10) $(\mathbf{E}^2)_k (\Delta k / 2\pi)^3 \sim \langle \mathbf{E}^2 \rangle$. The presence of the delta function in (49.19) is equivalent, in order of magnitude, to

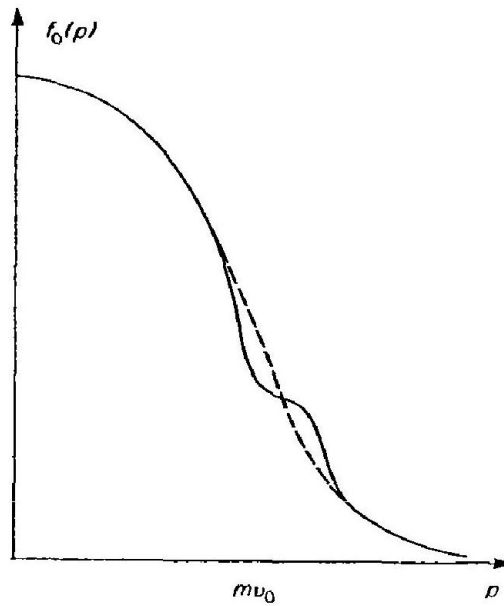


Fig. 13.

multiplying the integral by $1/v_0 \Delta k$. Thus

$$D^{(n)} \sim e^2 \langle \mathbf{E}^2 \rangle / v_0 \Delta k \sim e^2 \langle \mathbf{E}^2 \rangle / k_0 \Delta v. \quad (49.21)$$

Lastly, expressing $\langle \mathbf{E}^2 \rangle$ in terms of the amplitude φ_0 of the potential oscillations ($\sim k^2 |\varphi_0|^2$), and substituting (49.21) in (49.20), we find †

$$\tau_{nl} \sim (\Delta v)^3 / k_0 (e |\varphi_0| / m)^2. \quad (49.22)$$

†til was developed by A. A. Vedenov, E. P. Velikhov and R. Z. Sagdeev (1961). Equations (49.14) and (49.18) were independently derived by Yu. A. Romanov and G. F. Filippov (1961) and by W. E. Drummond and D. Pines (1961).

In the above discussion, it is assumed of course that τ_{nl} is much less than the Landau damping time $1/\gamma$; otherwise, the waves are damped before non-linearity effects can appear. The applicability of (49.14), however, presupposes that $1/\gamma$ is much less than the electron mean free time: $1/\gamma \ll 1/\nu_e$, where ν_e is the mean collision frequency. The latter condition does not guarantee the legitimacy of neglecting collisions in the phenomenon considered, i.e. of using the transport equation in the form (49.16): what is significant as regards the competition with non-linear effects is not the total collisional relaxation time but only the time for collisional relaxation in the range Δv , which we denote by τ_{cold} .

For relaxation in the range Δv near $v_0 \gg v_{Te}$, which contains only a relatively small fraction of all the electrons, the position is similar to that in the problem of runaway electrons. The process is a diffusion in momentum space, the diffusion coefficient

$$D^{(\text{coll})} = m^2 \nu_{ee}(v) v_{Te}^2 = 4\pi e^4 L N_e T_e / m v^3 \approx m^2 \nu_{ee}(v_{Te}) v_{Te}^5 / v^3, \quad (49.23)$$

i.e. the coefficient of $\partial f / \partial p$ in the flux (45.5) in momentum space.

†When $\Delta v \sim (e|\varphi_0|/m)^{1/2}$ and the theory given here is, strictly speaking, inapplicable (the sign $\gg$ in (49.5) becoming $\sim$), this estimate gives $\tau_{\text{nt}} \sim k_0^{-1} (m/e|\varphi_0|)^{1/2}$. This result was to be expected when the spread Δv of resonant speeds coincides with the speed amplitude of the electrons oscillating in the wave field: τ_{nt} has the same order of magnitude as the period of these oscillations.

The required collisional relaxation time in the range Δv differs from (49.20) in that $D^{(n)}$ is replaced by $D^{(\text{coll})}$:

$$\tau_{\text{coll}} \sim m^2 (\Delta v)^2 / D^{(\text{coll})} \sim \frac{(\Delta v)^2}{v_{Te}^2 \nu_{ee}(v_{Te})} \left(\frac{v_0}{v_{Te}} \right)^3. \quad (49.24)$$

When

$$\tau_{\text{nl}} \gg \tau_{\text{coll}}, \quad (49.25)$$

i.e. $D^{(nl)} \ll D^{(\text{coll})}$, the non-linear effects play no part: the collisions are able to maintain the Maxwellian distribution near v_0 despite the perturbation from the wave field, and accordingly the Landau damping ratio is given by the usual expression corresponding to the Maxwellian value of the derivative $\partial f_0 / \partial p$ in the neighbourhood of $\mathbf{v}_0$. Thus the inequality (49.25) is the condition for the strictly linear theory of Landau damping to be applicable. The quasi-linear theory given here is valid with the much weaker condition (49.2). The condition (19.25) may be written

$$E^2 / 4\pi \ll N_e T_e \left[\sqrt{(4\pi) L \eta^{3/2} (v_{re}/v_0)^3} \Delta v / v_0 \right], \quad (49.26)$$

where $\eta = e^2 N^{1/3} / T$ is the gaseousness parameter. The smallness of the factor in the brackets shows that the condition (49.2) is weak in comparison with (49.25). †

In the opposite limiting case where $\tau_{nl} \ll \tau_{\text{coll}}$, the non-linear effects cause a great decrease of the derivative $\partial f_0 / \partial p$ in the range concerned, roughly in the ratio $D^{(\text{coll})} / D^{(n)}$. The Landau damping ratio is correspondingly reduced.

15.4.10 §50. The transport equation for a relativistic plasma

If the velocities of the particles (electrons) in a plasma are not small compared with that of light, the transport equation has to take account of relativistic effects (S. T. Belyaev and G. I. Budker 1956).

We shall first show that the distribution function in phase space, $f(t, r, p)$, is a relativistic invariant. This is shown by noting that the spatial density and the flux of particles, i.e. the integrals

$$N = \int f d^3p, \quad \mathbf{i} = \int \mathbf{v} d^3p$$

must form the 4-vector $i^k = (cN, \mathbf{i})$; cf. Fields, § 28. ‡ Since in relativistic mechanics the velocity of a particle with momentum $\mathbf{p}$ and energy ϵ is $\mathbf{v} = \mathbf{p}c^2/\epsilon$, we can write this 4-vector as

$$i^k = c^2 \int (p^k f / \epsilon) d^3p \quad (50.1)$$

†It has already been mentioned that a strictly linear theory is inapplicable if $\tau_{nl} \not\gg I/\gamma$. This may be rewritten as

$$E^2/4\pi \leq N_e T_e \left[(\Delta v/v_{Te})^2 (\Delta v/v_0) \gamma / \Omega_e \right],$$

which may prove to be a weaker condition than (49.26).

‡ In this section, the Latin letters k and l denote four-dimensional vector indices. The scalar product of two 4-vectors a and b is denoted by $(ab) \equiv a_k b^k$, where $p^k = (\epsilon/c, \mathbf{p})$ is the 4-momentum. The expression d^3p/ϵ is a 4-scalar (see Fields, §10). It is therefore clear, since the integral (50.1) is a 4-vector, that f is a 4-scalar. †

Going on now to derive the transport equation, we note that the calculations in §41 remain valid in the relativistic case as far as the expression (41.3), (41.4) for the flux in momentum space. We need only recalculate the quantities

$$B_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} \int q_\alpha q_\beta v_{\text{rel}} d\sigma \quad (50.2)$$

The quantity $\mathbf{v}_{\text{rel}}$ is, as before, the relative velocity of the two particles. In relativistic mechanics, however, it is defined as the velocity of one particle in the rest frame of the other, and does not in general reduce to the difference $v - v'$ (see Fields, § 12).

Let us first ascertain the transformation properties of these quantities. The product

$$v_{\text{rel}} d\sigma \cdot f f' d^3p d^3p' dx dt$$

is the number of scattering events in the volume d^3x and the time dt , between two particles with momenta in given ranges d^3p and d^3p' ; this number is, by definition, invariant. Writing it in the form

$$\epsilon \epsilon' v_{\text{rel}} d\sigma, f, f', (d^3p/\epsilon), (d^3p'/\epsilon'), d^3x dt$$

and noting that the last five factors (between points) are invariant, we conclude that the first factor $\epsilon \epsilon' v_{\text{rel}} d\sigma$ is also invariant. Hence it follows in turn that the integrals

$$W^{kl} = \frac{1}{2} \epsilon \epsilon' \int q^k q^l v_{\text{rel}} d\sigma \quad (50.3)$$

form a symmetric 4-tensor. The quantities (50.2) are related to the space components of this 4-tensor by

$$B_{\alpha\beta} = W^{\alpha\beta} / \epsilon \epsilon'. \quad (50.4)$$

We first calculate the 4-tensor (50.3) in a frame of reference where one particle, say e , is at rest. The relativistic cross-section for Rutherford scattering of particles e' by particles e at rest (before the collision) with small scattering angles x is ‡

$$d\sigma = \frac{4(ee')^2 \epsilon'^2}{p'^4 \chi^4} 2\pi \chi d\chi \quad (50.5)$$

† The distribution function with respect to momenta only, i.e. $f(f, p) = \iint(l, r, p) d^3x$, is not a 4-scalar. however; such a function is discussed in Fields, § 10.

‡ This expression applies to the scattering of electrons by either electrons or ions. In the first case it follows from RQT (81.7); in the second case, from the cross-section for scattering by a fixed Coulomb centre, RQT (80.7).

A calculation similar to the derivation of (41.8) gives the following expression for the space components of the tensor (50.3):

$$W^{\alpha\beta} = 2\pi (ee')^2 L (v'^2 \delta_{\alpha\beta} - v'_\alpha v'_\beta) mc^2 \epsilon' l v'^3 \quad (50.6)$$

The remaining components are to be taken as zero:

$$W^{00} = W^{0\alpha} = 0, \quad (50.7)$$

since the change in the particle energy in the collision (q^0) in this frame of reference is of the second order with respect to the small scattering angle, and so W^{0a} and W^{00} would be of the third or fourth order, whereas the whole calculation of the collision integral is accurate only as far as second-order quantities.

From (50.6) and (50.7),

$$W_k^k = -W_a^\alpha = -4\pi (ee')^2 L mc^2 \epsilon' l v'$$

This 4-scalar may be written in an invariant form by noting that in the rest frame of the particle e we have

$$(uu') = \epsilon'/m'c^2, \quad \frac{[(uu')^2 - 1]^{1/2}}{uu'} = v'/c$$

where $u^k = p^k/mc$, $u'^k = p'^k/m'c$ are the 4-velocities of the two particles. Hence

$$W_k^k = -4\pi (ee')^2 L mm' c^4 \frac{(uu')^2}{c [(uu')^2 - 1]^{1/2}} \quad (50.8)$$

From (50.6) and (50.7) we also find that

$$W^{kl} u_l = W^{kl} u'_l = 0 \quad (50.9)$$

and, since these equations are relativistically invariant in form, they are valid in any frame of reference.

The expression for the 4-tensor W^{k1} valid in any frame of reference must evidently be symmetrical in the two particles. The general form of such a 4-tensor depending only on the 4-vectors u^k and u'^k is

$$W^{kl} = \alpha g^{kl} + \beta (u^k u'^l + u'^k u^l) + \delta (u^k u'^l + u'^k u^l)$$

where α, β and δ are scalars. Determining these from the conditions (50.8) and (50.9), we obtain

$$W^{kl} = 2\pi (ee')^2 L \frac{mm'c^4 (uu')^2}{c [(uu')^2 - 1]^{3/2}} \times \\ \times \left\{ -[(uu')^2 - 1] g^{kl} - (u^k u^l + u'^k u'^l) + (uu') (u^k u'^l + u'^k u^l) \right\} \quad (50.10)$$

Lastly, taking the space part of this 4-tensor in an arbitrary frame of reference, we have the following final expression for the quantities $B_{\alpha\beta}$ in the collision integral:

$$B_{x;\beta} = 2\pi (ee')^2 L \frac{\gamma\gamma' (1 - \mathbf{v} \cdot \mathbf{v}'/c^2)^2}{c [\gamma^2\gamma'^2 (1 - \mathbf{v} \cdot \mathbf{v}'/c^2)^2 - 1]^{3/2}} \times \\ \times \left\{ \left[\gamma^2\gamma'^2 \left(1 - \frac{\mathbf{v} \cdot \mathbf{v}'}{c^2} \right)^2 - 1 \right] \delta_{\alpha\beta} - \frac{\gamma^2}{c^2} v_\alpha v_\beta - \frac{\gamma'^2}{c^2} v'_\alpha v'_\beta \right. \\ \left. + \frac{\gamma^2\gamma'^2}{c^2} \left(1 - \frac{\mathbf{v} \cdot \mathbf{v}'}{c^2} \right) (c_\alpha v'_\beta + v'_\alpha v_\beta) \right\} \quad (50.11)$$

where

$$\gamma = \epsilon/mc^2 = (1 - v^2/c^2)^{-1/2} \\ \gamma' = \epsilon'/m'c^2 = (1 - v'^2/c^2)^{-1/2}$$

are the Lorentz factors for the two particles. Despite its more complex form in comparison with the non-relativistic case, the three-dimensional tensor (50.11) again satisfies the relations

$$B_{a\beta} v_\beta = B_{\alpha\beta} v'_\beta \quad (50.12)$$

To estimate the Coulomb logarithm, we note that in the relativistic case the Born situation occurs: $ze^2/\hbar v \sim ze^2/\hbar c \ll 1$. Hence, for ee and ei collisions,

$$L \approx \log(pa/\hbar) \approx \log(T_e a/\hbar c) \quad (50.13)$$

For ii collisions, T_e must be replaced by T_1 (if the ions too are relativistic), or else the ordinary non-relativistic expressions should be used.

The transport equation with the Coulomb collision integral is valid so long as Rutherford scattering is the principal cause of variation of the electron momentum and energy. The competing process here is bremsstrahlung (and also the Compton effect, if the plasma contains an appreciable number of photons). The Rutherford scattering (transport) cross-section is in order of magnitude

$$\sigma_{\text{Ru}} \sim z^2 (e^2/mc^2)^2 (mc^2/\epsilon)^2 L \sim z^2 (e^2/mc^2)^2 (mc^2/T_e)^2 L \quad (50.14)$$

The cross-section for bremsstrahlung emission of a photon with energy $\hbar\omega \sim T_e$ is

$$\sigma_{\text{br}} \sim (z^2/137) (e^2/mc^2)^2 \log(T_e/mc^2); \quad (50.15)$$

cf. *RQT* (93.17). These cross-sections are comparable if

$$T_e/mc^2 \sim (137L/\log 137L)^{1/2}$$

PROBLEMS

Solution, The calculations in §42 remain valid as far as (42.3). We take the $B_{a,8}^{(eq)}$ from (50.4) and (50.6) with $v' \approx c$:

$$B_{zep}^{(ei)} = 4\pi e^4 z^2 L / c$$

The result is

$$\frac{dE_i}{dt} = -\frac{dE_e}{dt} = \left(1 - \frac{T_i}{T_e}\right) \frac{4\pi z^2 e^8 N_i N_e L}{Mc}$$

Expressing the energy of ultra-relativistic electrons in terms of their temperature by $E_e = 3T_e N_e$ (see *SP I*, §44. Problem), we obtain

$$\frac{dT_e}{dt} = -(T_e - T_i) \frac{4\pi z^2 e^4 N_i L}{3McT_e}$$

Problem 2. Find the electrical conductivity of a relativistic Lorentian plasma.

Solution. When we neglect collisions and go to the limit $M \rightarrow \infty$, the process of solution in the relativistic case is the same as for the non-relativistic problem in §44. The correction to the distribution function in a constant ($\omega = 0$) electric field is again

$$\delta f = -[e\mathbf{E} \cdot \mathbf{v} / T_e \nu_{ei}(p)] f_0$$

(cf. (44.5)), the only difference being that the collision frequency is now determined by the relativistic Rutherford scattering cross-section:

$$\nu_{ei}(p) = N_i v \sigma_t \quad \sigma_1 \approx \int \frac{1}{2} \chi^2 d\sigma = 4\pi z^2 c^4 L / v^2 p^2$$

Calculating the current as the integral $-e \int v \delta f d^3p$, we find as the conductivity

$$\sigma = \langle v^3 p^2 \rangle / 12\pi z e^3 T_e L.$$

In the ultra-relativistic case, $v \approx c$, $\langle p^2 \rangle = I 2(T_e c)^2$, and so

$$\sigma = c T_e / \pi z e^2 L$$

15.4.11 §51. Fluctuations in plasmas

The theory of fluctuations in plasmas is in principle constructed in the same way as for an ordinary gas (§§ 19 and 20). The different-time correlation functions such as

$$\langle \delta f_a(t_1, \mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1) \delta f_b(t_2, \mathbf{r}_2, \mathbf{p}_2) \rangle, \quad \langle \delta \varphi(t_1, \mathbf{r}_1) \delta f_a(t_2, \mathbf{r}_2, \mathbf{p}_2) \rangle,$$

where φ is the electric field potential and a, b distinguish the types of particle, satisfy (when $t = t_1 - t_2 > 0$) the same equations, namely the linearized transport equation and the linearized Poisson's equation, as the distribution functions $\vec{f}_a$ and the potential $\bar{\varphi}$. To solve these equations, the corresponding single-time correlation functions are needed as an initial condition. But, in contrast to an equilibrium gas of neutral particles, there is in a plasma a single-time correlation between the positions of different particles due to their Coulomb interaction and extending to a large distance ($\sim a$). In the equilibrium case, this correlation

¹Problem 1. Find the rate of energy transfer from electrons with temperature $T_e \gg mc^2$ to ions with temperature $T_i \ll Mc^2$.

is described by the density correlation functions calculated in SP 1, §79. In non-equilibrium cases, the determination of the single-time correlation functions is a difficult problem.

This difficulty may, however, be overcome in a general manner for the case of a collisionless plasma. For such a plasma, the problem of fluctuations in a stationary non-equilibrium state has a particularly natural formulation, since in the absence of an external field any distribution functions $\bar{f}_a(p)$ depending only on the particle momenta are a stationary solution of the transport equation. The correlation function of fluctuations relative to such a distribution will depend, as in the equilibrium case, on the coordinates of the two points and on the two times only through the differences $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, t = t_1 - t_2$. If the plasma is collisionless, the times t considered are much less than $1/\nu$, where ν is the effective collision frequency. The method given below is applicable in just these conditions; the plasma is throughout treated as collisionless. The method is based on a direct averaging of the products of the exact fluctuating distribution functions $f_a(t, \mathbf{r}, \mathbf{p})$.¹

These functions satisfy the equations

$$\frac{df_a}{dt} = \frac{\partial f_a}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f_a}{\partial \mathbf{r}} - e_a \frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{r}} \cdot \frac{\partial f_a}{\partial \mathbf{p}} = 0 \quad (51.1)$$

where φ is the exact electric field potential, which satisfies the equation

$$\Delta \varphi = -4\pi \sum_a e_a \int f_a d^3p \quad (51.2)$$

Equations (51.1) are the analogue of Liouville's theorem. In these exact equations, collisions have not yet been neglected. The exact distribution functions

$$f_a(t, \mathbf{r}, \mathbf{p}) = \sum \delta[\mathbf{r} - \mathbf{r}_a(t)] \delta[\mathbf{p} - \mathbf{p}_a(t)] \quad (51.3)$$

(with summation over all particles of type a) take account of particle motion along paths $\mathbf{r} = \mathbf{r}_a(t)$ that are exact solutions of the equations of motion for interacting particles. Equations (51.1) are easily verified by direct differentiation of the expressions (51.3), using the equations of motion of particles in a self-consistent field.

Equations (51.1) and (51.2) themselves are not very useful; to apply the distribution functions in the form (51.3) would mean following the motion of each particle separately. However, if they are averaged over physically infinitesimal volumes, [‡] the ordinary transport equations are obtained. Putting $f_a = \bar{f}_a + \delta f_a$, $\varphi = \bar{\varphi} + \delta \varphi$, and averaging the equations (without any approximation), we obtain

$$\frac{\partial \bar{f}_a}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial \bar{f}_a}{\partial \mathbf{r}} - e_a \frac{\partial \bar{\varphi}}{\partial \mathbf{r}} \cdot \frac{\partial \bar{f}_a}{\partial \mathbf{p}} = e_a \left\langle \frac{\partial \delta \varphi}{\partial \mathbf{r}} \cdot \frac{\partial \delta f_a}{\partial \mathbf{p}} \right\rangle, \quad (51.4)$$

$$\Delta \bar{\varphi} = -4\pi \sum_a e_a \int \bar{f}_a d^3p. \quad (51.5)$$

The right-hand side of (51.4) is the collision integral.[§]

Subtracting (51.4) and (51.5) from the exact equations (51.1) and (51.2), we obtain equations for the fluctuating parts of the distribution functions and the potential. The terms in the transport equation that are quadratic in $\delta \varphi$ and δf_a describe the influence of collisions on

¹fit is due to N. Rostoker (1961) and to Yu. L. Klimontovich and V. P. Silin (1962)

[‡] Or, equivalently, over the initial conditions of the exact mechanical problem, corresponding to a specified macroscopic state.

[§]We shall return to this expression at the end of the section, and meanwhile note only that it corresponds to the right-hand side of (16.7) in the case where the particles have a Coulomb interaction

the fluctuations. Neglecting these terms and considering the case of spatial homogeneity, i.e. putting

$$\bar{f}_a = \bar{f}_a(\mathbf{p}), \quad \bar{\varphi} = 0, \quad (51.6)$$

we obtain the equations

$$\frac{\partial \delta f_a}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial \delta f_a}{\partial \mathbf{r}} - e_a \frac{\partial \delta \varphi}{\partial \mathbf{r}} \cdot \frac{\partial \bar{f}_a}{\partial \mathbf{p}} = 0 \quad (51.7)$$

$$\Delta \delta \varphi = -4\pi \sum_a e_a \int \delta f_a d^3 p \quad (51.8)$$

These equations enable us to express the functions $\delta f_a(t, \mathbf{r}, \mathbf{p})$ at any instant t in terms of their values at some initial instant $t = 0$, and hence to express the correlation function

$$\langle \delta f_a(t_1, \mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1) \delta f_b(t_2, \mathbf{r}_2, \mathbf{p}_2) \rangle \quad (51.9)$$

in terms of its value for $t_1 = t_2 = 0$. This initial value of the correlation function, which we denote by $g_{ab}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2)$, is a largely (see below) arbitrary function. It must be emphasized immediately that this is not the single-time correlation function which (together with the complete different-time correlation function) we are trying to find. The central point which ensures the effectiveness of the method under discussion is that with an arbitrary choice of the function g the correlation function (51.9) thus calculated reduces in the course of time (when t_1 and t_2 are of the order of the Landau damping time) to a function only of the difference $t = t_1 - t_2$, independent of the choice of g . The problem is thereby solved: this limiting function is the required different-time correlation function, and its value for $t_1 - t_2 = 0$ is the single-time correlation function.

To carry out the above programme, we use the components of a Fourier expansion with respect to the coordinates and a one-sided Fourier expansion with respect to the time:

$$\delta f_{a\omega k}^{(+)}(\mathbf{p}) = \int d^3 x \int_0^\infty dt e^{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} \delta f_a(t, \mathbf{r}, \mathbf{p}), \quad (51.10)$$

and similarly for $\varphi_{\omega k}^{(+)}$. Multiplying equations (51.7) and (51.8) by $e^{-i(k \cdot r - \omega t)}$ and integrating over dt from 0 to ∞ and over $d^3 x$, we obtain

$$\begin{aligned} i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{v} - \omega) \delta f_{a\omega k}^{(+)} - i e_a \mathbf{k} \cdot (\partial \bar{f}_a / \partial \mathbf{p}) \delta \varphi_{\omega k}^{(+)} &= \delta f_{ak}(0, \mathbf{p}), \\ -k^2 \delta \varphi_{\omega k}^{(+)} &= 4\pi \sum_a e_a \int \delta f_{a\omega k}^{(+)} d^3 p. \end{aligned} \quad (51.11)$$

Similar equations have already been encountered several times (cf. (34.10), (34.11)); they lead to the result

$$\delta \varphi_{\omega k}^{(+)} = -\frac{4\pi}{k^2 \epsilon_1(\omega, k)} \sum_a e_a \int \frac{\delta f_{ak}(0, \mathbf{p})}{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{v} - \omega)} d^3 p \quad (51.12)$$

where ϵ_1 is the permittivity of a plasma with distribution $\bar{f}(p)$.[†] Multiplication of two such expressions, followed by statistical averaging, gives

$$\begin{aligned} \langle \delta\varphi_{\omega k}^{(+)} \delta\varphi_{\omega'}^{(+)} \rangle &= \frac{16\pi^2}{k^4 \epsilon_1(\omega, k) \epsilon_1(\omega', k')} \times \\ &\times \sum_{a_3 b} e_a e_b \int \frac{\langle \delta f_{ak}(0, \mathbf{p}) \delta f_{bk}(0, \mathbf{p}') \rangle}{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{v} - \omega) i(\mathbf{k}' \cdot \mathbf{v}' - \omega')} d^3 p d^3 p' \end{aligned} \quad (51.13)$$

The mean value in the numerator of the integrand is related to the Fourier component $g_{abk}(p_1, p_2)$ of the "initial" correlation function $g_{ab}(r_1 - r_2, p_1, p_2)$ by

$$\langle \delta f_{ak}(0, p) \delta f_{bk}(0, p') \rangle = (2\pi)^7 \delta(k + k') g_{abk}(p_1, p_2);$$

cf. (19.13). Like any single-time correlation function, the initial correlation function must contain a delta-function term expressing the cases where there is only one particle in coinciding elements of phase space:

$$\delta_{ab} \bar{f}(p) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \delta(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2);$$

see (19.6). The Fourier transform of this term is $\delta_{ab} \bar{f}(p) \delta(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2)$. Thus we must put in (51.13)

$$\begin{aligned} &\langle \delta f_{ak}(0, p) \delta f_{bk}(0, p') \rangle \\ &= (2\pi)^3 \delta(k + k') [\delta_{ab} f_a(p) \delta(p - p') + \mu_k(p, p')] \end{aligned} \quad (51.14)$$

where $\mu_k(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$ is an arbitrary smooth (non-singular for real $\mathbf{p}$ and $\mathbf{p}'$) function, the Fourier transform of some function $\mu(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2)$ which tends to zero as $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| \rightarrow \infty$.

On substitution in (51.13), the term containing this arbitrary function in (51.14) gives

$$\frac{4(2\pi)^5 \delta(\mathbf{k} + \mathbf{k}')}{k^4 \epsilon_l(\omega, k) \epsilon_l(\omega', k')} \sum_{a, b} \int \frac{\mu_k(\mathbf{p}, \mathbf{p}') d^3 p d^3 p'}{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{v} - \omega) i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}' - \omega')^\circ} \quad (51.15)$$

We shall show that this expression corresponds to a function in the time representation that decreases rapidly with increasing t or t' .

The change from the Laplace transform $\langle \delta\varphi_{\omega k}^{(+)} \delta\varphi_{\omega' k'}^{(+)} \rangle$ (see the first footnote to §34) to a function of the times t_2 and $t_1 = t_2 + t$ is made by means of the formula

$$\langle \delta\varphi_k(t_1) \delta\varphi_{k'}(t_2) \rangle = \int e^{-i\omega t_1 - i\omega' t_2} \langle \delta\varphi_{\omega k}^{(+)} \delta\varphi_{\omega' k'}^{(+)} \rangle d\omega d\omega' / (2\pi)^2 \quad (51.16)$$

where the integration is taken along contours in the complex ω and ω' planes which pass above all singularities of the integrand. We are interested in the asymptotic form of (51.16) as $t_1, t_2 \rightarrow \infty$. To find this, we must lower the contours of integration until they "catch" on the singularities; for instance, a singularity at $\omega = \omega_c$ gives an asymptotic time dependence $\exp(-i\omega_c t)$ of the integral with respect to ω . It is easy to see that (51.15) has singularities only in the lower half-planes of ω and ω' (and not on the real axes), and therefore the asymptotic form of the integral (51.16), with (51.15) as $\langle \delta\varphi_{\omega k}^{(+)} \delta\varphi_{\omega' k'}^{(+)} \rangle$, contains only damped terms.

Let us consider, for example, the integral with respect to ω . The factor $1/\epsilon_1(\omega, k)$ in (51.15) has poles at the zeros of $\epsilon_1(\omega, k)$, which are all in the lower half of the ω -plane. † The integral over $d^3 p$ in (51.15) has a similar property: it has the form

¹ ÷ We shall assume, merely to simplify the subsequent formulae, that the function $\bar{f}(p)$ is isotropic, so that the corresponding permittivity tensor $\epsilon_{\alpha\beta}$ reduces to scalars ϵ_l and ϵ_t -

$$\int \frac{\psi(z)dz}{z - \omega/k - i0}$$

with $z \equiv v_x$ the component of $\mathbf{v}$ along $\mathbf{k}$, and the factor $\psi(z)$ can (according to the assumed properties of $\mu_{\mathbf{k}}(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$) have singularities only for complex z ; an integral of this form has already been discussed at the end of §29, and shown to have poles only in the lower half of the ω -plane.

Thus the undamped part of the correlation function, which we wish to determine, arises only from the contribution of the first term in (51.14) to the integral (51.13);

$$\langle \delta\varphi_{\omega\mathbf{k}}^{(+)} \delta\varphi_{\omega'\mathbf{k}'}^{(+)} \rangle = -\frac{4(2\pi)^5 \delta(\mathbf{k} + \mathbf{k}')}{k^4 \epsilon_1(\omega, k) \epsilon_1(\omega', k)} \sum_a e_a^2 \int \frac{\bar{f}_a(p) d^3p}{(\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v} + i0)(\omega' + \mathbf{k} \cdot \mathbf{v} + i0)}. \quad (51.17)$$

The integrand is transformed by putting

$$\frac{1}{(\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v} + i0)(\omega' + \mathbf{k} \cdot \mathbf{v} + i0)} = \frac{1}{\omega + \omega' + i0} \left[\frac{1}{\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v} + i0} + \frac{1}{\omega' + \mathbf{k} \cdot \mathbf{v} + i0} \right].$$

On the further integration with respect to ω' in (51.16), a contribution not damped as $t \rightarrow \infty$ comes from the residue at the pole $\omega' = -\omega - i0$, which is avoided by the contour of integration in the way shown in Fig. 14. In this sense, the factor $1/(\omega + \omega')$ is to be interpreted as $-2\pi i \delta(\omega + \omega')$. The significance of the factors $1/(\omega \pm \mathbf{k} \cdot \mathbf{v})$ in the subsequent integration with respect to ω is given by (29.8), according to which

$$\frac{1}{\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v} + i0} - \frac{1}{\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v} - i0} = -2\pi i \delta(\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v});$$

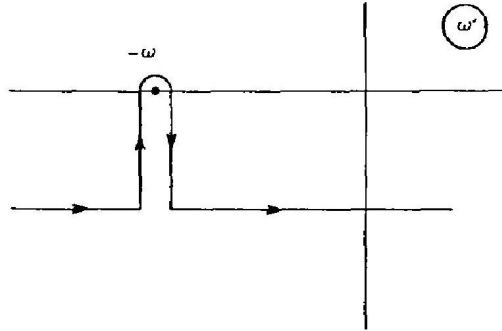


Fig. 14.

this notation implies that the integrations with respect to ω and ω' are taken along the real axis.

Thus, to calculate the correlation function in the asymptotic limit of long times t , we must make in the integral (51.17) the substitution

$$[(\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v} + i0)(\omega' + \mathbf{k} \cdot \mathbf{v} + i0)]^{-1} \rightarrow -(2\pi)^2 \delta(\omega + \omega') \delta(\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}) \quad (51.18)$$

The result is [†]

[†] It is assumed that the distribution $\bar{f}(p)$ corresponds to a stable state of the plasma, so that the plasma waves are damped. It is evident that only in this case is there any meaning in the problem of stationary fluctuations.

$$\langle \delta\varphi_{\omega k}^{(+)} \delta\varphi_{\omega' k'}^{(+)} \rangle = (2\pi)^4 \delta(\omega + \omega') \delta(k + k') (\delta\varphi^2)_{\omega k} \quad (51.19)$$

where

$$(\delta\varphi^2)_{\omega k} = \frac{32\pi^3}{k^4 |\epsilon_1(\omega, k)|^2} \sum_a e_a^2 \int \bar{f}_a(p) \delta(\omega - k \cdot v) d^3p \quad (51.20)$$

It is seen from the definition (51.19) (cf. (19.13)) that the $(\delta\varphi^2)_{\omega k}$ are the required Fourier transform of the correlation function-the frequency correlation function. Thus formula (51.20) gives the solution of the problem stated for fluctuations of the potential.

The other correlation functions are determined similarly. For example, expressing $\delta f_{\omega\omega'}^{(+)}$ in terms of $\delta\varphi_{\omega'}^{(+)}$ from (51.11), multiplying by $\delta\varphi_{\omega k}^{(+)}$ from (51.12), and averaging, we obtain the correlation function for the potential and the distribution function: ‡

$$(\delta\varphi \delta f_a)_{\omega k} = \frac{e_a k}{k \cdot v - \omega + i0} \cdot \frac{\partial \bar{f}_a}{\partial \mathbf{p}} (\delta\varphi^2)_{\omega k} + \frac{8\pi^2 e_a}{k^2 \epsilon_1(\omega, k)} \bar{f}_a(p) \delta(\omega - k \cdot v) \quad (51.21)$$

The order of $\delta\varphi$ and δf_a in $(\delta\varphi \delta f_a)_{\omega k}$ is significant: by definition (cf. SP 1 (122.11)), (51.21) is the Fourier transform of the space-time correlation function

†To avoid misunderstanding, it may be mentioned that this is not the complete expression, but only the part with the singularity in $\omega + \omega'$, which governs the asymptotic form of the correlation function. In the complete expression, not all terms contain $\delta(\omega + \omega')$, since the corresponding function of I_1 and I_2 depends on the difference $l = l_1 - l_2$ only asymptotically for large t_1 and l_2 .

‡ Note that the avoidance rule for the contour is opposite in the first term ($\omega - i0$ instead of $\omega + i0$). This is because, for $\omega = -\omega', k = -k'$, we have $(k' \cdot v - \omega' - i0)^{-1} = -(k \cdot v - \omega + i0)^{-1}$. $\langle \delta\varphi(t, \mathbf{r}) \delta f_a(\mathbf{0}, \mathbf{0}) \rangle$. If, however, the correlation function is defined as $\langle \delta f_a(t, r) \delta\varphi(0, 0) \rangle$, then we have

$$(\delta f_a \delta\varphi)_{\omega k} = (\delta\varphi \delta f_a)_{-\omega, -k} = (\delta\varphi \delta f_a)_{\omega k}^*; \quad (51.22)$$

cf. SP 1 (122.13).

Lastly, the frequency correlation function of the distribution function is

$$\begin{aligned} (\delta f_a \delta f_b)_{\omega k} = & 2\pi \delta_{ab} \delta(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2) \bar{f}_a(p_1) \delta(\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_1) \\ & + \frac{\mathbf{e}_a \mathbf{e}_b (\delta\varphi^2)_{\omega k}}{(\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_1 + i0)(\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_2 - i0)} \left(\mathbf{k} \cdot \frac{\partial \bar{f}_a}{\partial \mathbf{p}_1} \right) \left(\mathbf{k} \cdot \frac{\partial \bar{f}_b}{\partial \mathbf{p}_2} \right) \\ & - \frac{8\pi^2 \mathbf{e}_a \mathbf{e}_b}{k^2} \left\{ \left(\mathbf{k} \cdot \frac{\partial \bar{f}_a}{\partial \mathbf{p}_1} \right) \bar{f}_b \frac{\delta(\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_2)}{\epsilon_1(\omega, k)(\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_1 + i0)} \right. \\ & \left. + \left(\mathbf{k} \cdot \frac{\partial \bar{f}_b}{\partial \mathbf{p}_2} \right) \bar{f}_a \frac{\delta(\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_2)}{\epsilon_1(\omega, k)(\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_2 - i0)} \right\}. \end{aligned} \quad (51.23)$$

This is the Fourier transform of the correlation function

$$\langle \delta f_a(t, \mathbf{r}, \mathbf{p}_1) \delta f_b(0, 0, \mathbf{p}_2) \rangle.$$

If the $\bar{f}_a$ in (51.20)-(51.23) are taken to be the Maxwellian functions f_{0a} , we obtain the correlation functions of fluctuations in an equilibrium collisionless plasma.

Let us consider, for example, fluctuations of the potential. For a Maxwellian plasma, the imaginary part of the longitudinal permittivity may be expressed as

$$\epsilon_1''(\omega, k) = \frac{4\pi^2\omega}{k^2 T} \sum_a e_a^2 \int f_{0a}(p) \delta(\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}) d^3p \quad (51.24)$$

(cf. (30.1)); the generalization to particles of several types is obvious. Substituting this expression in (51.20), we obtain

$$(\delta\varphi^2)_{\omega\mathbf{k}} = 8\pi T \epsilon_1''(\omega, k) / \omega k^2 |\epsilon_1(\omega, k)|^2. \quad (51.25)$$

The correlation function of the longitudinal electric field is

$$(E_\alpha E_\beta)_{\omega\mathbf{k}} = k_\alpha k_\beta (\delta\varphi^2)_{\omega\mathbf{k}} \quad (51.26)$$

This result could, of course, also be derived from the general macroscopic theory of equilibrium electromagnetic fluctuations given in SP 2, §§75-77. [†] According to that theory, the frequency correlation function of the electric field is expressed in terms of the retarded Green's function by a formula which in the classical limit

($\hbar\omega \ll T$) becomes

$$(E_\alpha E_\beta)_{\omega\mathbf{k}} = - (2\omega T / \hbar c^2) \operatorname{im} D_{\alpha\beta}^R(\omega, \mathbf{k}); \quad (51.27)$$

see SP 2 (76.3), (77.2). In a medium with spatial dispersion, the Green's function is [†]

$$D_{\alpha\beta}^R(\omega, k) = \frac{4\pi\hbar}{\omega^2 \epsilon_1 / c^2 - k^2} \left(\delta_{\alpha\beta} - \frac{k_\alpha k_\beta}{k^2} \right) + \frac{4\pi\hbar c^2}{\omega^2 \epsilon_1} \frac{k_\alpha k_\beta}{k^2} \quad (51.28)$$

Substitution of the longitudinal part of this function (the second term) in (51.27) gives (51.25) and (51.26).

Lastly, let us return to (51.4) and show that the expression

$$e_a \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \cdot \left\langle \frac{\partial \delta\varphi(t, \mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}} \delta f_a(t, \mathbf{r}, \mathbf{p}) \right\rangle \quad (51.29)$$

on the right-hand side is in fact the same as the familiar expression for the collision integral in a plasma. The quantity (51.29) is obtained from the correlation function $\langle \delta\varphi(t, \mathbf{r}) \delta f_a(0, 0) \rangle$ by differentiation with respect to $\mathbf{r}$ followed by putting $\mathbf{r} = 0$. Thus we find

$$\left\langle \frac{\partial \delta\varphi}{\partial \mathbf{r}} \delta f_a \right\rangle = \int i\mathbf{k} (\delta\varphi \delta f_a)_{\omega\mathbf{k}} d\omega d^3k / (2\pi)^4 = - \int \mathbf{k} \operatorname{im} (\delta\varphi \delta f_a)_{\omega\mathbf{k}} d\omega d^3k / (2\pi)^4 \quad (51.30)$$

the latter expression being derived by means of (51.22). From (51.21), with (51.20) and (51.24), we have

$$\begin{aligned} \operatorname{im} (\delta\varphi \delta f_a)_{\omega\mathbf{k}} &= \left\{ -\pi \mathbf{k} \cdot \frac{\partial \bar{f}_a}{\partial \mathbf{p}_a} (\delta\varphi^2)_{\omega\mathbf{k}} - \frac{8\pi^2 \epsilon''}{k^2 |\epsilon|^2} \bar{f}_a \right\} e_a \delta(\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_a) \\ &= - \frac{32\pi e_a}{k^4 |\epsilon|^2} \sum_b e_b^2 \int \mathbf{k} \cdot \left\{ \frac{\partial \bar{f}_a}{\partial \mathbf{p}_a} \bar{f}_b - \bar{f}_a \frac{\partial \bar{f}_b}{\partial \mathbf{p}_b} \right\} \times \\ &\quad \times \delta(\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_b) d^3p_b \cdot \delta(\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_a) \end{aligned}$$

Substitution of this in (51.30) easily converts (51.29) to the Balescu-Lenard collision integral (§47).

^{††} The self-consistent field in a plasma is a macroscopic quantity, and the macroscopic theory of fluctuations is therefore applicable to it. The distribution function, however, is not a macroscopic quantity, and its fluctuations always require kinetic treatment.

In this proof, it may appear strange that, to calculate the collision integral, it was sufficient to consider fluctuations in a collisionless plasma. This occurs because the important Fourier components of the electric field in collisions in plasmas are those with $k \geq 1/a \gg 1/l$, so that collisions may be neglected. The situation here is exactly similar to that in the derivation of the Boltzmann transport equation (§ 16): equation (16.10) signifies the neglect of the influence of collisions on the pair correlation function.

15.5 V Plasma in Magnetic Field by Landau

15.5.1 §52. Permittivity of a collisionless cold plasma

This chapter deals with the properties of plasmas in an external magnetic field, which are said to be magnetoactive. By forcing the charged particles to move in helical paths along the lines of force, the magnetic field exerts a profound influence on the behaviour of the plasma. In particular, it affects the dielectric properties.

Let us first recall some general properties of the permittivity tensor in the presence of a magnetic field with induction $\mathbf{B}$ (see ECM, §82). As when the field is absent, equation (28.6) is valid:

$$\epsilon_{\alpha\beta}(-\omega, -\mathbf{k}; \mathbf{B}) = \epsilon_{\alpha\beta}^*(\omega, \mathbf{k}; \mathbf{B}). \quad (52.1)$$

According to Onsager's principle, this tensor is symmetrical when the signs of the field and the wave vector are simultaneously changed:

$$\epsilon_{\alpha\beta}(\omega, \mathbf{k}; \mathbf{B}) = \epsilon_{\beta\alpha}(\omega, -\mathbf{k}; -\mathbf{B}). \quad (52.2)$$

If the medium is invariant under spatial inversion (as is an equilibrium plasma), the $\epsilon_{\alpha\beta}$ are even functions of $\mathbf{k}$, and (52.2) becomes

$$\epsilon_{\alpha\beta}(\omega, \mathbf{k}; \mathbf{B}) = \epsilon_{\beta\alpha}(\omega, \mathbf{k}; -\mathbf{B}). \quad (52.2a)$$

It must be emphasized, however, that this property occurs only in a medium in thermodynamic equilibrium, unlike (52.1), which follows from the definition of $\epsilon_{\alpha\beta}$.

In the general case, the tensor $\epsilon_{\alpha\beta}$ may be divided into an Hermitian part $\frac{1}{2}(\epsilon_{\alpha\beta} + \epsilon_{\beta\alpha}^*)$ and an anti-Hermitian part $\frac{1}{2}(\epsilon_{\alpha\beta} - \epsilon_{\beta\alpha}^*)$. The latter determines the dissipation of the field energy in the medium; cf. (30.3).

We shall begin the study of magnetoactive plasmas with the simple case of a "cold" collisionless plasma. The temperature of such a plasma is assumed to be so low that the thermal motion of the particles is negligible; the conditions for this will be formulated below. In this approximation, there is no spatial dispersion, and the permittivity depends only on the frequency of the electric field. There is also no dissipation, and the tensor $\epsilon_{\alpha\beta}$ is therefore Hermitian:

$$\epsilon_{\alpha\beta}(\omega; \mathbf{B}) = \epsilon_{\beta\alpha}^*(\omega; \mathbf{B}). \quad (52.3)$$

From this and (52.1), it follows that

$$\epsilon_{\alpha\beta}(\omega; \mathbf{B}) = \epsilon_{\beta\alpha}(-\omega; \mathbf{B}). \quad (52.4)$$

Separating the Hermitian tensor into real and imaginary parts, $\epsilon_{\alpha\beta} = \epsilon'_{\alpha\beta} + i\epsilon''_{\alpha\beta}$, we have from (52.2) and (52.3)

¹† This is obtained from SP 2 (75.20), by dividing that expression into transverse and longitudinal parts, and replacing ϵ in the two parts by $\epsilon_i(\omega, k)$ and $\epsilon_i(\omega, k)$ respectively.

$$\left. \begin{aligned} \epsilon'_{\alpha\beta}(\omega; \mathbf{B}) &= \epsilon'_{\beta\alpha}(\omega; \mathbf{B}) = \epsilon'_{\alpha\beta}(\omega; -\mathbf{B}), \\ \epsilon''_{\alpha\beta}(\omega; \mathbf{B}) &= -\epsilon''_{\beta\alpha}(\omega; \mathbf{B}) = -\epsilon''_{\alpha\beta}(\omega; -\mathbf{B}). \end{aligned} \right\} \quad (52.5)$$

Thus, in a non-dissipative medium, the $\epsilon'_{\alpha\beta}$ are even functions of the field, and the $\epsilon''_{\alpha\beta}$ are odd functions.

We shall suppose that the anisotropy of the plasma is due only to the presence of a constant and uniform magnetic field, whose induction within the plasma is denoted by $\mathbf{B}_0$. In such a case, the general linear relation between the induction and strength of a weak monochromatic electric field is

$$\mathbf{D} = \epsilon_{\perp} \mathbf{E} + (\epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp}) \mathbf{b}(\mathbf{b} \cdot \mathbf{E}) + ig \mathbf{E} \times \mathbf{b}, \quad (52.6)$$

where $\mathbf{b} = \mathbf{B}_0/B_0$; $\epsilon_{\perp}, \epsilon_{\parallel}$ and g are functions of ω and B_0 . This relation is written in tensor form as $D_{\alpha} = \epsilon_{\alpha\beta} E_{\beta}$, where

$$\epsilon_{\alpha\beta} = \epsilon_{\perp} \delta_{\alpha\beta} + (\epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp}) b_{\alpha} b_{\beta} + ig \epsilon_{\alpha\beta\gamma} b_{\gamma} \quad (52.7)$$

If the z -axis is taken along $\mathbf{B}_0$, the components of this tensor are

$$\left. \begin{aligned} \epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} &= \epsilon_{\perp}, & \epsilon_{zz} &= \epsilon_{\parallel} \\ \epsilon_{xy} &= -\epsilon_{yx} = ig, & \epsilon_{xz} = \epsilon_{yz} &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (52.8)$$

From the condition for the tensor (52.7) to be Hermitian, it follows that $\epsilon_{\perp}, \epsilon_{\parallel}$ and g are real, and from (52.4) it follows that $\epsilon_{\perp}$ and $\epsilon_{\parallel}$ are even functions of the frequency, g an odd function. The expression (52.7) necessarily satisfies Onsager's principle.

In weak fields the tensor $\epsilon_{\alpha\beta}$ must be expandable in integral powers of the vector $\mathbf{B}_0$. Hence, as $\mathbf{B}_0 \rightarrow 0$, the coefficient $\epsilon_{\perp}$ tends to a finite limit, the permittivity in the absence of the magnetic field. The difference $\epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp} \propto B_0^2$, and $g \propto B_0$.

The calculation of $\epsilon_{\alpha\beta}$ in this approximation can be made directly from the equations of motion of particles in a variable field $\mathbf{E}$ and a constant field $\mathbf{B}_0$, as in the derivation of (31.9). For example, for electrons

$$m d\mathbf{v}/dt = -e\mathbf{E} - e\mathbf{v} \times \mathbf{B}_0/c \quad (52.9)$$

The velocity $\mathbf{v}$ varies with time in the same way ($\propto e^{-i\omega t}$) as the field $\mathbf{E}$. Neglecting the spatial variation of $\mathbf{E}$ in the region of motion of the particle, we have from (52.9)

$$i\omega \mathbf{v} = e\mathbf{E}/m + e\mathbf{v} \times \mathbf{B}_0/mc$$

The solution of this algebraic vector equation contains terms parallel to $\mathbf{E}$, $\mathbf{b}$ and $\mathbf{E} \times \mathbf{b}$; if the coefficients in these terms are appropriately chosen, we obtain

$$\mathbf{v} = \frac{ie\omega}{m(\omega^2 - \omega_{Be}^2)} \left\{ \mathbf{E} - \frac{\omega_{Be}^2}{\omega^2} \mathbf{b}(\mathbf{E} \cdot \mathbf{b}) - \frac{i\omega_{Be}}{\omega} \mathbf{E} \times \mathbf{b} \right\}, \quad (52.10)$$

where $\omega_{Be} = eB_0/mc$. The polarization $\mathbf{P}$ due to the motion of the electrons, and therefore the induction $\mathbf{D}$, are related to the electron velocity by (29.4):

$$-i\omega \mathbf{P} = -i\omega \frac{\mathbf{D} - \mathbf{E}}{4\pi} = \mathbf{j} = -eN_e \mathbf{v}$$

The ionic contribution to the polarization is calculated in the same way, and the two contributions are additive. The result is

$$\left. \begin{aligned} \epsilon_1 &= 1 - \frac{\Omega_e^2}{\omega^2 - \omega_{Be}^2} - \frac{\Omega_i^2}{\omega^2 - \omega_{Bi}^2} \\ \epsilon_l &= 1 - \frac{\Omega_e^2 + \Omega_i^2}{\omega^2}, \\ g &= \frac{\omega_{Be}\Omega_e^2}{\omega(\omega^2 - \omega_{Be}^2)} - \frac{\omega_{Bi}\Omega_i^2}{\omega(\omega^2 - \omega_{Bi}^2)}. \end{aligned} \right\} \quad (52.11)$$

Here

$$\omega_{Be} = eB_0/mc, \quad \omega_{Bi} = zeB_0/Mc \quad (52.12)$$

are the electron and ion Larmor frequencies; † the values of these parameters are an important characteristic of a magnetoactive plasma (they are the frequencies of rotation of charged particles in circular orbits in the magnetic field).

The ratios

$$\omega_{Bi}/\omega_{Be} = zm/M, \quad \Omega_i/\Omega_e = (zm/M)^{1/2} \quad (52.13)$$

are small quantities. The ratio of the frequencies Ω_e and ω_{Be} , or Ω_i and ω_{Bi} , which depend on entirely different parameters (the plasma density, and the field B_0), may vary over a very wide range.

The ion contribution to the permittivity of a magnetoactive plasma may, despite the large mass of the ions, be comparable with or even greater than the electron contribution at sufficiently low frequencies ω . As $\omega \rightarrow 0$, the two terms in g cancel, and $g \rightarrow 0$, as is easily seen by noting that

$$\Omega_e^2/\omega_{Be} = \Omega_i^2/\omega_{Bi} \quad (52.14)$$

because of the electrical neutrality of the plasma ($N_e = zN_i$). The two terms in g remain of the same order of magnitude when $\omega \sim \omega_{Bi}$, and the ion part of g is negligible when $\omega \gg \omega_{Bi}$. In the transverse permittivity $\epsilon_\perp$, the two terms are comparable only in the range

$$\omega \sim \omega_{Bi}(M/m)^{1/2} \sim (\omega_{Bi}\omega_{Be})^{1/2}$$

The ion contribution is negligible here only if

$$\omega \gg (\omega_{Bi}\omega_{Be})^{1/2} \quad (52.15)$$

Lastly, in the longitudinal permittivity ϵ_l (which contains the sum of Ω_e^2 and Ω_i^2) the ion part is always negligible. Incidentally, $\epsilon_\parallel$ is independent of $\mathbf{B}_0$ because the field $\mathbf{E}$ has been assumed uniform: in crossed uniform fields, the magnetic field does not affect the motion of particles parallel to $\mathbf{B}_0$.

Let us finally consider the conditions for the above formulae to be applicable. In applying equation (52.9) to the motion of particles, we have neglected the spatial variation of $\mathbf{E}$ in the region where the particles are. The size of this region in the direction of the constant field $\mathbf{B}_0$ is given by the distance v_T/ω traversed by a particle moving with the mean thermal speed v_T during the period of the variable field. In the directions perpendicular to $\mathbf{B}_0$, the size of the region when $\omega < \omega_B$ is determined by

$$r_B \sim v_T/\omega_B \quad (52.16)$$

the radius of the circular orbits of particles moving with speed v_T in the magnetic field $\mathbf{B}_0$, called the Larmor radius of the particles. The approximation described above requires that

[†] Also called cyclotron frequencies or gyro-frequencies.

these distances be small in comparison with those over which the field $\mathbf{E}$ varies in the relevant directions:

$$v_T |k_{\parallel}| / \omega \ll 1, \quad v_I k_{\perp} / \omega_B \ll 1, \quad (52.17)$$

where $k_{\parallel} \equiv k_{\parallel}$, and $k_{\perp}$, are the components of the wave vector along and across the field $\mathbf{B}_0$. These inequalities must be satisfied for each type of particle in the plasma.

We shall see below that the frequency ω must also not be too close to ω_{Be}, ω_{Bi} or a multiple of these (the conditions (53.17)). Near such frequencies, the spatial dispersion has to be taken into account even if the conditions (52.17) are satisfied. As we shall see in §55, this eliminates the poles of the expressions (52.11) at $\omega^2 = \omega_{Be}^2, \omega_{Bi}^2$.

15.5.2 §53. The distribution function in a magnetic field

The permittivity tensor in a collisionless magnetoactive plasma, with allowance for spatial dispersion, is calculated from the electron and ion distribution functions which are determined by the transport equation.

All formulae will be written for the particular case of electrons. The transport equations for a collisionless plasma have been given in §27. For electrons, the equation is

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} - e(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}/c) \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = 0. \quad (53.1)$$

Let the plasma be in a constant and uniform magnetic field $\mathbf{B}_0$ of any strength, and a weak variable electromagnetic field in which

$$\mathbf{E}, \mathbf{B}' \propto e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} \quad (53.2)$$

From Maxwell's equations,

$$\omega \mathbf{B}' / c = \mathbf{k} \times \mathbf{E}. \quad (53.3)$$

We substitute in (53.1) $\mathbf{B} = \mathbf{B}_0 + \mathbf{B}'$, and express the distribution function as $f = f_0 + \delta f$, where f_0 is the stationary uniform distribution in the absence of the variable field; the small correction δf depends on t and r in the same way (53.2) as the fields $\mathbf{E}$ and $\mathbf{B}'$ to which it is proportional. Separating the zero-order and first-order terms (relative to the weak field) in the equation, we obtain †

$$\frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} \cdot \mathbf{v} \times \mathbf{B}_0 = 0 \quad (53.4)$$

$$i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{v} - \omega) \delta f - \frac{e}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{B}_0 \cdot \frac{\partial \delta f}{\partial \mathbf{p}} = e \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{p}} \cdot \left\{ \mathbf{E} + \frac{1}{\omega} \mathbf{v} \times (\mathbf{k} \times \mathbf{E}) \right\} \quad (53.5)$$

Let v_x and k_z denote the components of the vectors $\mathbf{v}$ and $\mathbf{k}$ along the field $\mathbf{B}_0$; $\mathbf{v}_{\perp}$ and $\mathbf{k}_{\perp}$, the components in the plane perpendicular to $\mathbf{B}_0$; φ , the angle between $\mathbf{v}_{\perp}$ and the plane of $\mathbf{k}_{\perp}$ and B_0 , measured in the direction of rotation of a conkscrew driven along B_0 . The variables v_2, v_1 and φ are cylindrical polar coordinates in v -space. In these variables, (53.5) becomes

$$i(k_z v_z + k_1 v_1 \cos \varphi - \omega) \delta f + \omega_{Be} \partial \delta f / \partial \varphi = e \left\{ \mathbf{E} + \frac{1}{\omega} \mathbf{v} \times (\mathbf{k} \times \mathbf{E}) \right\} \cdot \partial f_0 / \partial \mathbf{p} \quad (53.6)$$

From (53.4) it follows that $\partial f_0 / \partial \varphi = 0$, i.e. f_0 can be any function of p , and $p_{\perp}$ only:

$$f_0 = f_0(p_z, p_\perp), \quad (53.7)$$

a result that is obvious for a collisionless plasma, since p_z and $p_\perp$ are the variables not affected by the magnetic field.

To simplify the formulae, we use the notation

$$\alpha = (k_z v_z - \omega) / \omega_{Be}, \quad \beta = k_\perp v_\perp / \omega_{Be} \quad (53.8)$$

$$Q(v_z, v_\perp, \varphi) = \frac{e}{\omega_{Be}} \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{p}} \cdot \left\{ \mathbf{E} + \frac{1}{\omega} \mathbf{v} \times (\mathbf{k} \times \mathbf{E}) \right\} \quad (53.9)$$

If f_0 depends only on the electron energy $\epsilon = p^2/2m$, the derivative $\partial f_0 / \partial \mathbf{p} = \mathbf{v} df_0 / d\epsilon$, and its product with the second term in the braces is zero, so that

$$Q = \frac{e}{\omega_{Be}} \frac{df_0}{d\epsilon} \mathbf{v} \cdot \mathbf{E}. \quad (53.10)$$

[†] In a cold plasma, there was no need to take account of the Lorentz force exerted by the weak field B' , since it is of the second order of smallness when the intrinsic movement of the particles (in the absence of the field) is neglected.

With this notation, (53.6) becomes

$$\partial \delta f / \partial \varphi + i(\alpha + \beta \cos \varphi) \delta f = Q(\varphi) \quad (53.11)$$

the arguments v_z and $v_\perp$ of Q are omitted. The solution is

$$\delta f = e^{-i(\alpha\varphi + \beta \sin \varphi)} \int_C^\varphi e^{i(\alpha\varphi' + \beta \sin \varphi')} Q(\varphi') d\varphi'$$

or, with the change of variable of integration $\varphi' = \varphi - \tau$,

$$\delta f = e^{-i\beta \sin \varphi} \int_0^{C-\varphi} e^{i\beta \sin(\varphi-\tau) - i\alpha\tau} Q(\varphi - \tau) d\tau$$

The constant C is determined by the condition that the function δf be periodic in φ with the period 2π . Since the integrand and the coefficient of the integral are periodic in φ , this condition is satisfied if the limits of integration are independent of φ , for which we must take $C = \infty$ or $C = -\infty$. The choice between these two possibilities is decided by the Landau contour rule (29.6): the integration is to be taken with $\omega \rightarrow \omega + i0$, i.e. $\alpha \rightarrow \alpha - i0$. Such an integral is convergent only with $C = \infty$ [†]. The final result is

$$\begin{aligned} \delta f &= e^{-i\beta \sin \varphi} \int_0^\infty e^{i\beta \sin(\varphi-\tau) - i\alpha\tau} Q(\varphi - \tau) d\tau \\ &= \int_0^\infty \exp \left\{ -i\alpha\tau - 2i\beta \cos \left(\varphi - \frac{1}{2}\tau \right) \sin \frac{1}{2}\tau \right\} Q(\varphi - \tau) d\tau \end{aligned} \quad (53.12)$$

In the limit $B_0 \rightarrow 0$, this should become (29.2). To take the limit, we note that for $\alpha \gg 1$ the important range in the integral is $\tau \ll 1$. Then $\sin(\varphi - \tau) \approx \sin \varphi - \tau \cos \varphi$, and the integral becomes

$$\begin{aligned} \delta f &= Q(\varphi) \int_0^\infty e^{-i(\alpha+\beta)\tau} d\tau \\ &= Q(\varphi) \int_0^\infty \exp \left\{ -i\tau \frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{v} - \omega}{\omega_{Be}} \right\} d\tau \end{aligned}$$

Taking the integral with $\omega \rightarrow \omega + i0$, we obtain

$$\delta f = Q\omega_{Be}/i(k \cdot v - \omega), \quad (53.13)$$

the required result.

If the field frequency is equal to the Larmor frequency ω_{Be} or a multiple of it, we have simple or multiple cyclotron resonance (of the electrons). To study the dielectric properties of the plasma near such resonances, a different method of
 This conclusion depends on the sign of ω in the exponent. For ions, the charge $-e$ is replaced by ze , so that $\omega_{Be} \rightarrow -\omega_B$. Then $\alpha \rightarrow \alpha + i0$ when $\omega \rightarrow \omega + i0$, and C would have to be taken as $-x$.

solving equation (53.11) is convenient, based on expanding the function sought in a Fourier series with respect to the variable φ .

With the substitution

$$\delta f = e^{-i\beta \sin \varphi} g \quad (53.14)$$

in (53.11), we obtain for g the equation

$$\partial g / \partial \varphi + i\alpha g = e^{i\beta \sin \varphi} Q(v_z, v_\perp, \varphi)$$

The solution is sought as a Fourier series

$$g = \sum_{s=-\infty}^{\infty} e^{is\varphi} g_s(v_z, v_\perp) \quad (53.15)$$

and the coefficients g_s are found to be

$$Q_s(v_x, v_\perp) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{i(\beta \sin \tau - s\tau)} Q(v_z, v_\perp, \tau) d\tau \quad \left. \begin{array}{l} g_s = Q_s / i(\alpha + s) \end{array} \right\} \quad (53.16)$$

The expansion (53.15) automatically makes δf a periodic function of φ .

First of all, the expression of δf as the series (53.14), (53.15) allows an immediate formulation of the conditions for spatial dispersion to be negligible. The wave number appears in the terms of the series through the parameters

$$\beta = k_\perp v_\perp / \omega_B, \quad \alpha + s = -(\omega - s\omega_B - k_z v_z) / \omega_B$$

The permittivity of the plasma is determined by the distribution function at speeds $v \sim v_T$. The wave number does not appear in this function if

$$k_\perp v_\perp \ll \omega_B, \quad |\omega - s\omega_B| \gg |k_z| v_T \quad (53.17)$$

The first inequality (53.17), and the second one with $s = 0$, are the same as the conditions (52.17). We see that, as well as these conditions, the frequency ω must not be too close to any of the cyclotron resonances.

In the neighbourhood of these resonances, the distribution function can be represented by a single term of the Fourier series under certain conditions, namely

$$|k_z| v_T \ll \omega_B, \quad |\omega - n\omega_B| \ll \omega_B, \quad (53.18)$$

where n is any of the numbers $0, \pm 1, \pm 2, \dots$. It is easily seen that the n th term in the expansion (53.15) is then large compared with the others:

$$g_n \sim Q_n \omega_B / (|k_z v_T| + |\omega - n\omega_B|) \gg Q_n$$

whereas $g_s \leq Q_s$ for $s \neq n$ (since $|s\omega_B - \omega| \geq \omega_B$). Retaining this one term, we find for the electron distribution function

$$\left. \begin{aligned} \delta f &= Q_n \frac{\omega_{Be} \exp[i\{n\varphi - (k_\perp v_\perp / \omega_{Be}) \sin \varphi\}]}{i[k_z v_z - (\omega - n\omega_{Be})]} \\ Q_n &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \exp[-i\{n\tau - (k_\perp v_\perp / \omega_{Be}) \sin \tau\}] Q(v_z, v_\perp, \tau) d\tau \end{aligned} \right\} \quad (53.19)$$

The dependence of the distribution function on the angle φ is given explicitly by this formula. In particular, when $n = 0$ and $k_\perp \rightarrow 0$, the distribution is independent of φ . The source of this property is evident from the condition $\omega \ll \omega_{Be}$, i.e. (53.18) with $n = 0$: the Larmor rotation frequency is much greater than the field variation frequency, and this "averages" the distribution frequency over the angle of rotation. [†]

15.5.3 §54. Permittivity of a magnetoactive Maxwellian plasma

The electron contribution to the permittivity tensor is calculated from the distribution function by means of the formula

$$P_\alpha = \frac{\epsilon_{\alpha\beta} - \delta_{\alpha\beta}}{4\pi} E_\beta = \frac{e}{i\omega} \int v_\alpha \delta f d^3p \quad (54.1)$$

and the ion contribution is similar with $-ze$ instead of e . For a Maxwellian plasma, the integration over d^3p in this expression can be carried out explicitly.

The function δf is given by the integral (53.12), and from the definition (53.10)

$$Q = -(e\mathbf{E} \cdot \mathbf{v} / \omega_{Be} T) f_0 \quad (54.2)$$

We can rewrite the integral more compactly by using instead of $\mathbf{k} = (k_z, \mathbf{k}_\perp)$ and $\mathbf{E} = (E_z, \mathbf{E}_\perp)$ the vectors

$$\mathbf{K} = \left(k_z \tau, 2\tilde{\mathbf{k}}_\perp \sin \frac{1}{2}\tau \right), \quad \tilde{\mathbf{E}} = (E_z, \tilde{\mathbf{E}}_\perp), \quad (54.3)$$

where $\tilde{\mathbf{k}}_\perp$ is $\mathbf{k}_\perp$ turned through $\frac{1}{2}\tau$ in the plane perpendicular to $\mathbf{B}_0$, and $\tilde{\mathbf{E}}_\perp$ is $\mathbf{E}_\perp$ turned through τ . Then δf becomes

$$\delta f = \frac{e}{T\omega_{Be}} \int_0^\infty \exp \left\{ \frac{i}{\omega_{Be}} (\omega\tau - \mathbf{K} \cdot \mathbf{v}) \right\} f_0(p) \tilde{\mathbf{E}} \cdot \mathbf{v} d\tau$$

where $f_0(p)$ is the Maxwellian distribution function.

This expression is substituted in (54.1), and the variable of integration $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$ is changed according to

$$\mathbf{v} = \mathbf{u} - i\mathbf{K}T/m\omega_{Be}.$$

The integration over d^3u is elementary, and the result is

$$\mathbf{P} = \frac{ie^2 N_e}{m\omega\omega_{Be}} \int_0^\infty \left(\tilde{\mathbf{E}} - \frac{T}{m\omega_{Be}^2} (\tilde{\mathbf{E}} \cdot \mathbf{K}) \mathbf{K} \right) \exp \left[-\frac{i\omega\tau}{\omega_{Be}} - \frac{\mathbf{K}^2 T}{2m\omega_{Be}^2} \right] d\tau. \quad (54.4)$$

According to the definition (54.3),

$$K^2 = k_z^2 \tau^2 + 4k_\perp^2 \sin^2 \frac{1}{2}\tau.$$

^{††} The relevant arguments are given more fully for an analogous situation in § I.

By writing (54.4) in components, we find the components of the tensor $\epsilon_{\alpha\beta}$. The coordinate axes are chosen as follows: z along $\mathbf{B}_0$, x along $\mathbf{k}_1$, and y along $\mathbf{B}_0 \times \mathbf{k}_1$ (Fig. 15). A simple calculation gives

$$\epsilon_{\alpha\beta} - \delta_{\alpha\beta} = \frac{i\Omega_e^2}{\omega\omega_{Be}} \int_0^x \kappa_{\alpha\beta} \exp \left\{ i\tau \frac{\omega + i0}{\omega_{Be}} - \frac{1}{2} k_z^2 r_{Be}^2 \tau^2 - 2k_{\perp}^2 r_{Be}^2 \sin^2 \frac{1}{2}\tau \right\} d\tau, \quad (54.5)$$

where

$$\left. \begin{aligned} \kappa_{xx} &= \cos \tau - (k_1 r_{Be})^2 \sin^2 \tau, \\ \kappa_{yy} &= \cos \tau + 4(k_1 r_{Be})^2 \sin^4 \frac{1}{2}\tau, \\ \kappa_{zz} &= 1 - (k_z r_{Be})^2 \tau^2, \\ \kappa_{xy} &= -\kappa_{yx} = -\sin \tau + 2(k_1 r_{Be})^2 \sin \tau \sin^2 \frac{1}{2}\tau, \\ \kappa_{xz} &= \kappa_{zx} = -k_z k_1 r_{Be}^2 \tau \sin \tau, \\ \kappa_{yz} &= -\kappa_{zy} = -2k_z k_1 r_{Be}^2 \tau \sin^2 \frac{1}{2}\tau; \end{aligned} \right\} \quad (54.6)$$

$r_{Be} = v_{Te}/\omega_{Be}$ is the electron Larmor radius.

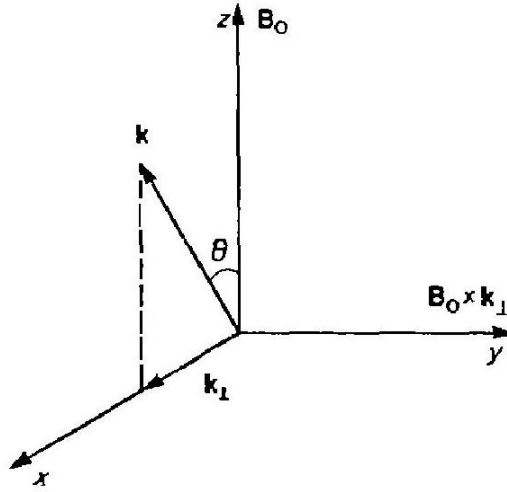


Fig. 15.

The equations

$$\epsilon_{xy} = -\epsilon_{yx}, \quad \epsilon_{xz} = \epsilon_{zx}, \quad \epsilon_{yz} = -\epsilon_{zy}, \quad (54.7)$$

are evident as follows: with fixed coordinates, Onsager's principle gives $\epsilon_{\alpha\beta}(B_0) = \epsilon_{\beta\alpha}(-B_0)$, and with the above choice of axes tied to the directions of $\mathbf{B}_0$ and $\mathbf{k}_1$ the y - and z -axes are reversed when $\mathbf{B}_0 \rightarrow -\mathbf{B}_0$. With these axes, therefore,

$$\left. \begin{aligned} \epsilon_{xy}(B_0) &= -\epsilon_{yx}(-B_0) \\ \epsilon_{xz}(B_0) &= -\epsilon_{zx}(-B_0) \\ \epsilon_{yz}(B_0) &= \epsilon_{zy}(-B_0) \end{aligned} \right\} \quad (54.8)$$

Now $\mathbf{B}_0$ (the direction of the z -axis) is a pseudovector; $\mathbf{k}_1$ and $\mathbf{B}_0 \times \mathbf{k}_1$ (the directions of the x - and the y -axis) are true vectors. Hence, because of the requirement of invariance under inversion of the coordinates, the components ϵ_{xz} and ϵ_{yz} , which contain one suffix z , must be odd functions of $\mathbf{B}_0$, and all other components must be even functions. Hence equations (54.8) imply (54.7).

Because of the relations (54.7), the Hermitian and anti-Hermitian parts of the various components $\epsilon_{\alpha\beta} = \epsilon'_{\alpha\beta} + i\epsilon''_{\alpha\beta}$ are differently expressed in terms of their real and imaginary parts. The division into Hermitian and anti-Hermitian parts is expressed by the sum

$$(\epsilon_{\alpha\beta}) = \begin{pmatrix} \epsilon'_{xx} & i\epsilon''_{xy} & \epsilon'_{xz} \\ -i\epsilon''_{xy} & \epsilon'_{yy} & i\epsilon''_{yz} \\ \epsilon'_{xz} & -i\epsilon''_{yz} & \epsilon'_{zz} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} i\epsilon''_{xx} & \epsilon'_{xy} & i\epsilon''_{xz} \\ -\epsilon'_{xy} & i\epsilon''_{yy} & \epsilon'_{yz} \\ i\epsilon''_{xz} & -\epsilon'_{yz} & i\epsilon''_{zz} \end{pmatrix} \quad (54.9)$$

Although all the calculations have been made for the electron part of the permittivity, exactly similar formulae are valid for the ion contribution. The change to the latter is made by putting $\Omega_e, v_{Te} \rightarrow \Omega_i, v_{Ti}$ and $\omega_{Be} \rightarrow -\omega_B$, and simultaneously changing the upper limit of the integral in (54.5) to $-\infty$; see the third footnote to § 53. Then, with the change of the variable of integration $\tau \rightarrow -\tau$, we return to the previous expressions (54.5), (54.6) with $\Omega_i, v_{Ti}, \omega_{Bi}$ instead of $\Omega_e, v_{Te}, \omega_{Be}$, and a change in sign of κ_{xy} and κ_{yz} . Thus the rule for going from the electron contribution to the ion contribution to the permittivity is to replace the electron parameters by ion parameters and at the same time to change the sign of the components ϵ_{xy} and ϵ_{yz} .

15.5.4 §55. Landau damping in magnetoactive plasmas

When the thermal movement of plasma particles is taken into account, the tensor $\epsilon_{\alpha\beta}$ acquires an anti-Hermitian part. In a collisionless plasma, since there is no true dissipation of energy, this part of the tensor is due to Landau damping.

We have seen in §30 that the mechanism of Landau damping depends on the transfer of electromagnetic field energy to particles moving in phase with the wave: the damping involves particles for which $\omega = k.v$, i.e. the component of the velocity v in the direction of k is equal to the phase velocity ω/k of the wave. In a magnetoactive plasma, this condition is somewhat altered: the components of the particle velocity and the wave phase velocity along the constant field $\mathbf{B}_0$ must be equal:

$$v_z k_z = \omega. \quad (55.1)$$

This is because the motion of the particle transversely to $\mathbf{B}_0$ is in circles and cannot involve any systematic transfer of energy from the field to the particle: if the particle moves in phase with the wave and gains energy from it in one part of the circle, a similar amount of energy will be transferred from the particle to the field in the opposite part of the circle.

In a magnetoactive plasma, however, there is a further mechanism of collisionless dissipation, due to the Larmor rotation of the particles. In coordinates moving with the particle at speed v_z along the field $\mathbf{B}_0$, the particle moves in a circular orbit with frequency ω_B . Such a particle is electro-dynamically an oscillator radiating at frequency ω_B (synchrotron radiation). When an oscillator is placed in a variable external field, it absorbs at this frequency. The electromagnetic wave frequency in coordinates moving relative to the plasma is modified by the Doppler effect and is $\omega' = \omega - k_z v_z$. The particles concerned in the absorption are therefore those for which

$$\omega - k_z v_z = \omega_B$$

If $k_\perp = 0$, the wave field is uniform in the directions transverse to B_0 , i.e. the stimulating force on the oscillator is independent of the latter's coordinates. Under these conditions, the oscillator absorbs only at its frequency ω_B . If, however, $k_\perp \neq 0$, the stimulating force depends on the coordinates of the oscillator, and so there is absorption at multiple frequencies also, i.e. when

$$\omega - k_z v_z = n\omega_B \quad (55.2)$$

where n is any positive or negative integer. This mechanism of dissipation is called Landau cyclotron damping; the cyclotron resonance is simple ($n = \pm 1$) or multiple, according to the value of n .

Thus there can be considerable damping in frequency ranges for which

$$|\omega - n\omega_B| \leq |k_z| v_T, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \quad (55.3)$$

the value $n = 0$ corresponding to the condition (55.1). These resonance absorption lines exist at the electron and ion frequencies ω_{Be} and ω_{Bi} .

Mathematically, the conditions (55.1) and (55.2) correspond to the poles, at these points, of the various terms in the Fourier-series expansion (53.14)-(53.16) of the distribution function. The anti-Hermitian parts of the tensor $\epsilon_{\alpha\beta}$ arise from the residues when the poles in the integral (54.1) are avoided by Landau's rule. The passage to the limit $B_0 \rightarrow 0$ is mathematically peculiar. In a magnetic field, the pole values v_x (for a given k_z) form a discrete sequence determined by equation (55.2). As the field decreases, the poles come closer together, and in the limit $B_0 = 0$ the pole values v_2 depend not on a discrete number n but on the continuous parameter $k_1 \cdot v_1$, in accordance with the condition

$$\omega = \mathbf{k} \cdot \mathbf{v} = k_z v_z + \mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{v}_1,$$

as shown in going from (53.12) to (53.13).

Let us calculate, as an example, the permittivity tensor in the region of a simple ($n = 1$) electron cyclotron resonance. We shall also suppose that

$$|k_z| v_{Te} / \omega_{Be} \leq 1, \quad k_\perp v_{Te} / \omega_{Be} \ll 1 \quad (55.4)$$

Then it is sufficient to use for the distribution function just one term of the Fourier series—the expression (53.19), corresponding to the given value of n . Because of the second condition (55.4), this function can be expanded in powers of k_1 . When $n = 1$, only the zero-order term need be taken in such an expansion, since *cyclotron* absorption at the frequency ω_{Be} does not require the external field to be nonuniform in the xy -plane.

Thus we write the distribution function as

$$\delta f = Q_1 \frac{\omega_{Be} e^{ir}}{i [k_z v_z - (\omega - \omega_{Be})]}, \quad (55.5)$$

with

$$Q_1 = -\frac{ef_0}{2\pi T \omega_{Be}} \int_0^{2\pi} \mathbf{E} \cdot \mathbf{v} e^{-i\tau} d\tau$$

Writing

$$\mathbf{E} \cdot \mathbf{v} = E_x v_\perp \cos \tau + E_y v_\perp \sin \tau + E_z v_z,$$

and carrying out the integration, we obtain

$$Q_1 = -\frac{ev_1}{2T \omega_{Be}} f_0 (E_x - iE_y) \quad (55.6)$$

With this distribution function, the polarization vector (54.1) has only x - and y -components. After the integration over $v_\perp dv_\perp d\varphi$, they are

$$P_x = -iP_y = (E_x - iE_y) \frac{e^2 N_e}{2\omega m k_z} \left(\frac{m}{2\pi T} \right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{mv_z^2}{2T}\right) \frac{dv_z}{v_z - (\omega - \omega_{Be})/k_z - i0 \operatorname{sgn} k_z}.$$

An integral of this form can be expressed in terms of the function F defined by (31.3). We obtain finally as the components of the permittivity tensor †

$$\left. \begin{aligned} \epsilon_{xx} - 1 = \epsilon_{yy} - 1 = i\epsilon_{xy} &= \frac{\Omega_e^2}{2\omega(\omega - \omega_{Be})} F\left(\frac{\omega - \omega_{Be}}{\sqrt{2}v_{Te}|k_z|}\right), \\ \epsilon_{zz} - 1 = \epsilon_{xz} = \epsilon_{yz} &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (55.7)$$

† The pole $v_2 = (\omega - \omega_8)/k_z$ is passed below or above, according to the sign of k_z ; this is the reason for the presence of the modulus of k_z in the argument of F .

The anti-Hermitian part of this tensor, which describes the damping, is

$$\epsilon''_{xx} = \epsilon''_{yy} = \epsilon'_{xy} = \frac{\pi^{1/2}\Omega_e^2}{2^{3/2}\omega|k_z|v_{Te}} \exp\left\{-\frac{(\omega - \omega_{Be})^2}{2v_{Te}^2 k_z^2}\right\}. \quad (55.8)$$

The Hermitian part, in the immediate neighbourhood of $\omega = \omega_{Be}$, has the form

$$\left. \begin{aligned} \epsilon'_{xx} - 1 = \epsilon'_{yy} - 1 = -\epsilon''_{xy} &= -\Omega_e^2(\omega - \omega_{Be})/2\omega v_{Te}^2 k_z^2, \\ |\omega - \omega_{Be}|/v_{Te}|k_z| &\ll 1. \end{aligned} \right\} \quad (55.9)$$

At the point $\omega = \omega_n$ itself, this part passes through zero and changes sign. We see here how the inclusion of spatial dispersion removes the poles of the permittivity (52.11) of a cold plasma: the discontinuous variation shown by the broken line in Fig. 16 is replaced by the continuous line. †

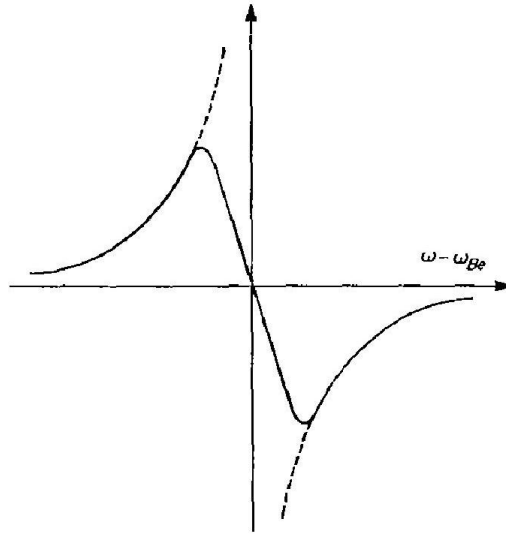


Fig. 16.

In the limit $|k_z| \rightarrow 0$, the expression (55.8) reduces to a delta function:

$$\epsilon''_{xx} = \epsilon''_{yy} = \epsilon'_{xy} \rightarrow (\pi\Omega_e^2/2\omega) \delta(\omega - \omega_{Be}) : \quad (55.10)$$

when $\omega - \omega_{Be} \neq 0$, (55.8) is zero in the limit, and the integral of this function over $d\omega$ is $\pi\Omega_e^2/2\omega$ for any value of k_z . The significance of the result is clear: in the absence of spatial dispersion ($k \rightarrow 0$), the width of the absorption line tends to zero, and damping occurs only when ω coincides exactly with ω_{Be} . Formula (55.10) may be used in place of (55.8) in expressions integrated with respect to ω .

The formula (55.10) can also be derived directly from the expressions (52.11) for the permittivity of a cold plasma, by means of Landau's avoidance rule, according

to which the frequency ω at a pole is to be taken as $\omega + i0$. Thus the pole factors in (52.11) are really to be understood as follows:

$$\frac{1}{\omega^2 - \omega_{Be}^2} \rightarrow \frac{1}{2\omega_{Be}} \left[\frac{1}{\omega - \omega_{Be} + i0} - \frac{1}{\omega + \omega_{Be} + i0} \right]$$

and according to the rule (29.8)

$$\frac{1}{\omega^2 - \omega_{Be}^2} \rightarrow P \frac{1}{\omega^2 - \omega_{Be}^2} - \frac{i\pi}{2\omega_{Be}} [\delta(\omega - \omega_{Be}) - \delta(\omega + \omega_{Be})]. \quad (55.11)$$

Making this change in (52.11), we obtain (55.10).

When $k_z = 0$ (i.e. $k \perp B_0$), there is no Landau damping in a magnetoactive plasma: the speed of the particles no longer appears in (55.1) and (55.2), and these conditions cannot be satisfied except when ω coincides exactly with some $n\omega_B$.[†] This property is due to the non-relativistic approximation; in a relativistic plasma, the Landau (cyclotron) damping can occur even when $k_z = 0$. The frequency of rotation round the direction of B_0 for a relativistic charged particle with energy ϵ is

$$\omega_B m c^2 / \epsilon = \omega_B \sqrt{1 - v^2/c^2},$$

with ω_B defined as before. This value is to be used in place of ω_B on the right-hand side of the condition (55.2). In particular, for $k_z = 0$ we have

$$\omega = n\omega_B \sqrt{1 - v^2/c^2}; \quad (55.12)$$

to allow this condition to be satisfied, it is necessary only that $\omega < n\omega_B$.

Landau damping in a magnetoactive relativistic plasma can occur even in the limit $k \rightarrow 0$ (unlike the cases of a magnetoactive non-relativistic plasma and a relativistic plasma with no magnetic field). It is due to particles in simple cyclotron resonance with a uniform variable field—the condition (55.12) with $n = 1$ —and therefore exists at frequencies $\omega < \omega_B$; see Problem 2.

PROBLEMS

Problem I. Find the permittivity tensor for a magnetoactive plasma at $\omega \leq |k_i| v_{te}$; the conditions (55.4) also are assumed satisfied.

Solution. In the zero-order approximation with respect to the small parameter $k_1 v_{te} / \omega_{Re}$, the distribution function for this case (the $s = 0$ term in the Fourier series (53.14), (53.15)) is

$$\delta f = Q_0 \omega_{Re} li(k_z v_z - \omega),$$

where

$$Q_0 = -\frac{ef_0}{\omega_{Be} T} \frac{I}{2\pi} \int_0^{2\pi} E \cdot v d\tau = -\frac{ev_2 E_2}{\omega_{Be} T} f_0$$

In the limit $B_0 \rightarrow 0$, the damping of course reappears because of electrons that satisfy the condition $\omega = k \cdot v \equiv k_1 \cdot v_1$.

With this function δf , the polarization vector P is in the z -direction, and the only non-zero component of the tensor $\epsilon_{\alpha\beta} - \delta_{\alpha\beta}$ is

[†]The expression (55.7) does not have the property (52.1), of course, which would occur only if the absorption line near $\omega = -\omega_{Be}$ were considered as well as that near $\omega = \omega_{Be}$.

$$\epsilon_{zz} - 1 = \frac{4\pi e^2}{\omega T} \int \frac{f_v(p) v_z^2 d^3p}{k_z v_z - \omega - i0}$$

After the identical transformation

$$v_z^2 = \frac{1}{k_z} (k_z v_z - \omega) v_z + \frac{\omega}{k_z} v_z,$$

the integral of the first term over dp : gives zero, and the second term yields the result

$$\epsilon_r - 1 = \frac{\Omega_e^2}{k_z^2 v_{Te}^2} \left[F\left(\omega/\sqrt{2}|k_z|v_{Te}\right) + 1 \right]$$

The imaginary part of this is

$$\epsilon''_{zz} = \frac{\pi^{1/2} \omega \Omega_e^2}{2^{1/2} |k_z|^3 v_{Te}^3} \exp(-\omega^2/2k_z^2 v_{Te}^2)$$

Problem 2. Find the anti-Hermitian part of the permittivity tensor for an ultra-relativistic magnetoactive electron plasma in the limit $\mathbf{k} \rightarrow 0$.

SOLUTION. In the relativistic case, the transport equation (53.5) remains unchanged, but in the transformation to (53.6) the relativistic relation $p = \epsilon v/c^2$ (where ϵ is the electron energy) in place of $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$ replaces ω_{Be} by $\omega_{Be} mc^2/\epsilon$; the subsequent formulae in §53, with this change, then remain valid.

When $k = 0$, damping arises only from the simple cyclotron resonance. Hence, to calculate the anti-Hermitian part of $\epsilon_{\alpha\beta}$, it is sufficient to take the term with $s = I$ in (53.14) and (53.15). Analogously to (55.5) and (55.6), we find

$$\delta f = -\frac{ie p_{\perp} c^2 e'^{\psi} f_0}{2 T \epsilon (\omega - \omega_{Be} mc^2/\epsilon)} (E_x - iE_y).$$

The ultra-relativistic ($T \gg mc^2$) function f_0 is †

$$f_0 = (N_r c^3 / 8\pi T^3) e^{-\epsilon/T}.$$

The polarization vector is calculated as

$$\mathbf{P} = \frac{e}{i\omega} \int (\mathbf{p} c^2 / \epsilon) \delta f d^3p$$

where d^3p is to be expressed as $p^2 dp d\phi = p \epsilon d\epsilon d\phi / c^2$. The integration over $d\phi$, with $cp = (\epsilon^2 - m^2 c^4)^{1/2}$, gives

$$\begin{aligned} \epsilon_{xx} - 1 = \epsilon_{yy} - 1 &= i\epsilon_{xy} \\ &= -\frac{\Omega_r^2 mc^2}{12\omega^2 T^4} \int_{mr^2}^x \frac{(\epsilon^2 - m^2 c^4)^{3/2} e^{-\epsilon/T} d\epsilon}{\epsilon - \omega_{Be} mc^2/\omega + i0} \end{aligned}$$

The integral has an imaginary part if the pole $\epsilon = \omega_n, mc^2/\omega$ lies in the range of integration, i.e. if $\omega < \omega_{Be}$. In this case the final result is

$$\epsilon''_{xx} = \epsilon''_{yy} = \epsilon'_{xy} = \frac{\pi \Omega_e^2 \omega_{Be}^3}{12\omega^3} \left(1 - \frac{\omega^2}{\omega_{Be}^2}\right)^{3/2} \exp\left(-\frac{mc^2 \omega_{Be}}{\omega T}\right).$$

15.5.5 §56. Electromagnetic waves in a magnetoactive cold plasma

We can derive a general equation giving the dependence of the frequency on the wave vector (the dispersion relation) for free monochromatic waves propagating in a medium with any dielectric tensor $\epsilon_{\alpha\beta}(\omega, \mathbf{k})$.

† In this expression, the normalization factor is written with ultra-relativistic accuracy; we cannot put $\epsilon \approx cp$, on account of the subsequent integration with respect to p from 0 to ∞ .

For an electromagnetic field whose dependence on the time and coordinates is given by $\exp(-i\omega t + ik \cdot r)$, Maxwell's equations (28.2) become †

$$\mathbf{k} \times \mathbf{E} = \omega \mathbf{B}/c, \quad \mathbf{k} \times \mathbf{B} = -\omega \mathbf{D}/c \quad (56.1)$$

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{B} = 0, \quad \mathbf{k} \cdot \mathbf{D} = 0 \quad (56.2)$$

Substitution of the first equation (56.1) in the second gives

$$\omega^3 \mathbf{D}/c^2 = -\mathbf{k} \times (\mathbf{k} \times \mathbf{E}) = \mathbf{E}k^2 - \mathbf{k}(\mathbf{k} \cdot \mathbf{E}).$$

or in components

$$E_\alpha k^2 - k_\alpha k_\beta E_\beta = \omega^2 D_\alpha / c^2 = \omega^2 \epsilon_{\alpha\beta} E_\beta / c^2 \quad (56.3)$$

The condition for these linear homogeneous equations to be compatible is the vanishing of the determinant:

$$|k^2 \delta_{\alpha\beta} - k_\alpha k_\beta - \omega^2 \epsilon_{\alpha\beta} / c^2| = 0 \quad (56.4)$$

This is the required dispersion relation ‡ For a given (real) k , it determines the frequencies $\omega(\mathbf{k})$ (in general complex), i.e. the eigenvibration spectrum of the medium. In the general case where frequency dispersion and spatial dispersion are present, equation (56.4) defines an infinity of branches of the function $\omega(\mathbf{k})$.

Let us consider electromagnetic waves in a magnetoactive cold plasma whose permittivity tensor is given by (52.7) and (52.11).§ Since this tensor is Hermitian, the values of $k^2 c^2 / \omega^2$ determined by (56.4) are obviously real.

In the absence of spatial dispersion, $\epsilon_{\alpha\beta}$ depends only on ω , and the dispersion relation (56.4) is therefore algebraic with respect to $\mathbf{k}$. Expansion of the determinant gives by a simple calculation ||

$$A(kc/\omega)^4 + B(kc/\omega)^2 + C = 0. \quad (56.5)$$

where

$$A = \epsilon_{\alpha\beta} k_\alpha k_\beta / k^2 = \epsilon_1 \sin^2 \theta + \epsilon_l \cos^2 \theta \equiv \epsilon^2 \quad (56.6)$$

$$B = -\epsilon_1 \epsilon_l (1 + \cos^2 \theta) - (\epsilon_1^2 - g^2) \sin^2 \theta \quad (56.7)$$

$$C = \epsilon_l (\epsilon_1^2 - g^2) \quad (56.8)$$

and θ is the angle between $\mathbf{k}$ and $\mathbf{B}_0$. For given values of ω and θ , equation (56.5)

¹⁺The variable magnetic field $\mathbf{B}$ of the wave is not to be confused with the constant field $\mathbf{B}_0$. ‡ Called in crystal optics the Fresnel equation.

§Electromagnetic waves in a magnetoactive cold plasma were first studied (the role of ions being neglected) by E. V. Appleton (1928) and H. Lassen (1927).

¹¹ In which it is convenient to take one of the coordinate planes, say xz , to pass through $\mathbf{B}_0$ and $\mathbf{k}$.

yields two values of k^2 , so that in general two types of wave can propagate in the plasma. †

Let us first consider the cases of wave propagation exactly along ($\theta = 0$) and exactly across ($\theta = \frac{1}{2}\pi$) the magnetic field. These have special features.

When $\theta = 0$, the roots of the dispersion relation are

$$\left(\frac{kc}{\omega}\right)^2 = \epsilon_{\perp} \pm g = 1 - \frac{\Omega_e^2}{\omega(\omega \pm \omega_{Be})} - \frac{\Omega_i^2}{\omega(\omega \mp \omega_{Bi})}. \quad (56.9)$$

It is easy to see from (56.3) that these waves are transverse ($E_2 = 0$) and circularly polarized ($E_y/E_x = \mp i$). The infinity of (56.9) at $\omega = \omega_{Be}$ or $\omega = \omega_{Bi}$ corresponds to resonance: the frequency and direction of rotation of the vector $\mathbf{E}$ coincide with those of the Larmor rotation of the electrons or ions. Figure 17 shows, as an

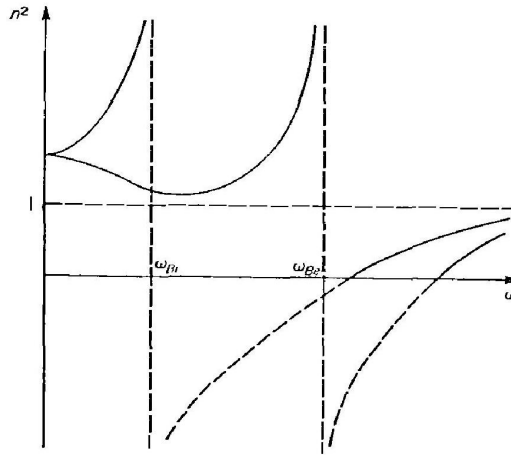


Fig. 17.

illustration, the approximate variation of $n^2 = (ck/\omega)^2$ with ω . As $\omega \rightarrow 0$, the values of n^2 tend to the limit $1 + \Omega_i^2/\omega_{Bi}^2 = 1 + c^2/u_A^2$, where ω_{Bi} is neglected in comparison with ω_{Be} ; u_A is defined by (56.18) below. The propagation of undamped waves corresponds, of course, only to those parts of the curves (shown by continuous lines in Fig. 17) for which $n^2 > 0$.

When $\theta = 0$, equation (56.5) is satisfied also if $\epsilon_{\parallel} = 0$, corresponding to ordinary longitudinal plasma waves whose frequency $\omega \approx \Omega_e$ is independent of k .

When $\theta = \frac{1}{2}\pi$, the two roots of the dispersion relation are

$$(ck/\omega)^2 = \epsilon_{\parallel}, \quad (ck/\omega)^2 = \epsilon_1 - g^2/\epsilon_1. \quad (56.10)$$

The first corresponds to a wave with dispersion relation independent of $\mathbf{B}_0$:

$$\omega^2 \approx c^2 k^2 + \Omega_e^2$$

This is a transverse wave ($E \perp k$) and is linearly polarized, with $E \parallel B_0$. The second root (56.10) corresponds to a wave with $\mathbf{E} \perp \mathbf{B}_0$ and having both longitudinal and transverse components relative to k . If the frequency is so high that the ion contribution to $\epsilon_{\alpha\beta}$ is negligible, namely $\omega \gg (\omega_{Be}\omega_{Bi})^{1/2}$, the condition (52.15), then in this wave †

$$\left(\frac{ck}{\omega}\right)^2 = 1 - \frac{\Omega_e^2(\omega^2 - \Omega_e^2)}{\omega^2(\omega^2 - \omega_{Be}^2 - \Omega_e^2)} \quad (56.11)$$

† The waves concerned are usually distinguished as ordinary and extraordinary. These terms do not, however, mean the same thing here as in the optics of uniaxial crystals; neither of the waves behaves like a wave in an isotropic medium.

In the general case of any angle θ (not zero or $\frac{1}{2}\pi$), we note first of all that for each value there exist frequencies for which the coefficient A in (56.5) becomes zero:

$$\begin{aligned}\epsilon_1 &\equiv \epsilon_1 \sin^2 \theta + \epsilon_l \cos^2 \theta \\ &= 1 - \frac{\Omega_e^2 + \Omega_i^2}{\omega^2} \cos^2 \theta - \left[\frac{\Omega_e^2}{\omega^2 - \omega_{Be}^2} + \frac{\Omega_i^2}{\omega^2 - \omega_{Bi}^2} \right] \sin^2 \theta = 0.\end{aligned}\quad (56.12)$$

If the frequencies given by this equation, called the plasma resonance frequencies, are such as to satisfy also the "slowness" condition $\omega \ll k$, then from § 32 they correspond to longitudinal characteristic oscillations of the plasma. The vanishing of the coefficient of k^4 in equation (56.5), which is quadratic in k^2 , signifies that one of its roots becomes infinite; as $A \rightarrow 0$, the roots are $-C/B$ and $-B/A$.

Equation (56.12) is cubic in ω^2 and has three real roots. These are easily determined by using the fact that Ω_i/Ω_e and ω_{Bi}/ω_{Be} are small. Two are found by neglecting the ion contribution in (56.12):

$$\omega_{1,2}^2 \approx \frac{1}{2} (\Omega_e^2 + \omega_{Be}^2) \pm \frac{1}{2} [(\Omega_e^2 + \omega_{Be}^2)^2 - 4\Omega_e^2 \omega_{Be}^2 \cos^2 \theta]^{1/2}. \quad (56.13)$$

The ions must, however, be taken into account in the range $\omega \approx \omega_{Bi}$ where the third root lies; for this root, we easily find

$$\omega_3^2 \approx \omega_{Bi}^2 (1 - (zm/M) \tan^2 \theta), \quad (56.14)$$

assuming that $\Omega_e \gg \omega_{Bi}$. Formulae (56.13) and (56.14) for $\omega_2(\theta)$ and $\omega_3(\theta)$ are inapplicable when θ is so close to $\frac{1}{2}\pi$ that $\cos \theta \ll m/M$. In this range,

$$\left. \begin{aligned}\omega_2^2 &\equiv \omega_{2h}^2 = \omega_{Be}^2 (\Omega_i^2 + \omega_{Bi}^2) / (\Omega_e^2 + \omega_{Be}^2), \\ \omega_3^2 &= \Omega_e^2 \omega_{Bi}^2 \cos^2 \theta / (\Omega_e^2 + \omega_{Be}^2).\end{aligned} \right\} \quad (56.15)$$

The role of the ions is not negligible for either ω_3 or ω_2 .

Figure 18 shows diagrammatically the dependence of the frequencies $\omega_1, \omega_2, \omega_3$ on the angle θ .[†] The curves of $\omega_1(\theta)$ and $\omega_2(\theta)$ nowhere intersect. They respectively begin at $\theta = 0$ from the higher and lower of the frequencies Ω_e and ω_{Be} . At $\theta = \frac{1}{2}\pi$, they reach the respective values

$$\omega_{1h} = (\Omega_e^2 + \omega_{Be}^2)^{1/2} \quad (56.16)$$

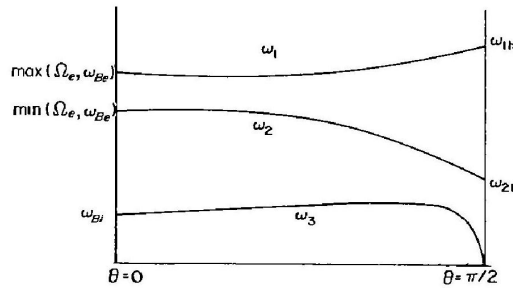


Fig. 18.

and ω_{2h} . The frequencies ω_{1h} and ω_{2h} are called respectively the upper and lower hybrid frequencies. When $\Omega_e^2 \gg \omega_{Be}^2$ (and so certainly $\Omega_i^2 \gg \omega_{Bi}^2$), $\omega_{2h} = (\omega_{Be} \omega_{Bi})^{1/2}$.

[†] Plasma oscillations in which the ions play no part are called high-frequency oscillations, and those in which the influence of the ions is important are called low-frequency oscillations.

The position of the frequencies $\omega_1, \omega_2, \omega_3$ largely determines the configuration of the various branches of the spectrum governed by the dispersion relation (56.5). Being quadratic in $(ck/\omega)^2$, it has two roots for given ω and θ . If we follow the variation and the infinities of these roots as functions of ω for a fixed θ , we easily obtain Fig. 19, which shows the functions diagrammatically. The points of intersection with the abscissa

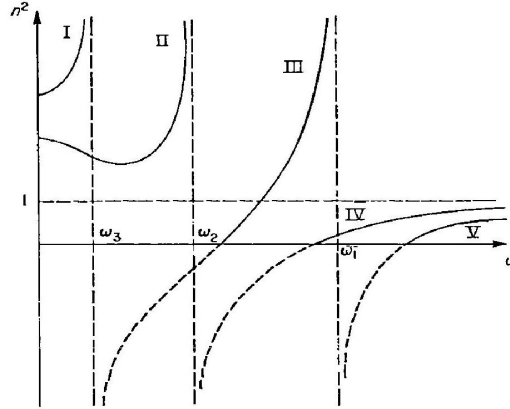


Fig. 19.

axis are given by $C = 0$, i.e. $\epsilon_{\parallel} = 0$ or $\epsilon_{\perp}^2 = g^2$. Their position is independent of θ , and one of them, corresponding to $\epsilon_{\parallel} = 0$, is always $\omega \approx \Omega_e$.

The spectrum of characteristic oscillations for a magnetoactive cold plasma thus has a total of five branches. Two of these (I and II in Fig. 19) reach the low-frequency oscillation region; the limiting values (as $\omega \rightarrow 0$) of the phase velocity in these branches are

$$\left. \begin{aligned} (\omega/k)_1 &= u_A |\cos \theta| / (1 + u_A^2/c^2)^{1/2} \\ (\omega/k)_{11} &= u_A / (1 + u_A^2/c^2)^{1/2} \end{aligned} \right\} \quad (56.17)$$

where

$$u_A = c\omega_{Bi}/\Omega_i = B_0/(4\pi N_i M)^{1/2} \quad (56.18)$$

is called the Alfvén velocity. The expressions (56.17) are easily found from (56.5) by using the limiting values

$$\epsilon_{\perp} \approx 1 + u_A^2/c^2, \quad \epsilon_{\parallel} \approx -\Omega_e^2/\omega^2, \quad g \sim \omega.$$

When $u_A \ll c$, the phase velocities (56.17) are respectively $u_A |\cos \theta|$ and u_A . These limiting values correspond to waves which exist in a cold plasma in accordance with the ordinary equations of magnetic fluid dynamics (see ECM, §52); the spectrum of hydromagnetic waves has three branches, in all of which $\omega(k)$ is linear but in general depends on the direction of k :

$$\left. \begin{aligned} (\omega/k)_A^2 &= u_A^2 \cos^2 \theta \\ (\omega/k)_f^2 &= \frac{1}{2} \left\{ u_s^2 + u_A^2 + [(u_s^2 + u_A^2)^2 - 4u_s^2 u_A^2 \cos^2 \theta]^{1/2} \right\} \\ (\omega/k)_s^2 &= \frac{1}{2} \left\{ u_s^2 + u_A^2 - [(u_s^2 + u_A^2)^2 - 4u_s^2 u_A^2 \cos^2 \theta]^{1/2} \right\} \end{aligned} \right\} \quad (56.19)$$

where u_s is the speed of sound calculated formally from the adiabatic compressibility of the medium. The phase velocity of the first branch, called Alfvén waves, is exactly the same as the

¹† It may be noted immediately that oscillations with the frequency ω_3 exist in practice only in a narrow range of angles close to $\frac{1}{2}\pi$. At other angles, they are strongly damped by the cyclotron absorption at simple ion resonance.

limiting value for the first branch (56.17). In order to go to the limit of a cold plasma in the second formula, we must put $\mathbf{n}_s = 0$, since in a gas $u_s \sim (T/M)^{1/2}$. Then $(\omega/k)_f$, corresponding to fast magnetosonic waves, is equal to the limiting value of $(\omega/k)_H$. The third branch, with $(\omega/k)_s$ (slow magnetosonic waves), has a velocity which tends to zero as $u_s \rightarrow 0$, and therefore does not appear in a cold plasma. The assumption of a cold plasma enables us to neglect the thermal spread of ion velocities and to describe them in terms of fluid mechanics even in the absence of collisions. The condition $u_A \ll c$ justifies neglecting the displacement currents in the equations of magnetic fluid dynamics.

In the opposite case of high frequencies, the phase velocities of two branches (IV and V) tend to $\omega/k = c$, corresponding to transverse high-frequency waves in an isotropic plasma, as we should expect, since the magnetic field plays no part when $\omega \gg \omega_{Be}$ —

Lastly, let us consider the interesting case of waves which can exist when $\Omega_e \gg \omega_{Be}$; the resonance frequency is then $\omega_2 \approx \omega_{Be} \cos \theta$. We shall take the frequency range intermediate (on branch II) between ω_2 and $\omega_3 \approx \omega_{Bi}$, defined by

$$\omega_{Bi} \ll \omega \ll \omega_{Be} \cos \theta, \quad \omega < \Omega_e^2 / \omega_{Be}. \quad (56.20)$$

The condition $\omega \gg \omega_{1i}$ enables the ion contribution to g to be neglected, and from the condition $\omega \ll \omega_{Be}$ we have

$$\epsilon_{xy} = ig = -i\Omega_e^2 / \omega \omega_{Be}. \quad (56.21)$$

With the conditions (56.20), we also have $\epsilon_{\parallel} \gg g \gg \epsilon_1$.

The required solution of the dispersion relation is found more directly by writing the latter as

$$\left| k^2 \epsilon_{\alpha\beta}^{-1} - k_\alpha k_\gamma \epsilon_{\gamma\beta}^{-1} - (\omega^2/c^2) \delta_{\alpha\beta} \right| = 0, \quad (56.22)$$

changing from the tensor $\epsilon_{u\beta}$ in (56.4) to its inverse (i.e. expressing $\mathbf{E}$ in terms of $\mathbf{D}$ in equations (57.3)). The components of the inverse tensor are

$$\epsilon_{xx}^{-1} = \epsilon_{yy}^{-1} \approx -\epsilon_1/g^2, \quad \epsilon_{zz}^{-1} = 1/\epsilon_{il}, \quad \epsilon_{xy}^{-1} = -\epsilon_{yx}^{-1} \approx i/g.$$

and the largest of these is ϵ_{xy}^{-1} . Neglecting the other components, and taking the xz -plane to be that of $\mathbf{B}_0$ and $\mathbf{k}$, we obtain the dispersion relation

$$\begin{vmatrix} -\omega^2/c^2 & ik_z^2/g \\ -ik^2/g & -\omega^2/c^2 \end{vmatrix} = 0,$$

whence

$$\begin{aligned} \omega &= k^2 c^2 (\omega_{Rl}/\Omega_e^2) |\cos \theta| \\ &= c B_0 |\cos \theta| k^2 / 4\pi e N_e \end{aligned} \quad (56.23)$$

These are called helicon waves ;† they are of purely electron origin.

The name of these waves arises from the nature of their polarization. The equation $\mathbf{k} \cdot \mathbf{D} = 0$ (56.2) gives, with the above choice of coordinate axes,

$$D_x \sin \theta + D_z \cos \theta = 0. \quad (56.24)$$

From equations (56.3) written as

$$\left[k^2 \epsilon_{\alpha\beta}^{-1} - k_\alpha k_\gamma \epsilon_{\gamma\beta}^{-1} \right] D_\beta = (\omega^2/c^2) D_\alpha, \quad (56.25)$$

we find $D_x = -i|\cos\theta|D_y$. In the same approximation (i.e. retaining only ϵ^{-1}_{xy} among all the $\epsilon^{-1}_{\alpha\beta}$), the electric field of the wave lies entirely in the xy plane, which is perpendicular to $\mathbf{B}_0$: $E_z = \epsilon^{-1}_{z\beta}D_\beta = 0$. The other field components are

$$E_x = \epsilon^{-1}_{xy}D_y, \quad E_y = \epsilon^{-1}_{yx}D_x = -\epsilon^{-1}_{xy}D_x,$$

and from (56.24)

$$E_y = i|\cos\theta|E_x \quad (56.26)$$

Thus the wave is elliptically polarized in the plane perpendicular to $\mathbf{B}_0$; when $0 = \frac{1}{2}\pi$, the polarization becomes linear. In coordinates $\xi y \zeta$ with the ζ -axis parallel to $\mathbf{k}$.

$$E_\xi = -i\frac{|\cos\theta|}{\cos\theta}E_y, \quad E_\zeta = E_\xi \tan\theta \quad (56.27)$$

The vector $\mathbf{E}$ describes a circular cone about the direction of $\mathbf{k}$.

The expression (56.21) for ϵ_{xy} has a simple physical significance. When $\omega_{Be} \gg \omega$, together with the condition (52.17) $k_1 v_{Te}/\omega_{Be} = k_1 r_{Be} \ll 1$, which is everywhere assumed satisfied, we can suppose that the transverse (relative to $\mathbf{B}_0$) motion of the electrons takes place in a constant and uniform field $\mathbf{E}$. When a charge moves in constant and uniform crossed fields $\mathbf{E}$ and $\mathbf{B}_0$, its mean transverse velocity (the electric drift velocity) is

$$\bar{\mathbf{v}}_1 = c\mathbf{E} \times \mathbf{B}_0/B_0^2; \quad (56.28)$$

see Fields, §22. This corresponds to (56.21). Thus helicon waves are associated with the electric drift of electrons in the plasma.

15.5.6 §57. Effect of thermal motion on electromagnetic wave propagation in magnetoactive plasmas

When the thermal motion of the particles is taken into account, the dispersion relation in general becomes transcendental, and yields an infinite number of branches of the function $\omega(\mathbf{k})$. The vast majority of these oscillations are, however, strongly damped. Only in exceptional cases is the damping so weak that the oscillations can be propagated as waves. These cases include, first of all, the waves considered in §56, for which the thermal motion causes (if the conditions (52.17) and (53.17) are satisfied) only small corrections to the dispersion relation, and a small Landau damping rate.

We have seen, however, that for waves in cold plasmas there are frequency ranges in which the ratio ck/ω becomes indefinitely large (the neighbourhoods of plasma resonances). But as $k \rightarrow \infty$ the conditions (52.17) are certainly violated, so that it becomes necessary to take account of the thermal motion. We shall now show that doing so, even as a small correction to the permittivity, eliminates the divergence of the roots of the dispersion relation, and generates some qualitatively new properties of the plasma oscillation spectrum (B. N. Gershman, 1956). As we shall see, the conditions for the Landau damping to be exponentially small may still be satisfied, so that the anti-Hermitian part of $\epsilon_{\alpha\beta}$ is still negligible. We shall take the particular case of the neighbourhood of high-frequency plasma resonances, where it is sufficient to include the thermal motion of the electrons only.

The correction terms in $\epsilon_{\alpha\beta}$ are proportional to $(kv_{Te})^2$. † Similar corrections arise in the coefficients A, B, C in the dispersion relation (56.5). To investigate just the

† They are derived from the first-order terms in the expansion of the integrand in (54.5) in powers of k^2 .

divergent root of this equation, it is sufficient to include the correction terms in the coefficient A only, which vanishes at the resonance point in the absence of the corrections.

In the neighbourhood of the resonance frequency ω_1 (say), we write this coefficient as

$$A = a_r (\omega - \omega_1) - A_{1r} (v_{Te} k / \omega_1)^2 \quad (57.1)$$

The second term is the correction due to the thermal motion. The coefficients a_r and A_{1r} are taken at the point $\omega = \omega_1$, so that they are independent of the variable ω (but of course depend on the direction of k , i.e. on the angle θ). Putting $\omega = \omega_1$ also in the coefficients B and C , and denoting the resulting values by B_r and C_r , we obtain as the dispersion relation in the neighbourhood of the resonance frequency

$$\left[a_r (\omega - \omega_1) - A_{1r} (v_{Te}^2 / c^2) (kc / \omega_1)^2 \right] (kc / \omega_1)^4 + B_r (kc / \omega_1)^2 + C_r = 0. \quad (57.2)$$

We are concerned with the root of this equation which as $v_{Te} \rightarrow 0$ becomes

$$(kc / \omega_1)^2 \approx -B_r / a_r (\omega - \omega_1),$$

i.e.

$$\omega - \omega_1 = -B_r \omega_1^2 / a_r c^2 k^2 \quad (57.3)$$

Since $(kc / \omega_1)^2$ in this solution is large, the term C_r which does not contain the large quantity is to be omitted from (57.2) in finding the solution. Then we have the dispersion relation

$$\omega - \omega_1 = (A_{1r} / a_r) (kv_{Te} / \omega_1)^2 - (B_r / a_r) (\omega_1 / kc)^2 \quad (57.4)$$

Here two cases are to be distinguished according to the sign of A_{1r} (a_r and B_r are always positive). †

In Fig. 20, the continuous curve shows the dispersion relation (57.4) for $A_{1r} > 0$. The curve meets the abscissa axis at ‡

$$k^2 = (\omega_1^2 / cv_{Te}) \sqrt{B_r / A_{1r}} \quad (57.5)$$

As $v_{Te} \rightarrow 0$, this point moves to infinity on the right, and we come back to the curve corresponding to the dispersion relation (57.3) for a cold plasma (shown by the broken curve in Fig. 20).

The allowance for thermal motion thus causes the oscillation spectrum branch to be extended into the range $\omega > \omega_1$. In the limit of zero external field, it is this part of the branch which corresponds to ordinary longitudinal plasma oscillations: in the absence of the field, $B_r = 0$, the frequency ω_1 coincides with Ω_e , and the whole

curve of $\omega - \Omega_e$ as a function of k^2 becomes a straight line from the origin, whose equation is the same as (32.5). †

When thermal motion is neglected, the oscillations in plasma resonances are longitudinal. This property does not in general occur when spatial dispersion is taken into account: $A = \epsilon_{\alpha\beta} k_\alpha k_\beta / k^2 \equiv \epsilon_1$ becomes a function of k , and the condition $\epsilon_1 = 0$ for the oscillations to be longitudinal is incompatible with relation given by the dispersion relation between the same variables ω, k and θ . Both at the plasma resonance points themselves, which cease to be

^{1*} It is easily seen from (56.6) and (56.7) that B_r is positive: eliminating $\epsilon_{||}$ by means of the condition $A = 0$, we find $B_r = \epsilon_l^2 \tan^2 \theta + g^2 \sin^2 \theta > 0$. From the expressions (56.6) for A and (52.11) for ϵ_l and $\epsilon_{||}$ it follows that $\partial A / \partial \omega > 0$, and therefore $a_r = (\partial A / \partial \omega)_{\omega=\omega_1}$ is positive.

‡ For this value of k , the ratio kv_{Te} / ω_1 contains $(v_{Te} / c)^{1/2}$, and is therefore small. This is the above-mentioned condition for the Landau damping to be small.

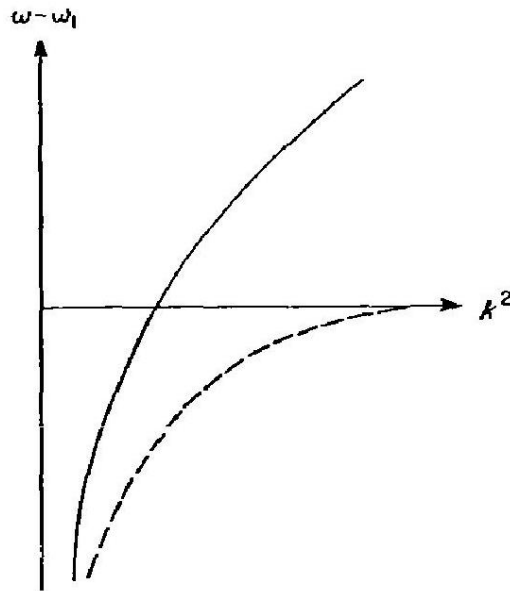


Fig. 20.

distinctive, and near them. the waves remain almost longitudinal, however: since A is small and the wave is slow (ω/kc is small), the transverse component $E^{(1)}$ is small in comparison with $E^{(1)}$, according to (32.10).

Let us now turn to the case $A_{1r} < 0$. Figure 21 shows how $\omega - \omega_1$ varies with k in

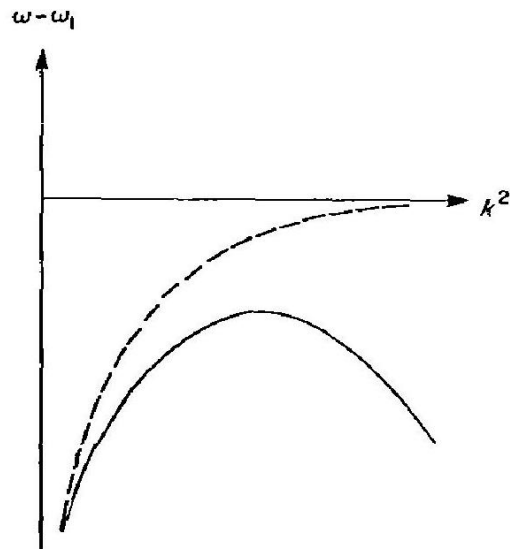


Fig. 21.

this case. The curve does not enter the region $\omega > \omega_1$, but has a maximum at the point

$$k^2 = (\omega_1^2/cv_{Te}) (B_r/|A_{1r}|)^{1/2}, \quad \omega - \omega_1 = (2v_{Te}/a_r c) (|A_{1r}|/B_r)^{1/2}. \quad (57.6)$$

¹† For this reason, the waves which (in a magnetoactive plasma) correspond to the upper part of the continuous curve in Fig. 20 are usually called plasma waves, in contrast to the ordinary or extraordinary waves corresponding to the lower part of the curve. This terminology is conventional, however: there is really just one branch of oscillations, whose point of intersection with the abscissa axis ($\omega = \omega_1$) has no distinctive feature.

When $vr_e \rightarrow 0$, this point moves to infinity on the right, at the same time approaching the abscissa axis, and we again return to the form (57.3).

As a further example, let us consider the transverse waves near electron cyclotron resonance, propagating along the magnetic field. When thermal motion is neglected, the dispersion relation for these waves is given by (56.9) with the lower signs, and in the neighbourhood of $\omega = \omega_{Be}$ †

$$\omega = \omega_{Be} (1 - \Omega_e^2/k^2 c^2) \quad (57.7)$$

with $kc \ll \Omega_e$; the whole of this spectrum is at $\omega < \omega_{Be}$.

To examine these waves with allowance for the thermal motion of the electrons, it is necessary to construct the dispersion relation with the permittivity tensor (55.7) which applies to the cyclotron resonance region. ‡ Expanding the determinant (56.4) (with the vector $\mathbf{k}$ parallel to the z -axis), we obtain

$$\frac{k^2 c^2}{\omega^2} = 1 + \frac{\Omega_e^2}{\omega (\omega - \omega_{Be})} F \left(\frac{\omega - \omega_{Be}}{\sqrt{2} k v_{Te}} \right) \quad (57.8)$$

Outside the resonance absorption line, i.e. for $|\omega_{Be} - \omega| \gg k v_{Te}$, but of course still $|\omega_{Be} - \omega| \ll \omega_{Be}$, this relation becomes

$$\frac{k^2 c^2}{\omega_{Be}^2} = -\frac{\Omega_e^2}{\omega_{Be} (\omega - \omega_{Be})} + i \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{\Omega_e^2}{\omega_{Be} k v_{Te}} \exp \left(-\frac{(\omega - \omega_{Be})^2}{2 k^2 v_{Te}^2} \right)$$

Hence we again have the dispersion relation (57.7) for the real part of the frequency, and the expression

$$\gamma = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \omega_{Be} \frac{\omega_{Be}}{k v_{Te}} \left(\frac{\Omega_e}{ck} \right)^4 \exp \left\{ -\frac{1}{2} \left(\frac{\Omega_e}{ck} \right)^4 \left(\frac{\omega_{Be}}{k v_{Te}} \right)^2 \right\} \quad (57.9)$$

for the Landau damping rate.

As ω approaches closer to ω_{Be} , in the range $|\omega_{Be} - \omega| \ll k v_{Te}$, the damping rate increases and becomes comparable with the frequency ω ; in this range, wave propagation does not occur.

15.5.7 §58. Equations of fluid dynamics in a magnetoactive plasma

If the characteristic spatial dimensions L in a moving plasma are large compared with the mean free paths,

$$L \gg l, \quad (58.1)$$

† We assume the particular case where not only $\omega_{Be} - \omega \leftarrow \omega_{Be}$ but also $\Omega_e > \omega_{Be}$, so that unity is certainly negligible on the right of (56.9).

‡ Formulae (55.7), it will be remembered. also presuppose the fulfilment of the condition (55.4): $\omega_{Be} \gg k v_{Te}$.

we may suppose that thermodynamic equilibrium with local values of the temperature (the same for electrons and ions), pressure, etc., is established by collisions in any small region of the plasma. The movement of the plasma may then be described by the macroscopic equations of fluid dynamics.

The equations of magnetic fluid dynamics have been given in *ECM*, 51, but it was assumed that the transport properties of the medium (viscosity and thermal conductivity) were independent of the magnetic field. For this to be true in a plasma, the following conditions are necessary:

$$\nu_i \gg \omega_{Bi}, \quad \nu_e \gg \omega_{Be}$$

(of which the second follows from the first). These conditions are often too rigorous, and it is therefore necessary to derive equations of fluid dynamics that are free from the restriction mentioned. †

The equation of continuity for the mass density ρ remains, of course, as usual:

$$\partial\rho/\partial t + \operatorname{div}(\rho V) = 0, \quad (58.2)$$

where V is the macroscopic velocity. The general form is also the same for the Navier-Stokes equation

$$\rho \left[\frac{\partial V_a}{\partial t} + (V \cdot \nabla) V_a \right] + \frac{\partial P}{\partial x_a} - \frac{1}{c} (\mathbf{j} \times \mathbf{B})_\alpha = - \frac{\partial \sigma'_{a\beta}}{\partial x_\beta} \quad (58.3)$$

and for the energy conservation equation

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{2} \rho V^2 + \rho U + B^2/8\pi \right) = - \operatorname{div} \left[\rho V \left(\frac{1}{2} V^2 + W \right) - \sigma' \cdot V + c E \times B/4\pi + q \right] \quad (58.4)$$

where $\sigma'_{\alpha\beta}$ is the viscous stress tensor, $\sigma' \cdot V$ denotes the vector with components $\sigma'_{\alpha\beta} V_\beta$, q is the energy flux (including both the dissipative part due to thermal conduction and thermoelectric effects, and the convective transfer of energy by the current; see the definition (58.8) below), and U and W the internal energy and heat function of the medium per unit mass. The tensor $\sigma'_{\alpha\beta}$ and the vector q must be expressed in terms of the gradients of thermodynamic quantities and the velocities; the form of these expressions depends on the magnetic field.

The following remark should be made in connection with equation (58.3). This equation takes into account the force exerted on the plasma by the magnetic field (the last term of the left), but not the force $e(zN_i - N_e) \mathbf{E}$ exerted by the electric field. This treatment is justifiable here, since it follows from the condition (58.1) that *a fortiori* $L \gg a$, and the plasma is therefore quasi-neutral, so that we can put $zN_i = N_e$, and there are no uncompensated charges in the plasma. ‡

Equations (58.2)-(58.4) must be supplemented by Maxwell's equations for a quasi-stationary electromagnetic field (the displacement current being then omitted):

$$\operatorname{curl} \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \quad \operatorname{div} \mathbf{B} = 0, \quad \operatorname{curl} \mathbf{B} = 4\pi \mathbf{j}/c. \quad (58.5)$$

To say the field is quasi-stationary means that its frequency of variation $\omega \ll c/L$. The electric field induced by the variable magnetic field is $E \sim \omega LB/c \ll B$; for this reason, we need include in (58.4) only the magnetic, and not the electric, field energy density. The neglect of the displacement current is, moreover, in accordance with the assumption that the plasma is quasi-neutral: the last equation (58.5) implies that $\operatorname{div} \mathbf{j} = 0$.

Lastly, the "generalized Ohm's law" equation is needed:

$$\mathbf{E} + \mathbf{V} \times \mathbf{B}/c = \mathbf{F}. \quad (58.6)$$

¹† Moreover, in ECM, §51, the terms representing the thermoelectric effect were omitted from the equations.

‡ This argument is based on the inequality $l \gg a$. We are everywhere considering a fully ionized plasma. In a partly ionized one, the inequality $l \geq a$ need not be satisfied, because the mean free path is reduced by collisions with neutral atoms, and then $l \gg a$ is to be regarded as a further necessary condition for the bulk electrical force to be negligible.

where $\mathbf{F}$ is some linear combination of the current $\mathbf{j}$ and the gradients of the thermodynamic quantities. The combination of $\mathbf{E}$ and $\mathbf{B}$ on the left of (58.6) arises (cf. ECM. §49) from the transformation of E when we go from the rest frame of a given volume element in the medium to a frame in which the element is moving with velocity $\mathbf{V}$.

In a quasi-neutral plasma, the relative concentration of the electron and ion components is a given constant ($N_e/N_i = z$). Hence only the temperature and the pressure are independent thermodynamic variables; the problem of expressing F and q in terms of the gradients of these variables (and the current j) is formally the same as in the theory of thermogalvanomagnetic effects in metals (see ECM, 25).[†]

The relations between $\mathbf{j}$ and $\mathbf{q}$, and between the field and the gradients of thermodynamic quantities, are written as generalizations of (44.12) and (44.13):

$$F_\alpha + \frac{1}{e} \frac{\partial \mu_e}{\partial x_\alpha} = \sigma_{\alpha\beta}^{-1} j_\beta + \alpha_{\alpha\beta} \frac{\partial T}{\partial x_\beta} \quad (58.7)$$

$$q_\alpha = -\frac{\mu_e}{e} j_\alpha + \beta_{\alpha\beta} j_\beta - \kappa_{\alpha\beta} \frac{\partial T}{\partial x_\beta} \quad (58.8)$$

Here μ_e is the chemical potential of the electrons; the tensors $\sigma'_{\alpha\beta}, \alpha_{\alpha\beta}, \beta_{\alpha\beta}$ depend on the magnetic field $\mathbf{B}$ as a parameter. The absence of the term $-\varphi \mathbf{j}$ (cf. (44.13)) on the left of (58.8) is due to the fact that this has already been included in (58.4) by means of the Poynting vector in the energy flux, as is easily seen by using Maxwell's equations (58.5) to transform its divergence. In the stationary case (§ 44), we have

$$-\operatorname{div} c\mathbf{E} \times \mathbf{B}/4\pi = \mathbf{j} \cdot \mathbf{E} = -\operatorname{div}(\varphi \mathbf{j}).$$

Thus the energy flux q in (58.8) already excludes the transfer of energy -ep by particles.

By Onsager's principle, the coefficients in the relations (58.7) and (58.8) satisfy the relations

$$\sigma_{\alpha\beta}(B) = \sigma_{\beta\alpha}(-B), \quad \kappa_{\alpha\beta}(B) = \kappa_{\beta\alpha}(-B), \quad (58.9)$$

$$\beta_{\mu\beta}(B) = T\alpha_{\beta\mu}(-B). \quad (58.10)$$

Since $\mathbf{B}$ is the only available vector parameter, the dependence of the tensors on the direction $\mathbf{b} = \mathbf{B}/B$ may be written in the general form

$$\alpha_{\alpha\beta}(B) = \alpha_1 \delta_{\alpha\beta} + \alpha_2 b_\alpha b_\beta + \alpha_3 \epsilon_{\alpha\beta\gamma} b_\gamma \quad (58.11)$$

and similarly for the other tensors; the scalar coefficients $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ are functions of the field B , satisfying the condition of symmetry under inversion (B is an axial vector and its components are unaffected by inversion, as is required for the components of the true tensors $\alpha_{\alpha\beta}$, etc.). Expressions of the form (58.11) necessarily satisfy the relations (58.9), and (58.10) becomes

$$\beta_{\alpha\beta}(B) = T\alpha_{\alpha\beta}(B) \quad (58.12)$$

In the practical application of the expressions (58.7) and (58.8) in magnetic fluid dynamics, the gradient of the chemical potential is more conveniently expressed in terms of the pressure and temperature gradients by

[†] We must repeat that the discussion refers to a fully ionized plasma. The presence of several types of heavy particle (various ions, neutral atoms) would make it necessary to consider the corresponding diffusion processes.

$$\nabla\mu_e = -s_e\nabla T + (1/N_e)\nabla P_e, \quad \mu_e = w_e - Ts_e,$$

where $P_e = N_e T = Pz/(1+z)$ is the partial pressure of electrons in the plasma, and s_e and w_e are the entropy and heat function per particle in the electron component of the plasma. We finally write (58.7) and (58.8) in vector form as

$$\begin{aligned} \mathbf{E} \perp \mathbf{V} \times \mathbf{B}/c + (1/eN_e)\nabla P_e \\ = \mathbf{j}_{\parallel}/\sigma_{\parallel} + \mathbf{j}_{\perp}/\sigma_{\perp} + \mathcal{R}\mathbf{B} \times \mathbf{j} + \alpha_{\parallel}(\nabla T)_{\parallel} + \alpha_{\perp}(\nabla T)_{\perp} + \mathcal{N}\mathcal{B} \times \nabla T \end{aligned} \quad (58.13)$$

$$\mathbf{q} + (w_d/e)\mathbf{j} = \alpha_{\parallel}T\mathbf{j}_{\parallel} + \alpha_{\perp}T\mathbf{j}_{\perp} + \mathcal{L}T\mathbf{B} \times \mathbf{j} - \kappa_{\parallel}(\nabla T)_{\parallel} - \kappa_{\perp}(\nabla T)_{\perp} + \mathcal{C}\mathbf{B} \times \nabla T \quad (58.14)$$

with a fresh notation for the coefficients (all of which are functions of $\mathbf{B}$), and the suffixes $\parallel$ and $\perp$ denoting vector components longitudinal and transverse with respect to $\mathbf{B}$. The definition of the coefficient $\alpha_{\parallel}$ in (58.13) differs from that in (58.7) by the inclusion of s_e/e . The coefficients $\mathcal{R}$, $\mathcal{N}$ and $\mathcal{L}$ represent the Hall, Nernst and Leduc-Righi effects. The terms $\mathcal{R}\mathbf{B} \times \mathbf{j}$ in (58.13) and $\mathcal{L}\mathbf{B} \times \nabla T$ in (58.14) are non-dissipative transport effects, which do not appear in the products $\mathbf{E} \cdot \mathbf{j}$ and $\mathbf{q} \cdot \nabla T$ and therefore do not cause an increase of entropy.

The general expression for the viscous stress tensor $\sigma'_{\alpha\beta}$ in terms of the gradients of the macroscopic velocity has already been given in §13. When applied to a plasma, this expression is somewhat simplified by the vanishing of the two second viscosity coefficients ζ and ζ_1 . The vanishing of ζ is a general property of monatomic gases such as plasmas. The reason for the absence of the ζ_1 term is explained in §59.

The remaining terms in (13.18) may conveniently be rearranged for application to a plasma, since in general the magnetic field there has a strong influence on the viscosity, not a weak one as in a neutral gas; there is therefore no sense in distinguishing the ordinary viscosity coefficient η . Here we put $\sigma'_{\alpha\beta}$ in a form differing from (13.18) only in that the η term is replaced by

$$\eta_0 (3b_{\alpha}b_{\beta} - \delta_{\alpha\beta}) \left(b_{\gamma}b_{\delta}V_{\gamma\delta} - \frac{1}{3}\text{div } V \right), \quad (58.15)$$

where (instead of $\mathbf{h})\mathbf{b} = \mathbf{B}/B$; see the penultimate footnote to § 59 regarding the desirability of this definition of η_0 .

If the z -axis is taken parallel to b , the stress tensor components are

$$\left. \begin{aligned} \sigma'_{xx} &= -\eta_0 \left(V_{zz} - \frac{1}{3}\text{div } V \right) + \eta_1 (V_{xx} - V_{yy}) + 2\eta_3 V_{xy}, \\ \sigma'_{yy} &= -\eta_0 \left(V_{zz} - \frac{1}{3}\text{div } V \right) + \eta_1 (V_{xx} - V_{yy}) - 2\eta_3 V_{xy}, \\ \sigma'_{zz} &= 2\eta_0 \left(V_{zz} - \frac{1}{3}\text{div } V \right), \\ \sigma'_{xy} &= 2\eta_1 V_{xy} - \eta_3 (V_{xx} - V_{yy}), \\ \sigma'_{xz} &= 2\eta_2 V_{xz} + 2\eta_4 V_{yz}, \\ \sigma'_{yz} &= 2\eta_2 V_{yz} - 2\eta_4 V_{xz}. \end{aligned} \right\} \quad (58.16)$$

15.5.8 §59. Transport coefficients of a plasma in a strong magnetic field

To calculate the transport coefficients of a magnetoactive plasma we must, as usual, seek the particle distribution functions in the form $f = f_0 + \delta f$, where δf is a small correction to the local-equilibrium distribution and is proportional to the corresponding gradient of the thermodynamic quantities. On substituting this expression in the transport equation, e.g. for electrons,

$$\frac{\partial f_e}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f_e}{\partial \mathbf{r}} - e\mathbf{E} \cdot \frac{\partial f_e}{\partial \mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{B} \cdot \frac{\partial f_e}{\partial \mathbf{p}} = C(f_e), \quad (59.1)$$

we put $f_e = f_{0e}$ in the four terms on the left; the fourth term then vanishes, since $\partial f_{0e}/\partial \mathbf{p}$ is parallel to $\mathbf{v}$, so that the term in δf_e must be retained there, and we find as the equation for δf_e [†]

$$\frac{\partial f_{0e}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f_{0e}}{\partial \mathbf{r}} - e\mathbf{E} \cdot \frac{\partial f_{0e}}{\partial \mathbf{p}} = \frac{e}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{B} \cdot \frac{\partial \delta f_e}{\partial \mathbf{p}} + I(\delta f_e), \quad (59.2)$$

where I is the linearized collision integral.

Let us note first of all that the longitudinal electrical conductivity σ_l and thermal conductivity $\kappa_{||}$ are independent of B , and have the same values as in the absence of a magnetic field, i.e. are the ordinary scalars σ and κ . It is obvious from symmetry that, when the vector $\mathbf{E}$ or ∇T is parallel to $\mathbf{B}$, the distribution function δf is independent of the position angle φ of the transverse velocity v_1 in the plane perpendicular to $\mathbf{B}$. Also, $\mathbf{v} \times \mathbf{B} \cdot \partial \delta f / \partial \mathbf{p} = -(B/m) \partial \delta f / \partial \varphi$, and so, when $\partial \delta f / \partial \varphi = 0$, the magnetic field does not appear in the transport equation.[†]

For a similar reason, the viscosity η_0 , which determines the viscous stresses $\sigma'_{\alpha\beta}$, is independent of the magnetic field (and therefore is the same as the ordinary viscosity η) when the velocity $\mathbf{V}$ is parallel to $\mathbf{B}$ (along the z -axis); it then depends only on z , and in the expressions (58.16) there remain only the terms in $\sigma'_{xx} = \sigma'_{yy} = -\frac{1}{2}\sigma'_{zz} = -\frac{2}{3}\eta_0 dV/dz$.

Lastly, the coefficient ζ_1 would have to be independent of the field. For the velocity distribution mentioned, it would contribute to the stress tensor $\sigma'_{xx} = \sigma'_{yy} = \frac{1}{2}\sigma'_{zz} = \zeta_1 dV/dz$. Since this effect is absent in the absence of the field, $\zeta_1 = 0$ even when the field is present.[‡] (Note that this reason does not depend on the plasma being classical; the result $\zeta_1 = 0$ is therefore valid in the relativistic case also, whereas $\zeta \neq 0$ in a relativistic plasma.)

The calculation of the other transport coefficients can be carried out similarly in the limit of strong magnetic fields, when (for each type of particle) the Larmor frequency $\omega_B \gg \nu$. Under these conditions, collisions function as a small correction.[§]

Electrical conductivity

Let us first calculate the coefficients which determine the electric current in the plasma. This is conveniently done in a frame of reference such that a given plasma volume element is at rest. Neglecting quantities $\sim m/M$, we can regard such a frame as coinciding with the rest frame of the ion component. The electric current is then purely electronic. We have therefore to solve only the transport equation for electrons.

The left-hand side of the transport equation would have to be transformed by means of the equations of fluid dynamics in the same way as was done for an ordinary gas in §6. In the chosen frame of reference, the macroscopic velocity (but not, of course, its derivatives) is zero at the point considered.||

There is, however, no need to carry out the complete calculations here (for electrons). First of all, the term $\partial \delta f_e / \partial t$ can be omitted altogether. The differentiation with respect to time leads to terms containing the derivatives $\partial T / \partial t, \partial P / \partial t$

^{††} In the calculation of the permittivity of a plasma in § 29, the magnetic-field term in this equation was omitted because it is a second-order small quantity when $\mathbf{E}$ and $\mathbf{B}$ are small. In the present problem, the magnetic field B (unlike the electric field E) is not assumed to be small.

^{††} We must at once add, however, that these arguments (and similar ones below) assume that the process of particle scattering is independent of the magnetic field. For this to be so, it is necessary that the field should satisfy the inequality (59.10) below.

[‡] We must again emphasize that all these statements depend on the form of the term in $\mathbf{B}$ in the transport equation (59.2); they therefore do not apply to an ordinary gas, whose molecules have a magnetic moment

and $\partial V/\partial t$. Of these, the first two can be expressed in terms of the scalar $\text{div } \mathbf{V}$ (cf. (6.16)), and such terms, as we know, cancel in any case for a monatomic gas (such as a plasma). The derivative $\partial V/\partial t$, expressed by means of the equation (58.3) of fluid dynamics, contains a factor $1/\rho$, or $1/M$; the inclusion of such terms in the transport equation would give only corrections $\sim m/M$, which are of no interest. Next, in (59.2) we can put $\mathbf{E} = \mathbf{0}$, since we know that $\mathbf{E}$ can appear in the required current $\mathbf{j}$ only as the sum $\mathbf{E} + (1/eN_e)\nabla P$. Lastly, since we do not propose to calculate the "longitudinal" transport coefficients $\sigma_{\parallel}, \kappa_{\parallel}, \eta_0$, which are independent of the magnetic field, all thermodynamic quantities for the plasma may be regarded as depending only on the coordinates in a plane perpendicular to $\mathbf{B}$. Denoting by $\Gamma_{\perp}$ the operator of differentiation in that plane, we can thus write the transport equation as

$$(\mathbf{v} \cdot \nabla_{\perp}) f_{0e} = (e/c)\mathbf{v} \times \mathbf{B} \cdot \partial \delta f_e / \partial \mathbf{p} + I(\delta f_e). \quad (59.3)$$

This equation in turn can be solved by successive approximation in powers of $1/\omega_{Be}$. The first approximation, denoted by the superscript (1), entirely neglects the collision integral, so that the equation is

$$\mathbf{v} \times \mathbf{b} \cdot \frac{\partial \delta f_e^{(1)}}{\partial v} = \frac{1}{\omega_{Be}} (\mathbf{v} \cdot \nabla_{\perp}) f_{0e}, \quad (59.4)$$

with $\mathbf{b} = \mathbf{B}/B$. The solution is

$$\delta f_e^{(1)} = -\frac{1}{\omega_{Be}} v \cdot \mathbf{b} \times \nabla_{\perp} f_{0e}, \quad (59.5)$$

as is easily seen by direct substitution. It is evident that this solution can be used to calculate only the non-dissipative transport coefficients: in the absence of collisions, there is no dissipation of energy.

The electric current density is given by the integral

$$\mathbf{j} = -e \int \mathbf{v} \delta f_e d^3p \quad (59.6)$$

Substitution of (59.5) gives

$$\begin{aligned} \mathbf{j}^{(1)} &= (mc/B) (\mathbf{b} \times \nabla_{\perp} \cdot \langle \mathbf{v} \mathbf{v} \rangle) N_e \\ &= (mc/3B) \mathbf{b} \times \nabla_{\perp} N_e \langle v^2 \rangle, \end{aligned}$$

where the averaging is over the Maxwellian distribution. The result is

$$\mathbf{j}^{(1)} = (c/B) \mathbf{b} \times \nabla_{\perp} P_e, \quad \nabla_{\perp} P_e = -(B/c) \mathbf{b} \times \mathbf{j}^{(1)}. \quad (59.7)$$

Comparison of this expression with the definition of the coefficient $\mathcal{R}$ in (58.13) shows that

$$\mathcal{R} = -1/N_e e c. \quad (59.8)$$

In the next approximation, we seek the solution of equation (59.3) as $\delta f_e = \delta f_e^{(1)} + \delta f_e^{(2)}$, and obtain for $\delta f_e^{(2)}$ the equation

through which (not through the particle charge as in a plasma) the interaction with the magnetic field takes place in that case.

§The transport coefficients for a magnetoactive plasma were calculated by R. Landshoff (1949), E. S. Fradkin (1951) and S. I. Braginskii (1952). The analytical method given below is due to I.E. Tamm (1951).

||This has essentially been assumed already by making use of the parallelism of the vectors $\partial f_0/\partial \mathbf{p}$ and $\mathbf{v}$.

$$\begin{aligned}\omega_{Be} v \times \mathbf{b} \cdot \partial \delta f_e^2 / \partial v &= -I \left(\delta f_e^{(1)} \right) \\ &= (1/\omega_{Be}) I (v \cdot \mathbf{b} \times \nabla_1 f_{0e});\end{aligned}\quad (59.9)$$

the operator ∇_1 cannot be taken outside I , since in the linearized collision integral the integrand contains among its coefficients quantities such as N_1 which depend on the coordinates.

As already mentioned, the magnetic field is assumed so strong that $\omega_{Be} \gg \nu_e$. In this section, however, we shall make the further assumption that

$$r_{Be} = v_{Te}/\omega_{Be} \gg a_e, \quad (59.10)$$

i.e. that $\omega_{Be} \ll \Omega_e$; this places an upper limit on the field. When this condition is satisfied, the field causes almost no curvature of the electron trajectories (and still less of the ion trajectories) in the collision region, and so has no effect on the collision process. The operator I therefore does not depend explicitly on the field. Then, by symmetry, the right-hand side of equation (59.9) must have a vector structure of the form $\mathbf{v} \cdot \mathbf{b} \times \nabla_\perp \varphi(v^2)$; as regards the variable $\mathbf{v}$, this is of the same kind as on the right of (59.4), but with $\mathbf{b} \times \nabla_\perp$ in place of $\nabla_\perp$. The solution of (59.9) is therefore

$$\delta f_e^{(2)} = -\frac{1}{\omega_{Be}^2} I (\mathbf{v} \cdot \mathbf{b} \times (\mathbf{b} \times \nabla_1) f_{0e}) = \frac{1}{\omega_{Be}^2} I (\mathbf{v} \cdot \nabla_1 f_{0e}). \quad (59.11)$$

In the calculation of the current, a non-zero contribution comes only from ei collisions: since, under the conditions assumed, collisions are a small effect, the contributions to the conductivity from ee and ei collisions may be considered separately, and this means, for example, that contribution from ee collisions is calculated from the distribution function obtained by solving the transport equation with only this collision integral on the right, as if the electrons did not collide with the ions at all. In that case, the integral $\int v \delta f_e^{(2)} d^3p$ with $\delta f_e^{(2)}$ in the form (59.11) is zero, because the law of conservation of momentum in collisions with any distribution function f_e gives identically

$$\int v C_{ee}(f_e) d^3p = 0$$

cf. §5.

Thus, in calculating the electric current, I in (59.11) is to be taken as the electron-ion collision integral. Then [‡]

$$I_{ei}(v \cdot \nabla_\perp f_{0e}) = -\nu_{ei}(v) (v \cdot \nabla_\perp) f_{0e} \quad (59.12)$$

where, from (44.3),

$$\nu_{ei}(v) = 4\pi z e^4 N_e L_e l m^2 v^3$$

The contribution to the current from the distribution function (59.11), (59.12) is

$$\begin{aligned}\mathbf{j}^{(2)} &= \frac{e N_e}{3\omega_{Be}^2} \nabla_\perp (v^2 \nu_{ei}(v)) \\ &= \frac{4\sqrt{(2\pi)} z e^5 L_e N_e}{3m^{3/2} \omega_{Be}^2} \nabla_\perp (P_e/T^{3/2})\end{aligned}\quad (59.13)$$

[‡] Cf. (44.1). A formula of this type for $C(f)$ is valid if collisions take place with particles which may be regarded as immovable and if δf has the form $\mathbf{v} \cdot \mathbf{A} g(v)$, with $\mathbf{A}$ a constant vector. In the present case, $\mathbf{A}$ is represented by the vector operator ∇_1 .

To calculate the required transport coefficients, we must substitute the current $\mathbf{j}_1 = \mathbf{j}^{(1)} + \mathbf{j}^{(2)}$ in equation (58.13):

$$\frac{1}{eN_c} \nabla_{\perp} \mathbf{P}_e = \frac{\mathbf{j}_1}{\sigma_{\perp}} + \mathcal{R} B \mathbf{b} \times \mathbf{j}_1 + \alpha_1 \nabla_{\perp} T + \mathcal{N} B \mathbf{b} \times \nabla_1 T \quad (59.14)$$

which determines these coefficients. First of all putting $\nabla T = 0$ and collecting terms of order $1/\omega_{Be}$, we find that

$$\mathbf{j}^{(1)}/\sigma_1 + \mathcal{R} B \mathbf{b} \times \mathbf{j}^{(2)} = 0$$

whence

$$\sigma_{\perp} = 3\pi^{1/2} e^2 N_e / 2^{1/2} m \nu_{ci}, \quad (59.15)$$

where ν_{ei} (without argument) denotes

$$\nu_{ei} = \nu_{ei}(v_{Te}) = 4\pi z e^4 L_e N_e / m^{1/2} T^{3/2}. \quad (59.16)$$

The quantity (59.15) is of the same order as the conductivity (43.8) in the absence of the field, which here is equal to $\sigma_{\parallel}$.

Similarly, putting $\nabla P_e = 0$ in (59.14) and collecting terms $-1/\omega_{Be}$, we find

$$\mathcal{R} B \mathbf{b} \times \mathbf{j}^{(2)} + \mathcal{N} B \mathbf{b} \times \nabla T = 0$$

whence

$$\mathcal{N} = -\nu_{ei} / (2\pi)^{1/2} m c \omega_{Be}^2 = -3c N_e / 2\sigma_1 B^2. \quad (59.17)$$

The coefficient $\alpha_{\perp}$ appears only in the next approximation with respect to $1/\omega_{Be}$; its value for $z = 1$ is

$$\alpha_{\perp} = 0.36 (\nu_{ei} / \omega_{Be})^2. \quad (59.18)$$

Electronic thermal conductivity

The heat flux in the plasma consists of electronic and ionic parts; let us first consider the former. It is calculated as

$$\mathbf{q}_e = \frac{1}{2} m \int v^2 \mathbf{v} \delta f_e d^3 p \quad (59.19)$$

In the first approximation with respect to $1/\omega_{Be}$, substitution of (59.5) gives

$$\begin{aligned} \mathbf{q}_e^{(1)} &= - (m/2\omega_{Be}) (\mathbf{b} \times \nabla_1 \cdot (\mathbf{v}) \mathbf{v} v^2) N_e \\ &= - (m/6\omega_{Be}) \mathbf{b} \times \nabla_1 N_e (v^4) \end{aligned}$$

whence

$$\begin{aligned} \mathbf{q}_e^{(1)} &= -(5c/2eB) \mathbf{b} \times \nabla_{\perp} P_e T \\ &= - (w_e/e) \mathbf{j}^{(1)} - (5cP_e/2eB) \mathbf{b} \times \nabla_{\perp} T \end{aligned} \quad (59.20)$$

where $w_e = 5T/2$ is the electronic heat function per electron. Comparison with the definition of the coefficient $\mathcal{L}$ in (58.14) shows that

$$\mathcal{L}_e = -5c N_e T / 2e B^2 \quad (59.21)$$

In the next approximation, the integral (59.19) is to be calculated with the distribution function (59.11). However, both ei and ee collisions contribute to the heat flux. For the former, we again use (59.11) and (59.12), obtaining

$$\mathbf{q}_e^{(ei)} = - (mN_e/6\omega_{Be}^2) \nabla_{\perp} \langle v^4 v_{ei}(v) \rangle,$$

whence

$$\mathbf{q}_e^{(ei)} = - \frac{4\sqrt{(2\pi)}}{3} \frac{ze^4 N_e L_c}{m^{3/2} \omega_{Be}^2} \nabla_{\perp} (P_e/\sqrt{T}) \quad (59.22)$$

To find from this the corresponding part of the thermal conductivity κ_1 , however, we must also use the condition $\mathbf{j} = \mathbf{j}^{(1)} + \mathbf{j}^{(2)} = 0$, since by (58.14) $\kappa_{\perp}$ is defined in terms of the heat flux in the absence of a current. With (59.7) and (59.13), we find that this condition leads to the following relation between the pressure and temperature gradients:

$$(c/B)\mathbf{b} \times \nabla_1 P_e = \frac{eN_e \nu_e}{\sqrt{(2\pi)m\omega_{Be}^2}} \nabla_1 T$$

in the calculations, we everywhere neglect terms above the second order in $1/\omega_{Be}$. Using this relation to calculate the sum $\mathbf{q}_e^{(1)} + \mathbf{q}_e^{(e)}$, we find

$$\kappa_{\perp e}^{(e)} = \frac{13}{6\sqrt{(2\pi)}} \frac{N_e T \nu_{e1}}{m\omega_{Be}^2} \quad (59.23)$$

This formula has a simple physical significance. In order of magnitude, the thermal conductivity must be $\kappa_{\perp} \sim C_e D_{\perp}$, where $C_e \sim N_e$ is the specific heat of the electrons per unit volume, and D_1 the electron diffusion coefficient across the magnetic field. The latter in turn is estimated as $\langle (\Delta x)^2 \rangle / \delta t$, where $\langle (\Delta x)^2 \rangle$ is the mean square displacement in the time δt . In a magnetic field, the transverse displacement is due only to collisions, and the electron moves a distance $-r_{Be}$. Hence $D_1 \sim \nu_{ei} r_{Be}^2$, which leads to (59.23).

Let us now deal with the contribution from ee collisions. The calculations here are more laborious, and we shall only outline them.

In (59.11), I is now to be understood as the linearized Landau collision integral:

$$I_{ec}(\delta f_e) = -\text{div}_p s^{(ec)},$$

where

$$s_{\alpha}^{(ee)} = 2\pi e^4 L_e \int \frac{w^2 \delta_{\alpha\beta} - w_{\alpha} w_{\beta}}{w^3} \left\{ f_{0e} \frac{\partial \delta f'_e}{\partial p'_{\beta}} + \delta f_e \frac{\partial f'_{0e}}{\partial p'_{\beta}} - f'_{0e} \frac{\partial \delta f_e}{\partial p_{\beta}} - \delta f'_e \frac{\partial f_{0e}}{\partial p_{\beta}} \right\} d^3 p' \quad (59.24)$$

and $\mathbf{w} = \mathbf{v} - \mathbf{v}'$. The integral (59.19) with this distribution function becomes, on integrating by parts,

$$\mathbf{q}_e^{(ee)} = (1/2\omega_{Be}^2) \int \left\{ v^2 \mathbf{s}^{(ee)} + 2\mathbf{v} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{s}^{(ee)}) \right\} d^3 p \quad (59.25)$$

The coefficient here is written so that δf_e in (59.24) is to be taken as $(\mathbf{v} \cdot \nabla_1) f_{0e}$. The differentiation $\nabla_{\perp}$ need only be applied to the temperature T in the exponent of the Maxwellian function f_{0e} :

$$(v \cdot \nabla_1) f_{0e} \rightarrow f_{0e} (mv^2/2T^2) v \cdot \nabla_1 T$$

the terms arising from differentiation of the coefficient of the exponential cancel. † After a simple though fairly lengthy calculation, the integral (59.25) is brought to the form $-\kappa_{\perp e}^{(ee)} \nabla_{\perp} T$, where ‡

$$\kappa_{\perp e}^{(ee)} = \frac{\pi L_e e^4}{3T^2 \omega_{Be}^2} \int \left\{ wV^2 + \frac{(w \cdot V)^2}{w} + \dots \right\} f_{0e}(p) f_{0e}(p') d^3p d^3p'$$

$\mathbf{w} = \mathbf{v} - \mathbf{v}'$, $\mathbf{V} = \frac{1}{2}(\mathbf{v} + \mathbf{v}')$, and the dots in the braces stand for terms containing odd powers of $w \cdot V$, which vanish on integration. Noting that

$$f_{0e}(p) f_{0e}(p') \propto \exp(-mV^2/T - mw^2/4T),$$

and carrying out the integration over $d^3p d^3p'$, we have finally

$$\kappa_{\perp e}^{(ee)} = \frac{2}{3\sqrt{\pi}} \frac{N_e T \nu_{ee}}{m \omega_{Be}^2} \quad (59.26)$$

where

$$\nu_{ee} = 4\pi e^4 N_e L_e / m^{1/2} T^{3/2}. \quad (59.27)$$

Thus the total electronic contribution to the transverse thermal conductivity is

$$K_{1e} = \frac{2N_e T \nu_{ee}}{3\sqrt{\pi} m \omega_{Be}^2} \left(1 + \frac{13}{4}z\right). \quad (59.28)$$

Ionic thermal conductivity

First of all, note that the condition $\omega_{Bi} \gg \nu_{in}$ for the approximation under consideration to be applicable to ii collisions is stronger than for electrons. Since $\nu_{ii} \sim \nu_{ef}(m/M)^{1/2}$, and $\omega_{Bi} \sim \omega_{Be}m/M$, it follows from $\omega_{Bi} \gg \nu_{ii}$ that $\omega_{Be} \gg \nu_{ee}(M/m)^{1/2}$, which is stronger than $\omega_{Be} \gg \nu_{ee}$; the condition $r_{Bi} \gg a$ is certainly satisfied, being weaker than (59.10).

The transport equation for ions is analogous to (59.2):

$$\frac{\partial f_{0i}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f_{0i}}{\partial \mathbf{r}} + ze\mathbf{E} \cdot \frac{\partial f_{0i}}{\partial \mathbf{p}} = -\frac{ze}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{B} \cdot \frac{\partial \delta f_i}{\partial \mathbf{p}} + I(\delta f_i). \quad (59.29)$$

As regards the transformation of the left-hand side, however, there is a difference from the electronic case. Substituting

$$f_{0i} = \frac{N_i}{(2\pi TM)^{3/2}} \exp\{-M(v - V)^2/2T\}$$

we must now differentiate V with respect to t (and then again assume that the frame of reference is so chosen that $V = 0$). With $V = 0$ we have from the equation of motion in fluid dynamics

$$\frac{\partial V}{\partial t} = -\frac{1}{\rho} \nabla P + \frac{1}{\rho c} \mathbf{j} \times B,$$

where the pressure $P = P_e + P_i$ and the density $\rho = N_i M$. The transport equation then becomes

¹⁷ This is evident from the general property noted in §6: the collision integral for like particles is zero for functions of the form $v f_i$.

‡The pressure gradient does not appear here, and so there is no need to eliminate it by means of the condition $\mathbf{j} = 0$.

$$\mathbf{v} \cdot \nabla_{\perp} f_{0i} - \frac{f_{0i}}{N_i T} \mathbf{v} \cdot \left(\nabla_{\perp} P - \frac{1}{c} \mathbf{j} \times \mathbf{B} \right) = -\frac{ze}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{B} \cdot \frac{\partial \delta f_i}{\partial \mathbf{p}} + I(\delta f_i), \quad (59.30)$$

where we have again, as in (59.3), put $E = 0$ and written ∇_1 in place of $\nabla \cdot \dagger$. We can solve equation (59.30) by successive approximation with respect to $1/\omega_{Bi}$. In the first approximation we have, analogously to (59.5),

$$\delta f_i^{(1)} = \frac{1}{\omega_{Bi}} \mathbf{v} \cdot \mathbf{b} \times \left(\nabla_1 f_{0i} - \frac{f_{0i}}{N_i T} \nabla_1 P + \frac{f_{0i}}{c N_i T} \mathbf{j} \times \mathbf{B} \right).$$

In this approximation, from (59.7), $\nabla_1 P_e = \mathbf{j} \times \mathbf{B}/c$, whence

$$\delta f_i^{(1)} = \frac{1}{\omega_{Bi}} \mathbf{v} \cdot \mathbf{b} \times \left(\nabla_{\perp} f_{0i} - \frac{f_{0i}}{P_i} \nabla_{\perp} P_i \right). \quad (59.31)$$

This distribution function gives, of course, no contribution to the current, $\int \delta f_i^{(1)} \mathbf{v} d^3 p = 0$, as we should expect in a frame of reference where the ionic component of the plasma is at rest. The heat flux is then

$$\begin{aligned} \mathbf{q}_i^{(1)} &= \frac{1}{2} M \int v^2 \mathbf{v} \delta f_i^{(1)} d^3 p \\ &= (M/6\omega_{Bi}) \mathbf{b} \times [\nabla_{\perp} (N_i (v^4)) - ((v^4)/T) \nabla_{\perp} P_i] \\ &= (5cP_i/2zeB) \mathbf{B} \times \nabla T \end{aligned}$$

whence

$$\mathcal{L}_i = 5cN_i T/2zeB^2 = -\mathcal{L}_e l z^2 \quad (59.32)$$

To calculate the heat flux in the next approximation, only ii collisions are important: ei collisions make a contribution that is smaller by a factor $\sim (m/M)^{1/2}$, because the ion momentum change in collisions with electrons is small. The calculations are exactly similar to those given above for ee collisions. $\dagger$ The ionic part of the thermal conductivity is therefore obtained from (59.26) on replacing the electronic quantities by ionic ones:

$$\kappa_{\perp i} = 2N_i T v_{ii}/3 \vee \pi M \omega_{Bi}^2, \quad v_{ii} = 4\pi z^2 e^4 L_i N_i / M^{1/2} T^{3/2} \quad (59.33)$$

A comparison of (59.33) and (59.23) shows that (when $z = 1$) $\kappa_{\perp i} \rightarrow \kappa_{\perp e} (M/m)^{1/2}$. Thus, in fields so strong that $\omega_{Bi} \gg \nu_{in}$, the transverse thermal conductivity is almost entirely ionic. The electronic conductivity becomes comparable when $\omega_{Bi} \sim (m/M)^{1/4} \nu_{ii}$; in making the comparison, it is to be taken into account that in such fields the effect of the magnetic field on κ_1 is negligible. In still weaker fields, the ionic contribution to κ_1 becomes unimportant; in that case, if $\omega_{Be} \gg \nu_{ee}$, $\kappa_{\perp}$ is given by (59.28).

Viscosity

The momentum of a moving plasma is concentrated mainly in the ions, and the viscosity is therefore determined by the ion distribution function. Since collisions between an ion and electrons do not greatly change its momentum, only ion-ion collisions need be taken into account in the transport equation.

The left-hand side of the transport equation (59.29) is transformed in the same way as in §§6 and 8, and takes the same form as there. $\ddagger$ Thus the transport equation for the viscosity problem is

^{1†} For electrons, the second term on the left would contain not M/ρ but $m/\rho = m/MN$, thus being negligible.

$$(M/T)v_\alpha v_\beta \left(V_{u\beta} - \frac{1}{3}\delta_{\alpha\beta} \operatorname{div} V \right) f_{0i} = -(ze/cM)\mathbf{v} \times \mathbf{B} \cdot \partial \delta f_i / \partial \mathbf{v} + I_{ii}(\delta f_i). \quad (59.34)$$

The solution of this equation is to be sought in the form

$$\delta f_i = \sum_{n=0}^4 g_n(v^2) V_{\gamma\delta}^{(n)} v_\gamma v_\delta \quad (59.35)$$

† The term in ∇P_1 which distinguishes (59.31) from (59.5) is unimportant here: this part of the distribution function is $\alpha \nabla f_{0i}$, and has zero collision integral; cf, the last-but-one footnote.

‡ Here it must be noted that the plasma pressure $P = (N_i + N_e)T = N_i(l+z)T$, and the heat capacity per ion is $3(1+z)/2$.

where the $V_{\gamma\delta}^{(n)}$ are linear combinations of the components of the tensor $V_{\alpha\beta}$, which appear in the expression

$$\sigma'_{\alpha\beta} = \sum_{n=1}^4 \eta_n V_{\alpha\beta}^{(n)} \quad (59.36)$$

for the viscous stress tensor, according to the definitions (13.18) and (58.15); it will be recalled that all the $V_{n\alpha}^{(n)} = 0$. The stress tensor is calculated as the integral

$$-\sigma'_{\alpha\beta} = \int M v_\alpha v_\beta \delta f_i d^3p$$

Substituting (59.35), averaging over the direction of v by means of the formula

$$\langle v_\alpha v_\beta v_\gamma v_\delta \rangle = \frac{1}{15} v^4 (\delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\delta} + \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta} + \delta_{\alpha\delta} \delta_{\beta\gamma})$$

and comparing with (59.36), we find

$$\eta_n = -(2M/15) \int v^4 g_n(v^2) d^3p \quad (59.37)$$

The equations which determine the functions g_n are obtained by substituting (59.35) in (59.34) and equating the coefficients of the various tensors $V_{\alpha\beta}^{(n)}$ on the two sides of the equation. We shall omit the details of these fairly laborious calculations, and give only the final results.

Non-zero viscosity coefficients η_3 and η_4 arise even when the collision integral is neglected, and are therefore proportional to $1/\omega_{mi}$. The coefficients η_1 and η_2 arise only in the next approximation, when collisions are taken into account, and are therefore proportional to $1/\omega_{Bi}^2$:

†

$$\left. \begin{aligned} \eta_1 &= \frac{1}{4}\eta_2 = 2\pi^{1/2}(ze)^4 L_1 N_1^2 / 5(MT)^{1/2} \omega_{Bi}^2, \\ \eta_3 &= \frac{1}{2}\eta_4 = N_1 T / 2\omega_{Bi}. \end{aligned} \right\} \quad (59.38)$$

Lastly, it may be noted that all the expressions derived in this section for the "transverse" transport coefficients remain meaningful even under conditions less stringent than the general formula (58.1). It is easy to see that the correction to the distribution function is small provided that the characteristic dimensions of the problem are large in comparison with the Larmor radius r_B of the corresponding particles; this ensures that the above expressions are applicable. The condition is sufficient also for the applicability of the equations of fluid dynamics themselves, if the pressure and temperature gradients are everywhere transverse to the magnetic field.

In this discussion, we have everywhere considered a plasma in which the electron and ion temperatures are equal. However, "two-temperature" conditions

often arise, because of the large mass difference between electrons and ions. In such a case, we can again formulate equations of the fluid dynamics type, and calculate the transport coefficients that occur in them. †

PROBLEM

A plasma inhomogeneous in the x -direction is confined by a magnetic field in the z -direction. With the condition $\omega_{Re} \gg \nu_{ei}$, determine the density and magnetic field distributions in the plasma, assuming the temperature distribution given (I.E. Tamm 1951).

Solution. The gradients of the temperature T and the pressure P are in the x -direction, and so is the electric field $\mathbf{E}$ (a potential field in the stationary case) which results from the inhomogeneity of the plasma. The confinement signifies that there is no movement of the plasma or electric current in the x -direction: $\dot{v}_x = 0, j_x = 0$.

Using these results and Maxwell's equation $\text{curl } B = 4\pi j/c$, we obtain by taking the y -component of (58.13)

$$(c/4\pi)dB/dx = -j, = N_\sigma, BdT/dx.$$

Substitution of (59.17) for N_{σ_1} gives

$$\frac{d}{dx} \left(\frac{B^2}{8\pi} \right) = -\frac{3}{2} N_e \frac{dT}{dx} \quad (1)$$

The magnetic field is "expelled" from the hotter parts of the plasma.

By taking the x -component of (58.3) and neglecting the viscosity terms which make a contribution of a higher order of smallness in $1/B$, we obtain a second equation.

$$d(P_e + P_i)/dx = j, B/c,$$

which by means of the same Maxwell's equation can be converted (when $z = 1$) to

$$2N_e T + B^2/8\pi = \text{constant}. \quad (2)$$

Equation (1) may be put in a more convenient form by eliminating the magnetic field by means of equation (2). After integration, we have

$$N_e T^{1/4} = \text{constanl}. \quad (3)$$

The formulac (2) and (3) give the solution. The temperature distribution comes from the equation of thermal conduction.

15.5.9 §60. The drift approximation

In examining the transport coefficients of a plasma in a strong magnetic field (§59), we used the Landau collision integral, which assumes the inequality $r_{Be} \gg a$ (59.10). We shall now show how this limitation may be removed, i.e. how formulae may be obtained which are suitable even for fields so strong that the opposite inequality holds for electrons;

$$r_{Be} \ll a. \quad (60.1)$$

^{1†} The suitability of defining the viscosity η_0 for a magnetoactive plasma as in (58.15) is due to the fact that all the other coefficients η then tend to zero as $B \rightarrow \infty$.

Here it is convenient to make use of a particular approximation called the drift approximation, made in the transport equation itself and not only in the solving of

it. The drift approximation is valid if the magnetic and electric fields vary sufficiently slowly in space and time: the field frequency ω and the effective collision frequency ν must be small in comparison with the Larmor frequency, and the characteristic distance $1/k$ over which the fields vary must be large compared with the Larmor radius. These conditions must be satisfied for each type of particle to which the drift approximation is applied. In the present section, we shall write all formulae for the particular case of electrons; the corresponding formulae for ions are obtained, as usual, by making the changes $e \rightarrow -ze$, $\omega_{Be} \rightarrow -\omega_{Bi}$, $m \rightarrow M$. Thus we shall assume that

$$\omega, \nu_{ei} \ll \omega_{Be}, \quad 1/k \gg r_{Be}. \quad (60.2)$$

The method in question is based on approximately solving the equations of motion of charged particles in specified fields $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ and $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$, taking account of the slowness of variation of these with t and r . The motion of particles in such fields is a combination of a rapid rotation (with frequency ω_{Be}) in circular Larmor orbits and a slow movement of the guiding centres, i.e. the centres of these orbits. The method of solution is to separate the rapidly oscillating component of the motion and average over it.

The position vector and the velocity of the electron may be written as

$$\mathbf{r} = \mathbf{R}(t) + \boldsymbol{\zeta}(t), \quad \mathbf{v} = \mathbf{V} + \dot{\boldsymbol{\zeta}}, \quad \mathbf{V} = \dot{\mathbf{R}} \quad (60.3)$$

where $\mathbf{R}$ is the position vector of the guiding centre, and $\boldsymbol{\zeta}$ the oscillatory position vector of the electron relative to it. [†] In the zero-order approximation, where the space and time variations of the field, and collisions, are entirely neglected, we have simply a motion in crossed uniform and constant fields $\mathbf{E}$ and $\mathbf{B}$. As we know (see Fields, §22), the vector $\boldsymbol{\zeta}$ in this case is exactly in the plane perpendicular to $\mathbf{B}$, and rotates in that plane with a constant angular velocity $\omega_{Be} = eB/mc$, remaining constant in magnitude. The radius $|\boldsymbol{\zeta}|$ of the circle is related to the constant speed $|\dot{\boldsymbol{\zeta}}| \equiv v_1$ by $|\boldsymbol{\zeta}| = v_1/\omega_{Be}$; the vector relation between $\boldsymbol{\zeta}$ and $\dot{\boldsymbol{\zeta}}$ is

$$\boldsymbol{\zeta} = -\mathbf{b} \times \dot{\boldsymbol{\zeta}}/\omega_{Be}, \quad (60.4)$$

where $\mathbf{b} = \mathbf{B}/B$. The centre of the orbit moves with velocity

$$\dot{\mathbf{R}} = \mathbf{V}_0 = v_{0\parallel} \mathbf{b} + \mathbf{w}_0,$$

where $v_{0\parallel}$ is the speed of the uniformly accelerated motion along the magnetic field, which satisfies the equation

$$m\dot{v}_{0\parallel} = -e\mathbf{b} \cdot \mathbf{E} \quad (60.5)$$

and

$$\mathbf{w}_0 = \dot{\mathbf{R}}_1 = (c/B)\mathbf{E} \times \mathbf{b} \quad (60.6)$$

is the electric drift velocity in the plane perpendicular to $\mathbf{B}$.[‡]

From now on, we shall use this approximation, neglecting terms arising from the non-constancy of the fields $\mathbf{E}$ and $\mathbf{B}$, i.e. shall regard these fields as constant. Accordingly, the suffix 0 will be omitted from all quantities.

^{††} This topic is dealt with by S. I. Braginskii, Transport processes in a plasma. Reviews of Plasma Physics II, 205, Consultants Bureau. New York, 1965.

^{††} The quantity $\mathbf{V}$ in this section is not to be confused with the macroscopic velocity denoted by $\mathbf{V}$ in 859.

[‡] Here we assume, of course, that $E/B \ll 1$, so that $w \ll c$ and relativistic effects may be neglected.

The essence of the drift approximation is to change, in the transport equation, to the slowly varying quantities $\mathbf{R}$, v_l and $v_l = |\dot{S}|$. These together constitute five independent variables in the distribution function.

The phase volume element in the new variables is

$$\begin{aligned} d^3x d^3p &= d^3R \cdot 2\pi m^3 dv_l \cdot v_l dv_l \\ &= 2\pi m^3 d^3R dv_l dJ \end{aligned} \quad (60.7)$$

where the quantity

$$J = \frac{1}{2} v_l^2 \quad (60.8)$$

will be convenient later. As regards the derivation of (60.7) it must be remembered that in the approximation used the fields may be regarded as constant.

The electron current density can be expressed in terms of the new variables. For one electron, the current density is $-ev\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_e)$, where $\mathbf{r}$ denotes variable coordinates in space, and $\mathbf{r}_e$ the position of the electron. Putting $\mathbf{v} = \mathbf{V} + \dot{\zeta}$ and $\mathbf{r}_e = \mathbf{R} + \zeta$, we write

$$-ev\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_e) \approx -e(\mathbf{V} + \dot{\zeta}) [\delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}) - \zeta \cdot \nabla_r (\mathbf{r} - \mathbf{R})].$$

We average this expression over the angle of rotation by means of the obvious relation

$$\omega_{Be} \langle \dot{\zeta}_a (\mathbf{b} \times \zeta)_\beta \rangle = \langle \dot{\zeta}_a \dot{\zeta}_\beta \rangle = \frac{1}{2} v_\perp^2 \delta_{\alpha\beta},$$

where α and β are two-dimensional vector suffixes in the plane perpendicular to the magnetic field. The result is

$$-e\mathbf{V}\delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}) + (mcI/B)\mathbf{b} \times \nabla_r \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R})$$

Multiplying this by the electron distribution function f_e and integrating over $d^3p = 2\pi m^3 dv_\parallel dJ$, we find the current density in R-space: †

$$\mathbf{j}_e = -e \int \mathbf{V} f_e d^3p - (mc/B) \text{curl} \left(\mathbf{b} \int I f_e d^3p \right) \quad (60.9)$$

The first term here corresponds to charge transfer with the moving Larmor orbits; the second term takes account of the rotation of particles in these orbits, ‡ and has a simple physical significance: if it is written as $\mathbf{c} \text{curl} \mathbf{M}$, the vector

$$\mathbf{M} = -(m\mathbf{b}/B) \int f_e J d^3p \quad (60.10)$$

is the magnetization of the plasma due to the rotation of the charges. The magnetic moment (60.10) is independent of the sign of the charges and is in the direction opposite to the magnetic field, i.e. corresponds to diamagnetism.

Let us now transform the transport equation to the new variables. Since the distribution function f_e relates to the same element of phase space as before, which is simply put in the different form (60.7), the transport equation again has the form $df_e/dt = C(f_e)$, or, expanding the left-hand side in terms of the new variables,

†+With integration by parts in the second term, which transfers the operator ∇_r to bfe-

‡ A similar averaging of the charge density $-e\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_e)$ gives the usual expression $-e \int f_e d^3p$: correction terms due to the rotation of the particles would appear here only when second-order small quantities (second derivatives with respect to the coordinates) were taken into account.

$$\frac{\partial f_e}{\partial t} + v_l \frac{\partial f_e}{\partial R_l} + \frac{c}{B} \mathbf{E} \times \mathbf{b} \cdot \frac{\partial f_e}{\partial \mathbf{R}_1} = C(f_e) \quad (60.11)$$

where we have used an obvious notation for the components of the vectors, and taken account of (60.5) and (60.6). In this approximation there is no term in $\dot{v}_1$, since v_1 does not vary during the drift.

Next, let us express the collision integral in terms of the drift variables. † Note first of all that a collision in these variables is an "instantaneous" change in the velocities $v_{\parallel}$ and v_1 and the components R_1 , perpendicular to the magnetic field, of the position vector of the guiding centre. The parallel component $R_{\parallel}$ is almost equal to the corresponding coordinate of the particle itself, and is unchanged in the collision.

Collisions occur only between particles which pass at impact parameters ρ not exceeding the screening length a : $\rho \leq a$. If ρ is much less than the Larmor radii of the colliding particles, the magnetic field has no effect on the scattering process, since at such distances the field causes no appreciable curvature of the particle trajectories. It is not natural to describe such collisions in terms of the drift variables. The use of the collision integral expressed with these variables is therefore appropriate only when for at least one of the colliding particles $r_B \ll a$.

In a Coulomb interaction of particles, with or without a magnetic field present, distant collisions, and accordingly small changes in all the variables, are important. The derivation of the collision integral in $\mathbf{p}$ -space given in §41 therefore remains valid in the space of the variables $R_{\perp} = (X, Y), v_{\parallel}, J$ (with the z -axis along the magnetic field), if we now replace the momentum components by the four variables $g_k \{X, Y, v_{\parallel}, J\}$ and take $\Delta g_1, \Delta g_2, \dots$ to be the changes in these variables in collisions.

The collision integral is again brought to the form

$$\begin{aligned} C(f) &= - \sum_{k=1}^4 \partial s_k / \partial g_k \\ &= -\partial s_{\perp} / \partial R_{\perp} - \partial s_{\parallel} / \partial v_{\parallel} - \partial s_J / \partial J \end{aligned} \quad (60.12)$$

(the flux $s_{\perp}$ has, by definition, components only in the plane perpendicular to $\mathbf{B}$). Here it is important that the volume element in the space of the variables g_k reduces simply to the product of their differentials; the collision integral is therefore an ordinary divergence. The proof given in §41 needs only slight

changes. First of all, in (41.2) we have used the fact that $\Delta \mathbf{p} \equiv \mathbf{q} = -\Delta \mathbf{p}'$, by the law of conservation of momentum. For the drift variables considered here, there is of course no such relation. Repeating the derivation without this assumption, we find for electron-ion collisions (for example)

$$s_k^{(ei)} = \sum_{l=1}^4 \frac{1}{2} \int \{ (\Delta g_{ek} \Delta g_{el}) f_i \partial f_e / \partial g_{el} + [\Delta g_{ek} \Delta g_{il}] f_e \partial f_i / \partial g_{il} \} d^3 p_i \quad (60.13)$$

where $d^3 p_i = 2\pi M^3 dJ_i dv_{i\parallel}$, the Δg_k are the changes in the quantities g_k in a collision, and the angle brackets denote averaging over collisions.

An important point in the derivation of (60.13) is the possibility of interchanging the initial and final states in the collision integral, after which the terms linear in Δg_k evidently cancel; this also allows the integration to be taken over all g -space. In §41 this transformation was effected by virtue of the symmetry under time reversal, which relates the probabilities of direct and

[†] This was done by E. M. Lifshitz (1937) for an electron gas, and the result was generalized to plasmas by S. T. Belyaev (1955).

reverse collisions. When a magnetic field is present, this symmetry exists only if the direction of the field $\mathbf{B}$ is reversed, and therefore relates the collision probabilities in essentially different fields. However, we shall see that in this case the symmetry under time reversal is restored by integration over impact parameters.

Lastly, in (60.13) we have used the fact that mutual scattering of Larmor orbits occurs only when they pass at distances not exceeding the screening length a . Assuming that the distribution function varies only slightly over such distances, we have put approximately $f_i(R_i, \nu_{il}, J_i) \approx f_i(R_e, \nu_{il}, J_i)$ and integrated over d^3R_i . This has left in (60.13) only the integration over d^3p_i ; the averaging over collisions includes integration over the positions R_i . In specific cases below, this averaging will be expressed by means of the appropriate scattering cross-section. Here we shall simply note that the mean values $\langle \Delta R_1 \Delta J \rangle, \langle \Delta R_1 \Delta v_{\parallel} \rangle$ are zero, as is seen from the fact that the products $\Delta X \Delta J, \Delta Y \Delta J$ (and the same with Δv_l in place of ΔJ) form a vector in the xy -plane. Since there are no preferred directions for the Larmor orbits in that plane, this vector must give zero on averaging.

An important property of the collision integral in the drift variables is that when it is included in the transport equation there is a change in the expression for the particle flux (in ordinary space) in terms of the distribution function. To see this, we write the transport equation as

$$\frac{\partial f_e}{\partial t} + \frac{\partial (V f_e)}{\partial R_{\perp}} + \frac{\partial}{\partial v_l} (v_l f_e) = -\frac{\partial s_{e\perp}}{\partial R_{\perp}} - \frac{\partial s_{el}}{\partial v_l} - \frac{\partial s_{eJ}}{\partial J}; \quad (60.14)$$

V can be taken under the differentiation, since B and E are assumed constant. Integration of this equation over d^3p gives

$$\partial N_e l \partial t + \text{div}_R \int (V f_e + s_{e1}) d^3p = 0, \quad N_e = \int f_e d^3p \quad (60.15)$$

where the suffix e to the electronic variables is omitted for brevity; N_e is the spatial number density of orbits, and the expression acted upon by div_R is therefore the flux of orbits. We see that the ordinary expression $\int V f_e d^3p$ is augmented by the collision term $\int s_{e1} d^3p$, which is essentially the diffusion flux transverse to the magnetic field. With this description, in contrast to the ordinary description of diffusion, it appears directly in the transport equation.

When these expressions are used we must, of course, take account of the fact that the electric current density is related to the flux of actual particles, not of orbits. According to (60.9), the flux of particles differs from the flux of orbits by a curl term which represents the magnetization. The final expression for the electron current density is therefore

$$\mathbf{j}_e = -e \int V f_e d^3p - (mc/B) \text{curl} \left(b \int f_e J d^3p \right) - \int e s_{e\perp} d^3p \quad (60.16)$$

The significance of the expression (60.13) can be appreciated only when the mean values in it have been evaluated. We shall show how this done for the case of the electron integral in electron-ion collisions.

The calculations are done in different ways in two ranges of values of the impact parameters ρ , specified by the inequalities

$$(I) \rho \ll r_{Be}, \quad (II) r_{Be} \ll \rho \ll a. \quad (60.17)$$

The integrations with respect to the parameter ρ will be logarithmic, as is usual for Coulomb scattering. With logarithmic accuracy, no distinction is necessary between strong ($\gg$) and weak ($>$) inequalities. The ranges (60.17) therefore cover essentially the whole variation of

the impact parameter; in accordance with (60.1), it is of course assumed that $r_{Be} \ll a$. For the existence of range I , it is also necessary that

$$r_{Be} \gg \rho_{\min} = ze^2/mv_{Te}^2, \quad (60.18)$$

where $\rho_{\min}$ is the impact parameter for which the scattering angle becomes ~ 1 ; we are here considering only the quasi-classical case $e^2/\hbar v_{Te} \gg 1$.

We shall also suppose that $r_{Bi} \gtrsim a$. Then, for all impact parameters $\rho \leq a$, the influence of the magnetic field on the motion of the ions (in a collision) is unimportant: the ion path is only slightly curved by the field at distances $\sim \rho$. We can neglect the ion recoil in the limit $m/M \rightarrow 0$, i.e. take as zero the changes in all the ion characteristics R_1, v_l, J . Then the second term in the braces in (60.13) vanishes, so that the electron-ion part of the electron current becomes

$$s_{\alpha}^{(ei)} = -\frac{1}{2} N_i \langle \Delta X_{\alpha} \Delta X_{\beta} \rangle^{(ei)} \partial f_e / \partial X_{\beta}. \quad (60.19)$$

The quantities $\langle \Delta X_a \Delta X_b \rangle$ form a spatial tensor transverse to the field, which we write in the explicitly transverse form

$$\langle \Delta X_{\alpha} \Delta X_{\beta} \rangle = \frac{1}{2} \langle (\Delta R_1)^2 \rangle (\delta_{\alpha\beta} - b_{\alpha} b_{\beta}); \quad (60.20)$$

the flux (60.19) then becomes

$$s^{(et)} = -\frac{1}{4} N_i \langle (\Delta R_1)^2 \rangle^{(et)} \nabla_1 f_e, \quad (60.21)$$

where $\Gamma = \Gamma_R - b(b \cdot \nabla_R)$ is the operator of differentiation in the directions transverse to b . The expressions for the "velocity fluxes" analogous to (60.19) are

$$\left. \begin{aligned} s_{\parallel}^{(e)} &= -\frac{1}{2} N_i \left\{ \langle (\Delta u)^2 \rangle^{(e)} \partial f_e / \partial v_i + \langle \Delta v_i \Delta I \rangle^{(ei)} \partial f_e / \partial J \right\}, \\ s_J^{(e)} &= -\frac{1}{2} N_i \left\{ \langle \Delta x \Delta J \rangle^{(e)} \partial f_e / \partial v_i + \langle (\Delta J)^2 \rangle^{(ei)} \partial f_e / \partial J \right\}. \end{aligned} \right\} \quad (60.22)$$

In equilibrium, i.e. for a Maxwellian distribution

$$f_e = \text{constant} \times \exp \left\{ -\frac{m}{T} \left(\frac{1}{2} v_i^2 + J \right) \right\}, \quad (60.23)$$

the collision integral must be zero. Substituting (60.23) in (60.22) and equating the fluxes to zero, we have

$$\langle \Delta v_l \Delta J \rangle^{(ei)} = -v_l \langle (\Delta v_l)^2 \rangle^{(ei)} = - (1/v_l) \langle (\Delta J)^2 \rangle^{(ei)}. \quad (60.24)$$

Let us first calculate the contribution from range I , where the magnetic field can be supposed not to influence the scattering process, since at such distances there is no appreciable curvature of the path for ions or electrons. The natural variable to describe the collision is then the ordinary momentum p of the electron, and the diff variables must be expressed in terms of this. According to (60.3), (60.7) and (60.8),

$$\mathbf{r} = \mathbf{R} - (1/m\omega_{Be}) \mathbf{b} \times \mathbf{p}_{\perp}, \quad v_{\parallel} = p_{\parallel}/m, \quad J = p_{\perp}^2/2m^2$$

Since the coordinates $\mathbf{r}$ of the particle, unlike the coordinates $\mathbf{R}$ of the orbit centre, are unaffected by the collision, we hence find

¹† This cannot be done if there are impact parameters such that $a \not\gg \rho \gg r_{Br}$. In such collisions, the ion drifts in the field of the electron, and its large mass does not take effect.

$$\Delta \mathbf{R}_+ = (1/m\omega_{Be}) \mathbf{b} \times \mathbf{q}_+, \quad \Delta v_1 = q_1/m, \quad \Delta J = (1/m^2) \mathbf{p}_- \cdot \mathbf{q}_1, \quad (60.25)$$

where q is the small change in the momentum p .

Denoting by the suffix I the contribution from this class of collisions, we now write

$$\langle (\Delta \mathbf{R}_-)^2 \rangle_1^{(i)} = \int (\Delta \mathbf{R}_\perp)^2 v d\sigma = (1/m^2 \omega_{Be}^2) \int q_\perp^2 v d\sigma \quad (60.26)$$

where $d\sigma$ is the cross-section for scattering of an electron by an ion at rest. With $d\sigma$ given by (41.6), the integration gives

$$\langle (\Delta \mathbf{R}_1)^2 \rangle_1^{(ei)} = \frac{8\pi z^2 e^4 L_1}{m^2 \omega_{Be}^2 v} \cdot \frac{1}{2} (1 + \cos^2 \theta) \quad (60.27)$$

where θ is the angle between $\mathbf{v}$ and $\mathbf{b}$, and

$$L_1 = \log (mr_{Be} v v_{re}^2 / z e^2) = \log (m v v_{re}^3 / z e^2 \omega_{Be}) \quad (60.28)$$

is the Coulomb logarithm cut off at a maximum impact parameter $\rho \sim r_{Be}$ (the upper limit of range I). Finally, expressing this result in terms of the drift variables, we have

$$\langle (\Delta \mathbf{R}_\perp)^2 \rangle_I^{(ei)} = \frac{8\pi z^2 e^2 c^2 L_I}{B^2} \frac{v_\parallel^2 + J}{(v_\parallel^2 + 2J)^{3/2}} \quad (60.29)$$

A similar calculation gives

$$\langle \Delta v_\parallel \Delta J \rangle_I^{(ei)} = -\frac{8\pi z^2 e^4 L_1}{m^2} \frac{J v_\parallel}{(v_\parallel^2 + 2J)^{3/2}} \quad (60.30)$$

and the remaining two quantities are determined from (60.24).

Let us now turn to range II. Here the drift variables are the natural ones, and the collision is described as a drift deflection of an orbit moving in the direction of $\mathbf{b}$ (the z -direction) in the Coulomb field of the ion at rest. The speed v_1 and therefore J are not changed by the drift; this in turn implies the conservation of $v_\parallel$, because of the conservation of energy in scattering by a heavy ion. Hence range II makes no contribution to the quantities (60.24).

The contribution to $\langle (\Delta \mathbf{R}_1)^2 \rangle$ is calculated as

$$\langle (\Delta \mathbf{R}_\perp)^2 \rangle^{(Ri)} = \langle (\Delta \mathbf{R}_\perp)^2 \rangle_{v_\parallel} \left| d\sigma = \int (\Delta \mathbf{R}_\perp)^2 \right|_{v_\parallel} d^2 \rho \quad (60.31)$$

where ρ is the position vector of the orbit centre (the value of R_1) before the collision. The change in R_1 as the orbit travels in a constant uniform magnetic field B and a constant electric field $E = ezR/R^3$ (the field of the ion) is determined by the drift equation

$$d\mathbf{R}_1/dt = (c/B) \mathbf{b} \times \mathbf{E} = (zec/B) \mathbf{b} \times \mathbf{R}_1 / (R_\parallel^2 + R_\perp^2)^{3/2}; \quad (60.32)$$

see (60.6). In the first approximation, we can put on the right of this equation $\mathbf{R}_\perp \approx \boldsymbol{\rho}$, $R_1 = v_\parallel t$. The total change in $R_\perp$ in a collision is found by integrating (60.32) with respect to t from $-\infty$ to ∞ , and is

$$\Delta \mathbf{R}_\perp = (2zec/B |v_\parallel|) \mathbf{b} \times \boldsymbol{\rho} / \rho^2 \quad (60.33)$$

Substituting this expression in (60.31) and carrying out the integration (with logarithmic accuracy, corresponding to the limits of range II), we find

$$\langle (\Delta \mathbf{R}_\perp)^2 \rangle_{\text{II}}^{(ei)} = 8\pi z^2 e^2 c^2 L_{\text{II}} / B^2 |v_\parallel|, \quad L_{\text{II}} = \log(a/r_{Be}) \quad (60.34)$$

The contributions (60.29) and (60.34) are in general of the same order of magnitude:

$$N_1 \langle (\Delta \mathbf{R}_\perp)^2 \rangle \sim \nu_{ei} r_{Be}^2$$

where ν_{ei} is the mean electron-ion collision frequency. The particular feature of (60.34) is that it becomes infinite as $v_\parallel \rightarrow 0$, whatever the value of $v_\perp$. The physical significance of this divergence is that when the speed $v_\parallel$ is small the orbit spends a long time in the field of the ion, during which the drift carries it to a great distance.

In reality, of course, formula (60.34) becomes invalid when v_d is small, for a variety of reasons: (1) if $r_{Bi} \gg a$, then for $|v_d| \ll v_{Ti}$ the ion can leave the electron during the collision time, and this mechanism cuts off the divergence at $|v_d| \sim v_{Ti}$; (2) in deriving the formula, it is always assumed that $|\Delta \mathbf{R}_1| \ll \rho$; (3) the orbit can leave the ion in question because of drift in the field of other particles (a three-body collision).

The above formulae solve the problem of constructing the transport equation in the drift approximation. In particular, it enables us to find the transport coefficients for the plasma in the first non-vanishing approximation with respect to $1/B$; see Problem 1.

Lastly, it has to be explained how the integration over $d^2\rho$ formally restores the symmetry under time reversal, as already utilized in writing (60.13). The loss of this symmetry is shown by the change in sign of the deflection $\Delta \mathbf{R}_\perp$ in (60.33) when the direction of $\mathbf{B}$ is reversed. The previous sign can be restored, however, by changing the sign of the integration variable, $\boldsymbol{\rho} \rightarrow -\boldsymbol{\rho}$, so that the change in the sign of $\mathbf{B}$ can have no effect in this approximation. (In range I, the magnetic field never affects the scattering process.)

PROBLEMS

Problem 1. In the drift approximation, determine the Hall coefficient $\mathcal{R}$ and the transverse conductivity $\sigma_\perp$ of the plasma (S. T. Belyaev. 1955).

Solomon. Considering a plasma with an electron density gradient (but with no electric field or temperature gradient), we assume the distribution function f_e . Maxwellian in (60.16) and (60.21), obtaining

$$\mathbf{j} = (cT/B)\mathbf{b} \times \nabla N_e + eD_1 \nabla_1 N_e$$

the transverse diffusion coefficient being

$$D = \frac{1}{4} N_e \overline{((\Delta \mathbf{R}_1)^2)},$$

where the bar denotes averaging over the Maxwellian distribution of the electrons. On comparing with the general expression (58.13), we find in the first approximation with respect to $1/B$ the previous expression (59.8) for $\mathcal{R}$. In the next approximation,

$$\sigma_\perp = T l e^2 N_e \mathcal{R} B^2 D. \quad (\text{I})$$

In range II (see (60.17)), we take $\langle (\Delta \mathbf{R}_1)^2 \rangle$ from (60.34). With logarithmic accuracy,

$$\begin{aligned} \overline{|v|^{-1}} &= (m/2\pi T)^{1/2} \int_{-\pi}^{\pi} \exp(-mv_1^2/2T) dv_1 / |v_1| \\ &\approx 2(m/2\pi T)^{1/2} \log(v_T/v_{\text{mm}}) \end{aligned}$$

where v_{mm} is determined by one of the mechanisms mentioned at the end of the section. For example, putting $v_{\text{min}} \sim v_{\text{ris}}$, we find

$$D_{\perp}^{11} = \left[(2\pi m)^{1/2} z^2 e^2 c^2 N / T^{1/2} B^2 \right] \log(M/m) \log(a/r_{Be}) \quad (2)$$

Similarly, taking $((\lambda R_1)^2)$ from (60.27), we find the contribution to the diffusion coefficient from range I :

$$D_1^1 = \left[4(2\pi m)^{1/2} z^2 e^2 c^2 N_l / 3T^{1/2} B^2 \right] \log(mv^3 T_e / ze^2 \omega_{Be}) . \quad (3)$$

If the inequality (59.10) opposite to (60.1) is assumed to be satisfied, then range 11 does not exist. and the logarithm in (3) is replaced by its ordinary Coulomb value (41.10). Then substitution of (3) in (1) gives formula (59.15) for a .

Problem 2. Determine the transverse diffusion coefficient D . for collisions between electrons and neutral atoms.

Solution. Because the electron-atom interaction is short-range, there is only range l , in which a is to be taken as the size of the atom. † Formula (60.26) also remains valid, but we must now substitute in it the cross-section for electron scattering by a neutral atom. After integration over angles, D is expressed in terms of the transport cross-section on for this scattering:

$$D_1 = \frac{1}{4} N_a \overline{(\Delta R_1)^2} = (N_n / 2\omega^2 B_e) \overline{e^3 v_t},$$

where N_a is the number density of atoms. With the cross-section σ_a independent of the electron speed, we have on averaging over the Maxwellian distribution

$$D = \frac{2}{3\sqrt{\pi}} \left(\frac{2\Gamma}{m} \right)^{3/2} \frac{N_u(\Omega)}{\omega_{uc}^2}$$

† There may be some doubt as to the applicability of the collision integral (60.12) for scattering by a short-range potential, which of course occurs with angles of the order of unity. It is easy to see. however. that in this problem only the change in position of the orbit centre, $\Delta R_1 \sim r_{Be}$, need be small in comparison with the characteristic distances over which the electron density varies; this corresponds to the condition for the equation of transverse diffusion to be applicable (cf. the end of §59).

15.6 VI Instability Theory by Landau

15.6.1 §61. Beam instability

ACCORDING to the results of §34, the amplitude of a perturbation with wave vector k in a homogeneous unbounded medium has the asymptotic form ($a, t \rightarrow x$)

$$e^{-i\omega(k)t}, \quad (61.1)$$

where $\omega(\mathbf{k})$ is the frequency of waves propagating in the medium. In particular, for longitudinal waves in a plasma the frequencies $\omega(\mathbf{k})$ are the roots of the equation †

$$\epsilon_l(\omega, \mathbf{k}) = 0. \quad (61.2)$$

The frequencies $\omega(k)$ are in general complex. If the imaginary part $\text{im } \omega \equiv -\gamma < 0$, the perturbation is damped in the course of time. If, however, $\gamma < 0$ in some range of k , such perturbations grow: the medium is unstable with respect to oscillations in that range of wavelengths, and $|\gamma|$ is then called the instability growth rate. We should emphasize immediately that, in referring to an "unlimited" increase of the perturbation, as $\exp(|\gamma|t)$, we are considering

here and subsequently only the behaviour in the linear approximation. In reality, of course, the increase is limited by non-linear effects.

In a collisionless plasma, the imaginary part of the frequency is due to Landau damping. The thermodynamic equilibrium state of the plasma, corresponding to the absolute maximum of the entropy, is stable with regard to any perturbation. However, it has already been noted in § 30 that, for non-equilibrium distributions in plasmas, the absorption of energy of the oscillations may be replaced by amplification. This is shown by the appearance of a range of values of the independent variables k and ω ($\omega > 0$) in which the imaginary part of the permittivity is negative: $\epsilon''_i(\omega, k) < 0$. It must be emphasized, however, that the existence of such ranges does not in itself necessarily signify that the plasma is unstable (at least in the linear approximation); some branch of the plasma oscillation spectrum must also actually fall in this range.

A typical instance of instability is afforded by a directed beam of electrons passing through a plasma at rest (A. I. Akhiezer and Ya. B. Faïnberg 1949, D. Bohm and E. P. Gross 1949). The beam is assumed to be electrically compensated:

the sum of the electron charge densities in the plasma and the beam is equal to the ion charge density in the plasma. The system is homogeneous and unbounded, i.e. both the beam and the plasma extend throughout space, and the directed velocity V of the beam is everywhere the same. We shall assume that V is non-relativistic.

Let us first suppose that both the beam and the plasma are cold, i.e. that the thermal motion of their particles is negligible. The necessary condition for this will be ascertained later.

In the electron oscillation frequency range, the longitudinal permittivity of the plasma-beam system has the form

$$\epsilon_l(\omega, \mathbf{k}) - 1 = -\frac{\Omega_e^2}{\omega^2} - \frac{\Omega_e'^2}{(\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{V})^2} \quad (61.3)$$

The first term on the right corresponds to the plasma at rest; $\Omega_e = (4\pi e^2 N_e/m)^{1/2}$ is the corresponding electron plasma frequency. The second term is due to the beam electrons. In a frame of reference K' moving with the beam, the contribution of the beam electrons to $\epsilon_t - 1$ is $-(\Omega_e'/\omega')^2$, where ω' is the oscillation frequency in that frame, and $\Omega_e' = (4\pi e^2 N_e'/m)^{1/2}$ (N_e' being the electron density in the beam). On return to the original frame K , the frequency ω' is replaced by

$$\omega' = \omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{V}, \quad (61.4)$$

and we have (61.3). †

We shall assume the beam density to be small, in the sense that

$$N_e' \ll N_e, \quad (61.5)$$

and so $\Omega_e' \ll \Omega_e$. Then the presence of the beam changes only slightly the principal branch of the spectrum of longitudinal oscillations of the plasma, i.e. the root of the dispersion relation $\epsilon_l = 0$ for which $\omega \approx \Omega_e$. As well as this branch, however, another branch appears, on account of the presence of the beam, which we have now to consider.

In order that the term with the small numerator $\Omega_e'^2$ should not disappear from the dispersion relation

$$\frac{\Omega_e^2}{\omega^2} + \frac{\Omega_e'^2}{(\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{V})^2} = 1 \quad (61.6)$$

† For an anisotropic plasma, this dispersion relation refers to quasi-longitudinal "slow" waves (see §32).

this smallness must be compensated by that of the denominator. We therefore seek the solution in the form $\omega = \mathbf{k} \cdot \mathbf{V} + \delta$, where δ is small. The equation then becomes

$$\frac{\Omega_e^2}{(\mathbf{k} \cdot \mathbf{V})^2} + \frac{\Omega_e'^2}{\delta^2} = 1, \quad (61.7)$$

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t = \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}' - (\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{V})t = \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}' - \omega' t$$

whence

$$\delta = \pm \frac{\Omega_e'}{\left[1 - (\Omega_e/\mathbf{k} \cdot \mathbf{V})^2\right]^{1/2}}; \quad (61.8)$$

the condition $\delta < \mathbf{k} \cdot \mathbf{V}$ requires that $|\mathbf{k} \cdot \mathbf{V}|$ should not be too close to Ω_e . The assumption that the plasma is cold implies that $kv_{Te} \ll \omega$, and in the present case therefore that $v_{Te} \ll V$: the speed of the beam is much greater than the thermal speed of the plasma electrons.

If $(\mathbf{k} \cdot \mathbf{V})^2 > \Omega_e^2$, then both roots (61.8) are real, and the oscillations do not grow. If, however,

$$(\mathbf{k} \cdot \mathbf{V})^2 < \Omega_e^2, \quad (61.9)$$

the two values of δ are imaginary, and the one for which $\text{im } \omega = \text{im } \delta > 0$ corresponds to growing oscillations. The system is thus unstable with respect to oscillations having sufficiently small values of $\mathbf{k} \cdot \mathbf{V}$.

A different situation occurs when the thermal motion of the electrons is taken into account. In the general case, we have in place of (61.3)

$$\epsilon_1(\omega, \mathbf{k}) = \epsilon_i^{[p]}(\omega, \mathbf{k}) - \Omega_e'^2/(\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{V})^2, \quad (61.10)$$

where $\epsilon^{(p)}$ pertains to the plasma in the absence of the beam. Solving the equation $\epsilon_l = 0$ by the same method, we now find

$$\delta = \pm \Omega_e' / \left[\epsilon^{(pl)}(\mathbf{k} \cdot \mathbf{V}, \mathbf{k}) \right]^{1/2}. \quad (61.11)$$

Because of the Landau damping, $\epsilon^{(pl)}$ always has an imaginary part (for any $\mathbf{k}$). Consequently, δ is always complex, and by virtue of the double sign in (61.11) $\text{im } \delta > 0$ for one branch of the oscillations, i.e. these are unstable. For large V , corresponding to the cold-plasma case discussed above, the part of $\text{im } \epsilon$ due to the Landau damping becomes exponentially small, and we return to (61.8).

In the above analysis, the thermal spread of electron speeds in the beam has been neglected. This is justifiable if the amount of it

$$v'_{Te} \ll |\delta|/k. \quad (61.12)$$

PROBLEMS

Problem I. Determine the boundary of the beam instability region in a cold plasma for values of $\mathbf{k} \cdot \mathbf{V}$ close to Ω_c ,

Solution. For small values of $(\mathbf{k} \cdot \mathbf{V})^2 - \Omega_c^2$, (61.7) is insufficiently accurate. Retaining the term of the next order in δ in the equation $\epsilon_1 = 0$, with ϵ_1 from (61.3), we obtain

¹†The law of transformation for the frequency is easily found by transforming the phase factor of the wave. The position vector of a point in the frame K' is $\mathbf{r}' = \mathbf{r} - \mathbf{V}t$. Hence

$$\frac{\Omega_e'^2}{\delta^2} \approx 1 - \frac{\Omega_e'^2}{(\mathbf{k} \cdot \mathbf{V})^2} + \frac{2\Omega_e'^2\delta}{(\mathbf{k} \cdot \mathbf{V})} \approx \frac{2(\mathbf{k} \cdot \mathbf{V} - \Omega_e)}{\Omega_e} + \frac{2\delta}{\Omega_e}.$$

With new variables ξ and τ defined by

$$\delta = \xi \left(\frac{1}{2} \Omega_e'^2 \Omega_e \right)^{1/3}, \quad \tau = (2/\Omega_e'^2 \Omega_e)^{1/3} (\mathbf{k} \cdot \mathbf{V} - \Omega_e),$$

we reduce this equation to

$$\xi^3 + \pi \xi^2 = 1 \quad (\text{I})$$

(taking the particular case where $\mathbf{k} \cdot \mathbf{V}$ is close to $+\Omega_e$, not to $-\Omega_e$). All three roots of equation (I) are real if $\tau > 3.2^{2/7}$, and this determines the instability region. Two of them correspond to the two roots of (61.6), and the other corresponds to the oscillation frequency of the plasma at rest, which is close to them if $\Omega_r \approx \mathbf{k} \cdot \mathbf{V}$.

Problem 2. Investigate the stability of ion-sound waves in a two-temperature plasma ($T_e \gg T_i$) in which the electron component moves relative to the ion component with a macroscopic velocity V , and $V \ll v_{te}$

Solution. With the condition $V \ll v_{te}$, the directed motion of the electrons has little effect on the dispersion relation for the ion-sound waves, which is again given by (33.4):

$$\frac{\omega}{k} = \left(\frac{zT_e}{M} \right)^{1/2} \frac{t}{(1 + k^2 a_e^2)^{1/2}} \quad (\text{2})$$

the electronic part of the damping rate is found from (33.6) by the change (61.4):

$$\gamma = (\mathbf{k} \cdot \mathbf{V} - \omega)(\pi z m / 8M)^{1/2} \quad (\text{3})$$

The instability condition is $\mathbf{k} \cdot \mathbf{V} > \omega$, for this to be so, we must always have $V > \omega/k$. Near the instability limit, the factor $\mathbf{k} \cdot \mathbf{V} - \omega$ in (3) is small, and it may then be necessary to take account in γ of the ionic part of the damping, which in ordinary conditions is small.

15.6.2 §62. Absolute and convective instabilities

If the dispersion relation has roots in the upper half-plane of ω , a small initial perturbation in the form of a plane wave will grow, i.e. the system is unstable with respect to such a perturbation. In reality, however, any initial perturbation is a wave packet of finite extent in space, and the plane waves are only its separate Fourier components. In the course of time, the packet spreads out and its amplitude (in an unstable system) increases. Simultaneously it moves in space, like any wave packet. Here there are two possibilities.

In one case, regardless of the movement of the packet, the perturbation increases without limit at every point in space. This is called absolute instability. In the other case, the packet moves so quickly that the perturbation tends to zero as $t \rightarrow \infty$ at any fixed point; this is convective instability.

We must emphasize immediately that this difference is a relative one, in the sense that the nature of the instability has to be defined in relation to a particular frame of reference, and may be different in different frames: an instability convective in one frame becomes absolute in a frame moving with the wave packet, and an absolute instability becomes convective in a frame that moves sufficiently rapidly away from the packet.

This, however, does not mean that the difference between the two types of instability has no physical significance. In actual problems, there is always an experimentally preferred frame of reference relative to which the instability is to be considered. The permissibility of regarding a

physical system as infinite in extent does not exclude the fact that it really has boundaries such as walls, which constitute a laboratory frame of reference. Moreover, the actual boundedness of the system may have the result that in convective instability the perturbation is unable to develop before the packet is carried out of the system (for example, by the flow of liquid in a pipe).

The theory below, which leads to criteria distinguishing the two types of instability, is a very general one.[†] The system may be any that is homogeneous and infinite in at least one (the x) direction. We shall therefore not specify here the nature of the medium and the perturbation in it, denoting the latter by some $\psi(t, r)$ and considering only the case of a one-dimensional packet. For a three-dimensional system, this means that the perturbations considered have the form

$$\psi(t, \Gamma) = \psi(t, x)e^{i(k_y y + k_z z)}$$

with given k_y and k_z .

Let us express $\psi(t, x)$ as a one-sided Fourier expansion with respect to the time from $t = 0$ (the instant when the perturbation arises) to $t = \infty$. The components will be denoted by $\varphi(\omega, x)$:

$$\varphi(\omega, x) = \int_0^\infty \psi(t, x)e^{i\omega t} dt \quad (62.1)$$

We shall have to consider perturbations which increase as $t \rightarrow \infty$. We shall assume, what is in fact true, that this increase is not more rapid than an exponential $\exp(\sigma_0 t)$. Then the integral (62.1) can be made to converge by regarding ω as a complex quantity with $\text{im } \omega = \sigma > \sigma_0$. In this region, $\varphi(\omega, x)$ has no singularity as a function of the complex variable ω . In the region $\text{im } \omega < \sigma_0$, however, $\varphi(\omega, x)$ is to be treated as an analytical continuation, and here it has singularities, of course.

The inverse expression for $\psi(t, x)$ in terms of its Fourier transform is

$$\psi(t, x) = \int_{x+i\sigma}^{x+i\sigma} e^{-i\omega t} \varphi(\omega, x) \frac{d\omega}{2\pi} \quad (62.2)$$

with $\sigma > \sigma_0$, so that the contour of integration (which we shall call the ω -contour) passes above all singularities of $\varphi(\omega, x)$ in the upper half-plane of ω .

The function $\varphi(\omega, x)$ in turn can be expanded as a Fourier integral with respect to the coordinate x :

$$\varphi(\omega, v) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_{\omega k}^{(+)} e^{ikx} \frac{dk}{2\pi} \quad (2.3)$$

for brevity, the suffix in k_x is omitted.

The function $\psi_{\omega k}^{(+)}$ is obtained in each specific case by solving the linearized "equations of motion" of the system concerned:

$$\psi_{\omega k}^{(+)} = g_{\omega k} / \Delta(\omega, k), \quad (62.4)$$

Where $g_{\omega k}$ is determined by the initial perturbation, and $\Delta(\omega, k)$ is a characteristic of the system itself. For example, in a plasma the "equation of motion" is the transport equation, $\Delta(\omega, k)$ is the longitudinal permittivity of the plasma, and $g_{\omega k}$ is expressed in terms of the Fourier component of the initial perturbation by (34.12).

^{††} Such a criterion was first established by P. A. Sturrock (1958). The formulation given below is due to R. J. Briggs (1964), whose analysis we shall largely follow in §§62-64.

We shall assume that $g_{\omega k}$ as a function of the complex variables ω and k has no singularity for finite values of these variables, i.e. is an entire function of them. † Then all the singularities of $\psi_{\omega k}^{(+)}$ are singularities of the factor $1/\Delta(\omega, k)$. The equation

$$\Delta(\omega, k) = 0 \quad (62.5)$$

is the dispersion relation of the system. Its roots $\omega(k)$ give the frequencies of oscillations with specified (real) values of the wave number k . As we have seen in §34, it is these frequencies which determine the asymptotic (as $t \rightarrow \infty$) law of time variation of the Fourier component of a perturbation with a specified value of k :

$$\psi_k(t) \propto e^{-i\omega(k)t} = e^{-i\omega(k)t + \omega''(k)t}$$

On this basis, the determination of the asymptotic law of variation of the perturbation at a given point in space would require the investigation of the integral

$$\psi(t, x) \propto \int e^{-\pi\omega(k)n} e^{\omega^*(k)n} e^{ikx} dk. \quad (62.6)$$

In the presence of instability, when $\omega''(k) > 0$ for some range of values of k , one factor in the integrand increases without limit as $t \rightarrow \infty$, and the other oscillates indefinitely rapidly. These opposite tendencies make it difficult to estimate the integral.

Instead, let us return to the form (62.2) for $\psi(t, x)$, before the integration with respect to ω is carried out. We move the ω -contour downwards until it "catches" on the first (the highest, i.e. with the largest ω'') singularity of $\varphi(\omega, x)$; let this point be at $\omega = \omega_c$ (it will become clear that ω_c is independent of x). Evidently, the asymptotic value of the integral is determined by the neighbourhood of that point, so that

$$\psi(t, x) \propto e^{-i\omega_c t} = \exp(-i\omega_c' t + \omega_c'' t) \quad (62.7)$$

If $\omega_c'' > 0$, the perturbation increases at any fixed point x , i.e. the instability is absolute, but if $\omega_c'' < 0$ the perturbation tends to zero at a fixed point, i.e. the instability is convective. Thus the required criterion involves simply a determination of ω_c .

The function $\varphi(\omega, x)$ is given by the integral (62.3) with $\psi_{\omega k}^{(+)}$ from (62.4):

$$\varphi(\omega, x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{g_{\omega k}}{\Delta(\omega, k)} e^{ikx} \frac{dk}{2\pi} \quad (62.8)$$

Since $g_{\omega k}$ is assumed to be an entire function of k , the singularities of the integrand as a function of the complex variable k are at the singularities of $1/\Delta(\omega, k)$; these are usually poles, the roots $k(\omega)$ of (62.5).

For some value of ω , a point on the ω -contour, with a sufficiently large positive imaginary part $\omega'' = \sigma$, let the singularities lie in the k -plane as shown in Fig. 22: some in the upper and some in the lower half-plane. The contour of integration with respect to k in (62.8), which we call the k -contour, lies along the real axis. We now modify ω by gradually reducing ω'' . The singularities move in the k -plane and may reach the real axis for some ω . † These values of ω are not singularities of the function $\varphi(\omega, k)$: there is no objection to moving the k -contour in such a way as to remove it from the neighbourhood of singularities that have crossed the real axis, as shown in Fig. 22b. A singularity of the integral occurs, however, if two moving singularities come close together and pinch the contour of integration between them, thereby eliminating the possibility of removing this contour from their neighbourhood (Fig. 22c).

† For this to be so, it is always necessary that the initial wave packet should diminish in space sufficiently rapidly (faster than $\exp(-\alpha|x|)$).

Thus the value of ω which determines the nature of the stability is chosen from among those such that two roots $k(\omega)$ of the dispersion relation fall together. Only cases such that the two roots approach from opposite sides of the k -contour are to be considered; that is, as $\omega'' \rightarrow 0$ these roots must lie on opposite sides of the real axis. Note, incidentally, that the values of ω_c must be independent of x , since they are determined solely by the properties of the function $1/\Delta(\omega, k)$.

When two simple roots of the equation coincide, a double root is formed, near which the dispersion relation is

$$\Delta(\omega, k) \approx (\omega - \omega_c) (\partial\Delta/\partial\omega)_c + \frac{1}{2} (k - k_c)^2 (\partial^2\Delta/\partial k^2)_c = 0, \quad (62.9)$$

so that $k - k_c \propto \pm (\omega - \omega_c)^{1/2}$.[‡] At the point $\omega = \omega_c$, the function $\omega(k)$ satisfies the

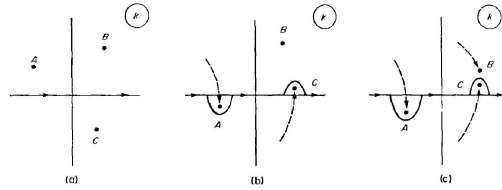


Fig. 22.

condition

$$d\omega/dk = 0, \quad (62.10)$$

i.e. ω_c is a saddle point of the analytic function $\omega(k)$.

The integral (62.8) taken over the neighbourhood of the point $k = k_c$ is

$$\varphi(\omega, x) \propto \frac{e^{ik_c x}}{\sqrt{(\omega - \omega_c)}} \quad (62.11)$$

the function $\varphi(\omega, x)$ thus has a square-root pole at $\omega = \omega_c$. The integral (62.2), taken now over the neighbourhood of the point $\omega = \omega_c$, as a function of t and x , has the form

$$\psi(t, x) \propto \frac{1}{\sqrt{t}} e^{-i(\omega_c t - k_c x)}, \quad (62.12)$$

since this asymptotic expression has been derived for $t \rightarrow \infty$ and fixed x , it is valid only if $|k_c x| \ll |\omega_c t|$.

Although the coalescence of roots of the dispersion relation is the principal source of singularities of $\varphi(\omega, x)$ (and usually determines the nature of the instability), another type of singularity may be mentioned, which occurs at a frequency for which the root $|k| \rightarrow \infty$.[†] The imaginary part of such a frequency ω_c , however, is in practice always negative and therefore certainly cannot cause absolute instability (if ω_c'' were positive, the system under consideration would be unstable with respect to oscillations of infinitesimal wavelength). We shall meet such a case later; see (63.10).

[†]For an unstable system, the singularity must reach the real axis of k while $\omega'' > 0$, at least for some range of values of ω' , since there are certainly roots of $\Delta(\omega, k) = 0$ such that $\omega'' > 0$ for real k .

[‡]In some cases there may be a coincidence of a still larger number of roots, forming a multiple root of higher order. Such cases, however, can in general occur only for particular values of the parameters of the system, since they impose additional restrictions on the points ω_c, k_c : in the expansion of $\Delta(\omega, k)$, other coefficients besides $(\partial\Delta/\partial k)$, must be zero.

As has already been emphasized, an instability convective in one frame of reference (the laboratory frame) may be absolute in another frame. Let us seek the speed V of the frame in which the instability is absolute and has the greatest growth rate.

The change from the laboratory frame to one moving with speed V is made by changing ω to $\omega - kV$ in all formulae. As we have seen, the value ω_c corresponds to the instant when, as ω'' decreases on the ω -contour, two poles of the function $1/\Delta(\omega, k)$ in the k -plane coalesce, and these poles must approach from opposite sides of the real axis, so that one of them must first cross that axis. Let $\omega''_{\max}$ denote the maximum value of ω'' (independent of V) for real k . Since $\omega_c''(k, V)$ is certainly less than the value of ω'' at which the pole crossed the real axis, we have $\omega_c''(k, V) \leq \omega''_{\max}$ for all V . This means that the highest value of ω_c'' is reached if the poles coalesce on the real axis at the maximum of $\omega''(k)$. Replacing $\omega(k)$ by $\omega(k) - kV$ in (62.10), and separating the real and imaginary parts of the equation

† Such a root causes an essential singularity of $\varphi(\omega, x)$. For example, if $|k| \rightarrow \infty$ according to $k'' = C(\omega - \omega_c)$, the contribution from the neighbourhood of the singularity to the integral (62.8) is

$$\varphi(\omega, x) \propto \exp \left\{ \frac{ix}{[C(\omega - \omega_c)]^{1/n}} \right\}.$$

(for real k), we find two equations:

$$d\omega''/dk = 0, \quad (62.13)$$

$$V = d\omega'/dk. \quad (62.14)$$

Thus the greatest growth rate of the instability is given by the maximum value of $\omega''(k)$ as a function of real k . The speed of the frame of reference in which such an instability occurs is determined by the corresponding value of $d\omega'/dk$. This value of V may naturally be taken to define the group velocity of the wave packet in a convectively unstable medium.

15.6.3 §63. Amplification and non-transparency

So far, we have considered instability problems as regards the development with time of a perturbation specified in space at some initial instant. The Fourier expansion of such a perturbation includes components with real values of the wave vectors k , and their time dependence is governed by the frequencies $\omega(k)$, the complex roots of the dispersion relation.

There is, however, another possible formulation of the instability problem t , in which we consider a perturbation set up with a specified time variation in some region of space. The Fourier expansion of such a perturbation contains components with real frequencies ω , and their propagation in space is governed by the wave numbers $k(\omega)$ found by solving the dispersion relation, this time for k ; correspondingly, the wave numbers, not the frequencies, are complex. (As in §62, we are considering a one-dimensional problem, and therefore write $k \equiv k_x$ in place of the vector k .)

The fact that the wave numbers are complex may have various meanings. In some cases it may simply mean that the relevant waves cannot propagate in the medium (non-transparency): in other cases it may signify amplification of the waves by the medium as they propagate from the source. We must emphasize at once that the sign of $\text{im } k$ certainly cannot be the criterion for distinguishing between these two possibilities: the waves can propagate in the positive and the negative x -direction, and a change in the direction of propagation is equivalent to a change in the sign of k .

It is physically obvious that only an unstable medium can amplify. Hence, for example, it is clear immediately that there is non-transparency for transverse electromagnetic waves in a

plasma with dispersion relation $\omega^2 = \Omega_e^2 + c^2 k^2$ (see §32, Problem 1) at frequencies $\omega < \Omega_e$, for which $k(\omega)$ is imaginary: the function $\omega(k)$ given by this equation is real for all real k , so that the system is certainly stable.

For an exact formulation of the problem let us consider a point source as regards the coordinate x , called a signal, which starts at $t = 0$ and thereafter creates a monochromatic perturbation ψ (with some frequency ω_0), called the response of the system to the signal. The source strength is then

$$\left. \begin{aligned} g(t, x) &= 0 && \text{for } t < 0, \\ &= \text{constant} \times \delta(x) e^{-i \cos t} && \text{for } t > 0. \end{aligned} \right\} \quad (63.1)$$

We shall not specify the physical nature of the perturbation ψ , nor therefore that of the source strength g . The only important point is that the ωk -components of the perturbation are determined from the source by

$$\psi_{\omega k} = g_{\omega k} / \Delta(\omega, k) \quad (63.2)$$

This expression is derived from the inhomogeneous linearized "equation of motion" of the system, in which $g(t, x)$ acts as the "right-hand side", just as (62.4) was the solution of the homogeneous equation with the initial condition specified by the function $g(0, x)$. The source (63.1) is †

$$g_{\omega k} = \text{constant} / i (\omega - \omega_0). \quad (63.3)$$

The function $\psi(t, x)$ is then found from the inversion formula

$$\psi(t, x) = \text{constant} \times \int_{-\infty + i\sigma}^{\infty + i\sigma} \Phi(\omega, x) \frac{e^{-i\omega t}}{i(\omega - \omega_0)} \frac{d\omega}{2\pi} \quad (63.4)$$

$$\Phi(\omega, x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{ikx}}{\Delta(\omega, k)} dk \quad (63.5)$$

This expression necessarily satisfies the equation $\psi(t, x) = 0$ for $t < 0$ in accordance with the conditions of the problem: the perturbation occurs only after the source comes in at $t = 0$.

The problem is now to find the asymptotic expression for $\psi(t, x)$ far from the source ($|x| \rightarrow \infty$) in steady conditions, i.e. at a long time after the source begins to operate ($t \rightarrow \infty$). If the perturbation then tends to zero as $x \rightarrow \pm\infty$, we have non-transparency: if it increases in one or other direction from the source, there is amplification. In either case, we can evidently speak of only a convectively unstable (or a stable) system. With absolute instability, the perturbation increases without limit in the course of time at every point in space, so that no steady conditions can possibly be reached.

To find the required asymptotic form, we note first of all that the asymptotic limit $t \rightarrow \infty$ must be taken before $|x| \rightarrow \infty$: since the perturbation cannot propagate to infinity in a finite time, $\psi \rightarrow 0$ as $|x| \rightarrow \infty$ for finite t .

As in §62, we move the contour of integration with respect to ω in (63.4) downwards in order to get the asymptotic expression as $t \rightarrow \infty$. The analytical properties of $\Phi(\omega, x)$ are similar to those of $\varphi(\omega, x)$ in §62. Since the system is assumed only convectively unstable, $\Phi(\omega, x)$ has no singularity in the upper half-plane of ω , and the highest singularity of the integrand in (63.4) is the pole $\omega = \omega_0$ on the real axis. Hence the asymptotic form as $t \rightarrow \infty$ is

$$\psi(t, x) \propto e^{-i\omega_0 t} \Phi(\omega_0, x) \quad (63.6)$$

To find the asymptotic form of $\Phi(\omega_0, x)$ as $|x| \rightarrow \infty$, we must now move the path of integration with respect to k upwards for $x > 0$ or downwards for $x < 0$, until it catches on the pole of the integrand in (63.5), i.e. the root of the equation $\Delta(\omega_0, k) = 0$.

Let $k_+(\omega)$ and $k_-(\omega)$ denote the poles which as $\text{im } \omega \rightarrow \infty$ are respectively in the upper and lower half-planes of k . As $\text{im } \omega$ decreases, the poles move, and for a real $\omega = \omega_0$ they may either remain in their original half-plane or enter the other half-plane. In the first case, the contour of integration in $\Phi(\omega_0, x)$ remains on the real axis as in Fig. 22a; in the second case, it is deformed as shown in Fig. 22b, so as to embrace the poles $k_+(\omega_0)$ and $k_-(\omega_0)$ (points A and C) that have "escaped" into the other half-plane. In either case, when the contour is moved up or down, it catches on the poles k_+ and k_- respectively. The asymptotic form of $\psi(t, x)$ as $x \rightarrow +\infty$ is determined by the contribution from the lowest pole $k_+(\omega_0)$; that as $x \rightarrow -\infty$ is determined by the highest pole $k_-(\omega_0)$. The pole concerned is thus the closest to the real axis (if all poles of a given class are still in their original half-planes), or the farthest from the real axis among those which have moved into the other half-plane. With these values of k_+ and k_- , we have

$$\psi(t, x) \propto \begin{cases} \exp \{ik_+(\omega_0)x - i\omega_0 t\} & \text{for } x > 0, \\ \exp \{ik_-(\omega_0)x - i\omega_0 t\} & \text{for } x < 0. \end{cases} \quad (63.7)$$

For a stable system, all poles remain in their original half-planes when $\omega = \omega_0$, since the absence of oscillation branches with $\text{im } \omega(k) > 0$ (for real k) means that a pole $k(\omega)$ can cross the real axis only with $\text{im } \omega < 0$. Hence, in (63.7),

$$\text{im } k_+(\omega_0) > 0, \quad \text{im } k_-(\omega_0) < 0,$$

so that the waves are damped in both directions from the source.

In the case of convective instability, the poles $k(\omega)$ reach the real axis with $\text{im } \omega > 0$. There are therefore certainly poles k_+ or k_- which have entered the other half-plane for $\omega = \omega_0$, i.e. which have $\text{im } k_+(\omega_0) < 0$ or $\text{im } k_-(\omega_0) > 0$. The presence of such a pole $k_+(\omega_0)$ or $k_-(\omega_0)$ amplifies the wave to the right or left of the source respectively.

From the preceding arguments, we arrive at the following criterion for distinguishing cases of non-transparency and amplification for waves from a source with frequency ω_0 in a convectively unstable system: a wave with complex $k(\omega_0)$ and real ω_0 is amplified if $\text{im } k(\omega)$ changes sign when $\text{im } \omega$ varies from $+\infty$ to 0 with a given $\text{re } \omega = \omega_0$; if $\text{im } k(\omega)$ does not change sign, there is non-transparency.

The criterion has its origin in the requirements of causality. When the source comes into action instantaneously, the perturbation must always decrease as $x \rightarrow \pm\infty$, simply because it cannot propagate to an infinite distance in a finite time. On the other hand, this "infinitely rapid" onset of the source can take place as $e^{-i\omega t}$ with $\text{im } \omega \rightarrow +\infty$. It is therefore clear that waves that are amplified (for real ω) in one or other direction from the source must be damped in that direction when $\text{im } \omega \rightarrow \infty$. and this leads to the criterion formulated above.

The results obtained have a further facet which allows us to determine the direction of wave propagation in a medium with absorption or amplification. In a transparent medium (i.e. when ω and k are real), the physical direction of propagation is that of the group velocity vector. In particular, in the one-dimensional case a wave with a positive or negative derivative $d\omega/dh$ moves in the positive or negative x -direction respectively. In a medium with absorption or amplification, however, we can say that waves of the k_+ and k_- groups propagate in the positive and negative directions respectively. For real ω and k , this general formulation is the same as the previous one: small changes in ω and k are related by

¹In calculating g_{aks} , it must be remembered that the integration in the inverse transformation formula is taken along a contour with $\text{im } \omega > 0$; hence $e^{i\omega t} \rightarrow 0$ as $t \rightarrow \infty$.

$$\delta k = \frac{\delta \omega}{d\omega/dk^3}$$

from which we see that, if ω acquires an imaginary part $\text{im } \omega > 0$, k moves into the upper or lower half-plane according as $d\omega/dk > 0$ or < 0 .

As a simple example of the application of the criteria derived in §§62 and 63, let us consider the instability of a cold electron beam in a cold plasma, discussed in §61. The dispersion relation for this system is

$$\frac{\Omega_e^2}{\omega^2} + \frac{\Omega_e'^2}{(\omega - kV)^2} = 1 \quad (63.8)$$

see (61.6) (for waves propagating in the direction of the beam, $\mathbf{k} \cdot \mathbf{V} = kV$). The roots $k(\omega)$ of this equation have, as $|\omega| \rightarrow \infty$, the form †

$$k = (\omega \pm \Omega_e') / V \quad (63.9)$$

When $\text{im } \omega \rightarrow \infty$, the two roots are in the same (upper) half-plane, i.e. both are in the $k_+(\omega)$ class. In their movement, therefore, they cannot pinch the k -contour as $\text{im } \omega$ decreases, so that the instability is convective. The asymptotic behaviour of a perturbation created at the initial instant is governed by the frequency $\omega = \Omega_e$, near which the roots of equation (63.8) tend to infinity according to

$$k^2 = \Omega_e \Omega_e'^2 / 2V^2 (\omega - \Omega_e) \quad (63.10)$$

Thus, as $t \rightarrow \infty$, only undamped plasma waves remain from the perturbation. For real values of $\omega < \Omega_e$, equation (63.8) has two complex-conjugate roots $k(\omega)$. The one for which $\text{im } k(\omega) < 0$ has moved from the upper to the lower half-plane. Thus, when waves are propagated from a source with frequency $\omega_0 < \Omega_e$, they are amplified in the direction of $x > 0$, i.e. "down" the beam.

15.6.4 §64. Instability with weak coupling of the two branches of the oscillation spectrum

Let us apply the general method developed in §§62 and 63 to investigate the instability which results from the "interaction" of oscillations with neighbouring

† Note that (63.9) is the same as the dispersion relation for the beam itself in the absence of the plasma at rest.

values of ω and k and belonging to different branches of the oscillation spectrum of a non-dissipative system (here denoting one in which both true dissipation and Landau damping are absent).

If the two branches $\omega = \omega_1(k)$ and $\omega = \omega_2(k)$ were completely independent, the dispersion relation would separate into two factors:

$$[\omega - \omega_1(k)] [\omega - \omega_2(k)] = 0. \quad (64.1)$$

Near a point of intersection of such branches, the functions $\omega_1(k)$ and $\omega_2(k)$ would have the general form

$$\left. \begin{aligned} \omega_1(k) &= \omega_0 + v_1 (k - k_0), \\ \omega_2(k) &= \omega_0 + v_2 (k - k_0), \end{aligned} \right\} \quad (64.2)$$

where v_1 and v_2 are some constants, ω_0 and k_0 the (real) values of ω and k at the point of intersection.

Such a case is, however, not realistic in general. The coupling between the two branches could be completely absent for (at best) some specific values of the system parameters, and would appear when these were very slightly changed. † To represent an actual situation, therefore, it would be necessary to take into account the presence of a weak coupling between branches. This has the effect of substituting a small quantity ϵ for zero on the right of (64.1). The dispersion relation near the point then becomes

$$[\omega - \omega_0 - v_1 (k - k_0)] [\omega - \omega_0 - v_2 (k - k_0)] = \epsilon. \quad (64.3)$$

The solution for ω is

$$\omega(k) - \omega_0 = \frac{1}{2} \left[(v_1 + v_2) (k - k_0) \pm \left[(k - k_0)^2 (v_1 - v_2)^2 + 4\epsilon^2 \right]^{1/2} \right], \quad (64.4)$$

and the solution for k is

$$k(\omega) - k_0 = \frac{1}{2v_1 v_2} \left\{ (v_1 + v_2) (\omega - \omega_0) \pm \left[(\omega - \omega_0)^2 (v_1 - v_2)^2 + 4\epsilon v_1 v_2 \right]^{1/2} \right\}. \quad (64.5)$$

The existence of coupling between the branches shifts their point of intersection into the complex region. The functions $\omega(k)$ for real ω and k vary in form according to the sign of the constant ϵ and the relative signs of the constants v_1 and

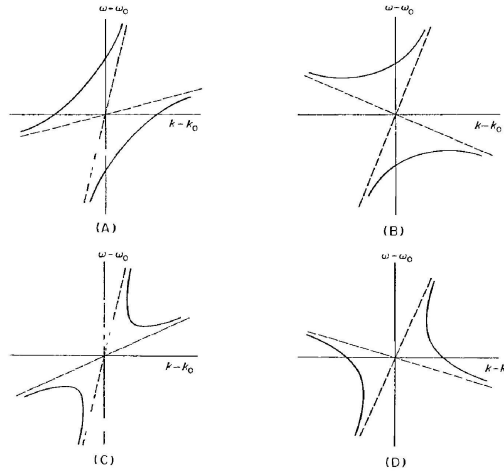


Fig. 23.

v. These functions are shown in Fig. 23 for four cases:

$$\left. \begin{array}{l} \text{(A)} \ \epsilon > 0, \quad v_1 v_2 > 0, \\ \text{(B)} \ \epsilon > 0, \quad v_1 v_2 < 0, \\ \text{(C)} \ \epsilon < 0, \quad v_1 v_2 > 0, \\ \text{(D)} \ \epsilon < 0, \quad v_1 v_2 < 0, \end{array} \right\} \quad (64.6)$$

- An exception is the case where the interaction is absent for reasons of symmetry, for example, if one branch relates to longitudinal waves and the other to transverse waves in an isotropic medium. Since in such a medium the longitudinal current cannot induce a transverse field and vice versa, such waves do not interact. The situation here is analogous to what is found in quantum mechanics for the interaction of terms with different symmetry; see QM, §79.

which we shall consider in turn.

(A) Here the functions $\omega(k)$ are real for all (real) k , and the system is therefore stable. The functions $k(\omega)$ are also real for all ω , so that the waves propagate without amplification for all ω .

(B) The functions $\omega(k)$ are real for all k , and the system is therefore stable. The functions $k(\omega)$ are complex in the frequency range

$$(\omega - \omega_0)^2 < 4|\epsilon v_1 v_2| / (v_1 - v_2)^2. \quad (64.7)$$

Since the system is stable, there is non-transparency in this range.

(C) When

$$(k - k_0)^2 < 4|\epsilon| / (v_1 - v_2)^2 \quad (64.8)$$

the functions $\omega(k)$ are complex, and for one of them $\text{im } \omega(k) > 0$, i.e. there is instability, and it is convective instability, since when $|\omega| \rightarrow \infty$ the roots $k(\omega)$ are

$$k \approx \omega/v_1, \quad k \approx \omega/v_2, \quad (64.9)$$

and when $\text{im } \omega \rightarrow \infty$ they lie in the same half-plane of k . Let v_1 and $v_2 > 0$. Then this is the upper half-plane, and the roots belong to the $k_+(\omega)$ class. For real ω , in the range (64.7), the roots $k(\omega)$ form a complex conjugate pair. The one for which $\text{im } k(\omega) < 0$ has moved from the upper to the lower half-plane. In the frequency range (64.7), therefore, there is amplification of waves propagating in the positive x -direction.

It is also easy to find for this case the "group velocity" of the waves, defined by (62.14), i.e. the speed of the frame of reference in which there is absolute instability with the maximum growth rate. Differentiating (64.3) with respect to k and substituting $d\omega/dk = V$ in accordance with (62.13) and (62.14), we obtain

$$\frac{V - v_1}{V - v_2} = -\frac{\omega - \omega_0 - v_1(k - k_0)}{\omega - \omega_0 - v_2(k - k_0)} \quad (64.10)$$

Since the left-hand side is real, the right-hand side must be so, even if ω is complex. This condition shows that $k = k_0$; then from (64.10)

$$V = \frac{1}{2}(v_1 + v_2). \quad (64.11)$$

and from (64.3) the corresponding maximum growth rate is

$$(\text{im } \omega)_{\max} = |\epsilon|^{1/2} \quad (64.12)$$

(D) The functions $k(\omega)$ are real for all (real) ω , but the $\omega(k)$ are complex in the range (64.8), so that the system is unstable. To determine the nature of this instability, we note that from (64.9) (with opposite signs of v_1 and v_2), as $\text{im } \omega \rightarrow \infty$, the roots $k(\omega)$ are in opposite half-planes. These two roots coalesce at a point in the upper half-plane of ω given by

$$\omega = \omega_c = \omega_0 + 2i\sqrt{(v_1 v_2 \epsilon) / |v_1 - v_2|} \quad (64.13)$$

The instability is therefore absolute, with growth rate $\text{im } \omega_c$. For $v_1 = -v_2$, corresponding to the perturbation in a frame of reference moving with the speed (64.11), the growth rate reaches its maximum value (64.12).

PROBLEM

Determine the nature of the instability of low-frequency ($\omega \sim \omega_{Bi}$) "slow" ($\omega/k \ll c$) transverse electromagnetic waves propagating along a constant magnetic field in a cold magnetoactive plasma, with a low-density cold electron beam moving through the plasma in the same direction.

Solution. To establish the dispersion relation, we first write it for the beam electrons only, in a frame of reference for which the beam is at rest. According to (56.9), we have in this frame

$$k^2 c^2 - \omega^2 = -\Omega_e'^2 \omega / (\omega \pm \omega_{He}),$$

where Ω_e' is the plasma frequency corresponding to the beam density. On returning to the laboratory frame, in which the beam moves with velocity V (which we take to be in the x -direction), we must replace ω by $\omega - kV$ on the right of the equation; the difference $k^2 c^2 - \omega^2$ is invariant with respect to a change in the frame of reference. Now adding, in the laboratory frame, the terms due to the plasma electrons and ions, we obtain

$$k^2 c^2 - \omega^2 = -\frac{\Omega_e^2 (\omega - kV)}{\omega - kV \pm \omega_{Be}} - \frac{\omega \Omega_e^2}{\omega \pm \omega_{Be}} - \frac{\omega \Omega_i^2}{\omega \mp \omega_B}$$

Neglecting here (in accordance with the conditions of the problem) ω in comparison with ck and ω_{se} , and noting also that $\Omega_r^2 / \omega_{He} = \Omega_i^2 / \omega_{Bi}$, we bring the dispersion relation to the form

$$\begin{aligned} [k^2 c^2 - \Omega_i^2 \omega^2 / \omega_R (\omega_h \mp \omega)] (\omega - kV \pm \omega_{Ge}) \\ = -\Omega_r^2 (\omega - kV). \end{aligned} \quad (I)$$

The first factor on the left corresponds to the "principal" oscillation branch, and the second to the beam branch; the right-hand side describes the "interaction" of these branches.

With the upper signs in (I), the dispersion relations for the two independent branches are shown by the continuous curves in Fig. 24; it is, as always, sufficient to consider the branches with $\omega > 0$. Near the point ω_0, k_0 , where they intersect, the expansion of equation (I) is

$$2k_0 c^2 [k - k_0 - (\omega - \omega_0) / v_1] [\omega - \omega_{01} - V(k - k_0)] = \Omega_e^2 \omega_{Be}$$

with a positive coefficient v_1 (as is clear from the slope of the curves in Fig. 24). Comparison with (64.3) shows that we have case C , convective instability. The broken curves in Fig. 24 show the form of the branches when their interaction is taken into account.

Similar diagrams for the lower signs in (I) are given in Fig. 25. Near the point of intersection, the dispersion relation is

$$2k_0 c^2 [k - k_0 + (\omega - \omega_0) / v_1] [\omega - \omega_0 - V(k - k_0)] = -\Omega_e^2 \omega_{Be}$$

where again $v_1 > 0$. We now have case D , absolute instability. The second intersection in this case is seen from the diagram to occur at $\omega \geq \omega_{Be}$, which contradicts the conditions of the problem.

15.6.5 §65. Instability in finite systems

The whole of the theory in §§61-63 related to homogeneous media of unlimited extent in at least one direction (the x -axis). For applications to actual bounded systems, this means that effects due to the reflection of waves from the boundaries are neglected; that is, such a theory is limited to times of the order of the time taken by the perturbation to propagate the length of the system.

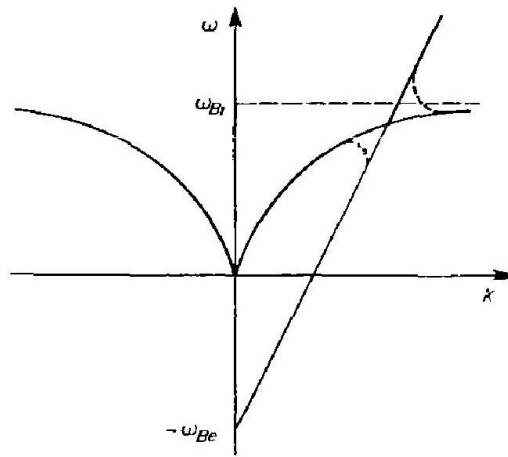


Fig. 24.

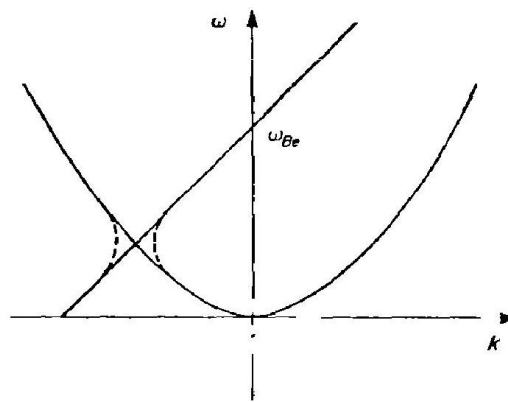


Fig. 25.

Let us now consider stability in the opposite situation where the finiteness of the system is important and the spectrum of its characteristic oscillations is governed by the boundary conditions at the ends; as before, we shall investigate only the one-dimensional case, and the length of the system in the x -direction will be denoted by L . The frequency spectrum of a finite system is discrete, and if one or more of the characteristic frequencies has a positive imaginary part the system is unstable. The distinction between absolute and convective instability has no meaning in this case.

Thus the problem of determining the stability or instability of a finite system is equivalent to that of finding its (complex) eigenfrequencies. The dispersion relation which gives these frequencies can be derived in a general form for a system with finite but sufficiently large dimensions L , such that $\text{im } |k| \cdot L \gg 1$ (A. G. Kulikovskii, 1966).

Let $k(\omega)$ be solutions of the dispersion relation for an infinite medium. We again divide the branches of this many-valued function into two groups, $k_+(\omega)$ and $k_-(\omega)$, as defined in §63. The characteristic oscillations of a finite system may be regarded as resulting from the superposition of travelling waves reflected by the two boundaries (in a medium without absorption and amplification, they would be ordinary stationary waves). The reflection is in general accompanied by a mutual transformation of waves belonging to different branches of the spectrum. The travelling wave of a given frequency is therefore a superposition of all branches. Far from the boundaries, however, the main contribution to each wave comes from only one term in the superposition. For example, in a wave propagating from the left-hand boundary $x = 0$ (Fig. 26) in the positive x -direction, the asymptotic

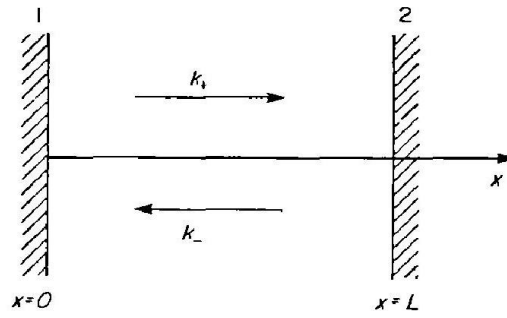


Fig. 26.

expression far from that boundary is

$$\psi = a \exp \{i [k_+(\omega)x - \omega t]\}, \quad (65.1)$$

and $k_+(\omega)$ must be taken as the branch in this group for which $\text{im } k_+(\omega)$ has its algebraically least value for the given real ω .[†]

After reflection from the right-hand boundary $x = L$, the wave propagates to the left, and at sufficiently great distances from that boundary has the asymptotic form

$$\psi = R_2 a \exp \{i k_-(\omega)L\} \exp \{i [k_-(\omega)(x - L) - \omega t]\}, \quad (65.2)$$

where $k_-(\omega)$ is the branch in this group for which $\text{im } k_-(\omega)$ has its algebraically greatest value. The coefficient R_2 depends on the wave transformation law at a particular boundary.

Lastly, after a second reflection, this time at the left-hand boundary, we again have a wave propagating to the right:

$$\psi = R_1 R_2 a e^{i(k_+ - k_-)L} e^{i(k_+ x - \omega t)}. \quad (65.3)$$

Since $\psi(t, x)$ is one-valued, this must coincide with (65.1), so that

$$R_1 R_2 \exp \{i [k_+(\omega) - k_-(\omega)] L\} = 1. \quad (65.4)$$

This determines the frequency spectrum for the finite system, i.e. is its dispersion relation. Taking the modulus of each side, we have

$$|R_1 R_2| \exp \{-\text{im} (k_+ - k_-) L\} = 1. \quad (65.5)$$

When $L \rightarrow \infty$, the exponential factor tends to zero or infinity, depending on the sign of $\text{im} (k_+ - k_-)$. Hence, for sufficiently long systems, equation (65.5) is possible only if

$$\text{im} [k_+(\omega) - k_-(\omega)] = 0. \quad (65.6)$$

In this case, therefore, the dispersion relation reduces to a form depending only on the properties of the medium itself and independent of the specific conditions at the boundaries. Equation (65.6) defines a curve in the ω -plane, on which the discrete eigenfrequencies lie very close together (for large L). If the curve lies even partly in the upper half-plane, the system is unstable. Since this instability is due to the properties of the system as a whole, it is called global instability.

[†]that is, the least positive value if all $\text{im } k_+(\omega) > 0$, and the greatest (in absolute magnitude) negative value if there are branches for which $\text{im } k_+(\omega) < 0$. In the first case, (65.1) is the wave least rapidly damped (with increasing x); in the second case, it is the one most rapidly amplified.

Some further comments may be made on the relation between global instability of a finite system and the instability of an infinite medium. First of all, it is easy to see that in the presence of global instability the infinite medium is certainly unstable, since there exist real values of k for which $\text{im } \omega(k) > 0$. For, by the definition of $k_+(\omega)$ and $k_-(\omega)$, their values for $\text{im } \omega \rightarrow \infty$ lie in different half-planes of k . The condition (65.6) signifies that, as $\text{im } \omega$ decreases, the points $k_+(\omega)$ and $k_-(\omega)$ may come into the same half-plane, and do so (in the case of global instability) while $\text{im } \omega > 0$. Consequently, at least one of these points crosses the real axis even earlier, i.e. certainly while $\text{im } \omega > 0$; this proves the above statement.

The converse statement, however, is valid only for absolute (not convective) instability of the infinite medium: the presence of absolute instability is sufficient to cause global instability of the finite system. The condition for absolute instability is that there exists a branch point of $k(\omega)$ with $\text{im } \omega > 0$, and the coalescing branches belong to the k_+ and k_- groups. At such a point, the condition (65.6) is certainly satisfied also.

A convectively unstable medium may be either stable or unstable when boundaries are present.

15.7 Typical Hydrodynamic Models

(I wasn't working with it yet)

15.7.1 Transport and Mixing in Random Flows

(see note on cont mech for now about it...)

перенос в двух словах

Понятие о хаотическом потоке

Примеры хаотических течений

Перенос примеси потоком

Диффузия примеси

Размешивание примеси хаотическим потоком

Уравнение переноса пассивного скаляра

Уравнение переноса пассивного скаляра, испытывающего распад и подпитываемого накачкой, имеет вид

$$\partial_t \theta + (v \nabla) \theta = -\gamma \theta + f$$

где γ - скорость распада скаляра.

Можно считать накачку случайной по времени y имеющей некоторую корреляцию в пространстве, так что

$$\langle f(t, r_1) f(t', r_2) \rangle = \delta(t - t') \chi(r_1 - r_2)$$

Мы предполагаем, что накачка изотропна, так что функция $\chi(r)$ зависит на самом деле только от абсолютного значения вектора r и убывает на некотором масштабе L .

Исследуем, как будет устроена корреляционная функция пассивного скаляра на расстояниях, много меньших корреляционной длины поля скорости жидкости.

На таких расстояниях можно считать профиль поля скорости линейным, так что

$$\langle (v^i(t, r_1) - v^i(t, r_2)) (v^j(t', r_1) - v^j(t', r_2)) \rangle = D (2r^2 \delta^{ij} - r^i r^j) \delta(t - t'),$$

где $r = r_1 - r_2$.

Вид пространственной зависимости корреляционной функции однозначно фиксируется требованиями

- i) линейности по координате профиля поля скорости;
- ii) бездивергентностью поля скорости;
- iii) изотропностью статистики поля скорости.

Перейдём в систему координат, начало которой движется вместе с некоторым зафиксированным элементом жидкости.

В этой системе координат скорость в окрестности начала координат задаётся матрицей σ^{ij} градиента поля скорости,

$$v^i = \sigma^{ij} r^j$$

Корреляционная функция случайного процесса σ^{ij} вытекает из корреляционной функции поля скорости

$$\langle \sigma^{ij}(t) \sigma^{lk}(t') \rangle = D (4\delta^{il}\delta^{jk} - \delta^{ik}\delta^{jl} - \delta^{ij}\delta^{lk}) \delta(t - t')$$

Уравнение на скаляр в выбранной нами системе отсчёта имеет вид

$$\partial_t \theta = [\sigma^{ij} r^j \nabla_i - \gamma] \theta + f$$

Формально, эволюцию θ можно записать в виде

$$\theta(t) = \hat{\mathcal{U}}(t, t_0) \theta(t_0) + \int_{t_0}^t dt' \mathcal{U}(t, t') f(t')$$

$$\mathcal{U}(t, t_0) = \mathcal{T} \exp \left[\int_{t_0}^t (\sigma^{ij}(t') r^j \nabla_i - \gamma) dt' \right]$$

где $\mathcal{T}$ - оператор временного упорядочения, который расставляет операторы в порядке убывания их временного аргумента.

Уравнение на парную корреляционную функцию (лол, откуда 8?)

$$\begin{aligned} \partial_t F_2(r) &\equiv \partial_t \langle \theta(t, 0) \theta(t, r) \rangle = \\ &= (D (2r^2 \partial_r^2 + 8r \partial_r) - 2\gamma) F_2(r) + \chi(r) \end{aligned}$$

Точки парной корреляционной функции мы выбираем из соображений удобства: исходно задача была трансляционно-инвариантной, но мы специально выбрали систему координат, в которой проще проводить вычисления.

Мы также учли, что для изотропного случая парная корреляционная функция зависит только от абсолютного значения r .

Граничными условиями является конечность функции F_2 в нуле и стремление к нулю на бесконечности.

Метод получения уравнения (6.8) следующий: надо во временную производную от корреляционной функции подставить производные от θ в начале координат и в точке r , произведя усреднение по накачке и по флуктуациям скорости.

Вклад от накачки получается следующим образом (выписываем только релевантные слагаемые):

$$\theta(t, r) = \int dt' f(t', r)$$

$$\partial_t F_2(r) = \left\langle f(t, 0) \int^t dt' f(t', r) + f(t, r) \int^t dt' f(t', 0) \right\rangle = \chi(r), \quad (15.1)$$

поскольку мы полагаем, что $\int_0^t dt \delta(t) = 1/2$.

Слагаемое в (6.8), пропорциональное амплитуде флуктуаций скорости D , можно получить следующим образом.

В представлении (6.7) удержим только решение, зависящее от начального условия в момент времени t_0 , а в нём только вклад от скорости.

Нас интересует производная по времени: нулевой член разложения $\mathcal{T}$ -экспоненты поэтому нам не интересен.

Первый член разложения обращается после усреднения в ноль, а второй член разложения как раз приводит к ненулевому вкладу.

размешивание скаляра полем скорости

Пассивный скаляр размешивается крупномасштабным полем скорости; при этом имеются и накачка, и объемное поглощение:

$$\partial_t \theta + (\mathbf{v} \nabla) \theta - \gamma \theta = f(\mathbf{x}, t)$$

$$\langle f(\mathbf{x}, t) f(\mathbf{x}', t') \rangle = \chi(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta(t - t')$$

$$v_\alpha(\mathbf{x}, t) = \sigma_{\alpha\beta}(t) x_\beta$$

где d - размерность пространства и функция $\chi(r)$ имеет характерный масштаб L , $\mathcal{G}$ - константа размерности с^{-1} , определяющая силу шума.

Определить одновременную корреляционную функцию пассивного скаляра $F(r) = \langle \theta(\mathbf{r}) \theta(0) \rangle$ на расстояниях $r \ll L$

15.8 Nonequilibrium Plasma

(лл10 куча всего)

(соответственно куча статей и пойдет из этой главы, огромнейшая будет, супер подробно плазма пройдена будет)

(электродинамику собираю в дополнениях!!!! тут ее слишком много для кинетики)

15.8.1 Overview of Plasma Kinetics

какие в ней разделы есть?

что дает?

Why kinetics of plasma is so studied?

(???? really, why is it important???)

обзор свойств плазмы

Во избежание непринципиальных усложнений мы будем (где это понадобится) считать плазму двухкомпонентной - содержащей лишь электроны (заряд $-e$) и положительные ионы одного сорта с зарядом ze .

спектр плазмонов имеет вид:

типы плазмы

есть максвелловская плазма, лоренцева.
кот знает, в чем их разница?

связь плазмы с другими подходами

я так понимаю, что плазма это электроны те же, только при некоторых определенных условиях.

(???)

так что такое плазма?

плазма это ионизированный газ.

все что ли?

обзор уравнений Власова

главная идея власова состоит в том, что

(???)

Самосогласованная замкнутая система уравнений Власова для определения функций распределения и полей $\mathbf{E}$ и $\mathbf{B}$ имеет вид ниже.

Кинетические уравнения для функции распределения электронов с зарядом $(-e)$ и функции распределения ионов с зарядом Ze

$$\begin{aligned}\frac{\partial n}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial n}{\partial \mathbf{r}} - e \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} [\mathbf{v} \times \mathbf{B}] \right) \frac{\partial n}{\partial \mathbf{p}} &= 0 \\ \frac{\partial n_i}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial n_i}{\partial \mathbf{r}} + Ze \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} [\mathbf{v} \times \mathbf{B}] \right) \frac{\partial n_i}{\partial \mathbf{p}} &= 0\end{aligned}$$

Плотность заряда $\rho(\mathbf{r}, t)$ и плотность тока $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$ выразим через функции распределения

$$\begin{aligned}\rho &= e \int (Zn_i - n) d\Gamma_p \\ \mathbf{j} &= e \int \mathbf{v} (Zn_i - n) d\Gamma_p\end{aligned}$$

Чтобы получить замкнутую систему уравнений, мы должны включить в рассмотрение уравнения Максвелла, определяющие эволюцию электрического и магнитного поля под действием электрических зарядов и токов

$$\begin{aligned}\operatorname{div} \mathbf{E} &= 4\pi\rho, & \operatorname{div} \mathbf{B} &= 0 \\ \operatorname{rot} \mathbf{E} &= -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, & \operatorname{rot} \mathbf{B} &= \frac{4\pi}{c} \mathbf{j} + \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}\end{aligned}$$

самосогласованность**вывод уравнения выражения для диэлектрической проницаемости плазмы**

(задача про плазму!)

объяснение отражения длинноволновых электромагнитных волн от ионосферы земли

(??!!)

(задача про плазму!)

15.8.2 Fermi Liquid Theory for Plasma

Обсудим известный из статистической физики метод ферми-жидкости с точки зрения применения к плазме.

(из Левитова Шитова, а также более подробно в дополнениях. нормально - в записи по статфизу)

мотивация

Theory

Перепишем уравнения (27.

10) в виде, более обычном для макроскопической электродинамики, введя в них наряду с напряженностью $\mathbf{E}$ также и электрическую индукцию $\mathbf{D}$.

При этом мы определим вектор электрической поляризации $\mathbf{P}$ соотношениями

$$\frac{\partial \mathbf{P}}{\partial t} = \mathbf{j}, \quad \operatorname{div} \mathbf{P} = -\rho$$

непротиворечивость этих двух формул обеспечивается уравнением непрерывности $\operatorname{div} \mathbf{j} = -\partial \rho / \partial t$ (мы вернемся еще к этому определению ниже в этом параграфе).

Тогда уравнения (27.

10) примут вид

$$\begin{aligned} \operatorname{rot} \mathbf{E} &= -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \quad \operatorname{div} \mathbf{B} = 0 \\ \operatorname{rot} \mathbf{B} &= \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}, \quad \operatorname{div} \mathbf{D} = 0. \end{aligned}$$

В слабых полях связь индукции $\mathbf{D}$ с напряженностью $\mathbf{E}$ линейна.

Но уже в обычных средах эта связь не имеет мгновенного характера по времени:

значение $\mathbf{D}(t, \mathbf{r})$ в некоторый момент времени t зависит, вообще говоря, от значений $\mathbf{E}(t, \mathbf{r})$ не только в тот же, но и во все предшествующие моменты времени (см. VIII, §58).

В плазме к этому добавляется еще и нелокальность связи: значение $\mathbf{D}(t, \mathbf{r})$ в некоторой точке пространства $\mathbf{r}$ зависит от значений $\mathbf{E}(t, \mathbf{r})$ не только в той же точке, но, вообще говоря, и во всем объеме плазмы.

Это свойство связано с тем, что «свободное» (т. е.

без столкновений) движение частиц в плазме определяется значениями поля на всей их траектории.

Наиболее общая линейная связь между функциями $\mathbf{D}(t, \mathbf{r})$ и $\mathbf{E}(t, \mathbf{r})$ может быть записана в виде

$$D_{\alpha}(t, \mathbf{r}) = E_{\alpha}(t, \mathbf{r}) + \int_{-\infty}^t \int K_{\alpha\beta}(t - t', \mathbf{r}, \mathbf{r}') E_{\beta}(t', \mathbf{r}') d^3 x' dt'$$

Для пространственно-однородной плазмы ядро интегрального оператора $K_{\alpha\beta}$ зависит только от разности пространственных аргументов $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$.

Введя обозначения $\mathbf{r} - \mathbf{r}' = \boldsymbol{\rho}$, $t - t' = \tau$, перепишем эту связь в виде

$$D_{\alpha}(t, \mathbf{r}) = E_{\alpha}(t, \mathbf{r}) + \int_0^{\infty} \int K_{\alpha\beta}(\tau, \boldsymbol{\rho}) E_{\beta}(t - \tau, \mathbf{r} - \boldsymbol{\rho}) d^3 \rho d\tau$$

Как обычно, путем разложения в ряд или интеграл Фурье можно представить поле в виде совокупности плоских волн, в которых $\mathbf{E}$ и $\mathbf{D}$ пропорциональны $e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r}-\omega t)}$. Для таких волн связь $\mathbf{D}_c\mathbf{E}$ принимает вид

$$D_\alpha = \varepsilon_{\alpha\beta}(\omega, \mathbf{k}) E_\beta$$

где тензор диэлектрической проницаемости

$$\varepsilon_{\alpha\beta}(\omega, \mathbf{k}) = \delta_{\alpha\beta} + \int_0^\infty \int K_{\alpha\beta}(\tau, \boldsymbol{\rho}) e^{i(\omega\tau - \mathbf{k}\boldsymbol{\rho})} d^3\rho d\tau$$

Из этого определения непосредственно следует, что

$$\varepsilon_{\alpha\beta}(-\omega, -\mathbf{k}) = \varepsilon_{\alpha\beta}^*(\omega, \mathbf{k})$$

Таким образом, нелокальность связи между $\mathbf{E}$ и $\mathbf{D}$ приводит к тому, что диэлектрическая проницаемость плазмы оказывается функцией не только от частоты, но и от волнового вектора; об этой последней зависимости говорят как о пространственной дисперсии, подобно тому, как зависимость от частоты называют временной (или частотной) дисперсией.

Вернувшись к уравнениям (28.1), (28.2), напомним, что при формулировке уравнений Максвелла для переменных полей в обычных средах наряду с диэлектрической поляризацией $\mathbf{P}$ вводится также и намагниченность $\mathbf{M}$, причем средний микроскопический ток разлагается на две части $\partial\mathbf{P}/\partial t$ и $c \text{rot } \mathbf{M}$; в плоской волне эти выражения сводятся к $-i\omega\mathbf{P}$ и $ic[\mathbf{k}\mathbf{M}]$.

Но при наличии пространственной дисперсии, когда все величины все равно зависят от $\mathbf{k}$, такое разделение нецелесообразно.

Отметим также, что, если ток $\mathbf{j}$ и плотность зарядов ρ целиком включены в определение поляризации $\mathbf{P}$ (как это сделано в (28.

1)), последняя зависит, вообще говоря, как от электрического поля $\mathbf{E}$, так и от магнитного поля $\mathbf{B}$.

Но поле $\mathbf{B}$ можно выразить через $\mathbf{E}$ согласно первой паре уравнений Максвелла (28.

2), содержащей только эти две величины, т.

е.

(для плоской волны) согласно $[\mathbf{kE}] = \omega\mathbf{B}/c$, $\mathbf{kB} = 0$. Тогда и поляризация $\mathbf{P}$ окажется выраженной только через $\mathbf{E}$, что и подразумевается в определении $\varepsilon_{\alpha\beta}$ согласно (28.3) – (28.5). Зависимость от волнового вектора вносит в функции $\varepsilon_{\alpha\beta}(\omega, \mathbf{k})$ выделенное направление – направление ее аргумента $\mathbf{k}$. Поэтому при наличии пространственной дисперсии диэлектрическая проницаемость является тензором даже в изотропной среде.

Общий вид такого тензора можно представить в форме

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

При умножении на E_β первый член в (28.

7) дает в индукцию $\mathbf{D}$ вклад, перпендикулярный волновому вектору, а второй член вклад, параллельный $\mathbf{k}$.

Для полей $\mathbf{E}$, перпендикулярных $\mathbf{k}$ или направленных по $\mathbf{k}$, связь между $\mathbf{D}$ и $\mathbf{E}$ сводится соответственно к $\mathbf{D} = \varepsilon_t \mathbf{E}$ или $\mathbf{D} = \varepsilon_l \mathbf{E}$. Скалярные функции ε_t и ε_l называют соответственно поперечной и продольной проницаемостями.

Они зависят от двух независимых переменных – частоты ω и абсолютной величины волнового вектора k . При $\mathbf{k} \rightarrow 0$ выделенное направление исчезает, и тогда тензор $\varepsilon_{\alpha\beta}$

должен сводиться к виду $\varepsilon(\omega)\delta_{\alpha\beta}$, где $\varepsilon(\omega)$ - обычная скалярная проницаемость, учитывающая лишь частотную дисперсию.

Соответственно пре-дельные значения функций ε_t и ε_l одинаковы и равны

$$\varepsilon_t(\omega, 0) = \varepsilon_l(\omega, 0) = \varepsilon(\omega)$$

Согласно (28.

6) скалярные функции ε_l и ε_t обладают свойством

$$\varepsilon_l(-\omega, k) = \varepsilon_l^*(\omega, k), \quad \varepsilon_t(-\omega, k) = \varepsilon_t^*(\omega, k)$$

Пространственная дисперсия не влияет на свойства ε_l и ε_t как функций комплексной переменной ω .

Для этих функций остаются в силе все известные результаты (см.

VIII, §62), относящиеся к проницаемости $\varepsilon(\omega)$ обычных сред без пространственной дисперсии.

В этой главе мы будем рассматривать только изотропную плазму.

Подчеркнем, что это предполагает не только отсутствие внешнего магнитного поля, но и изотропию функции распределения частиц по импульсам (в невозмущенной полем плазме).

В противном случае появляются новые выделенные направления и тензорная структура $\varepsilon_{\alpha\beta}$ усложняется.

Уже было указано, что происхождение пространственной дисперсии в плазме связано с зависимостью «свободного» движения частиц от значений поля вдоль их траектории.

Фактически, конечно, существенное влияние на движение частицы в каждой точке ее траектории оказывают значения поля не на всей траектории, а лишь на некоторых ее отрезках не слишком большой длины.

Порядок величины этих длин может определяться двумя механизмами: столкновениями, нарушающими свободное движение по траектории, или усреднением осциллирующего поля за время пролета частицы по траектории.

Для первого механизма характерным расстоянием является длина свободного пробега частицы $l \sim \bar{v}/\nu$, а для второго - расстояние $\bar{v}/\omega$, на которое частица, двигаясь со средней скоростью $\bar{v}$, перемещается за время одного периода поля.

В выражении (28.

3) дальности корреляции между значениями **D** и **E** в различных точках пространства соответствуют расстояния $r_{\text{кор}}$, на которых существенно убывает функция $K_{\alpha\beta}(\tau, \rho)$. Можно утверждать, следовательно, что порядок величины этих расстояний дается меньшей из двух величин, l или $\bar{v}/\omega$ (причем надо брать ее для тех частиц - электронов или ионов, для которых она имеет большее значение).

Если $\nu \ll \omega$, то меньшей является величина $\bar{v}/\omega$ и тогда

$$r_{\text{кор}} \sim \bar{v}/\omega.$$

Пространственная дисперсия значительна при $kr_{\text{кор}} \gtrsim 1$ и исчезает при $kr_{\text{кор}} \ll 1$; в последнем случае в (28.

5) можно заменить $e^{-i\mathbf{k}\rho} \approx 1$ и интеграл перестает зависеть от **k**. С $r_{\text{кор}}$ из (28.

10) мы находим, следовательно, что пространственная дисперсия существенна для волн, фазовая скорость которых (ω/k) сравнима или меньше средней скорости частиц в плазме.

В обратном предельном случае при

$$\omega \gg k\bar{v}$$

пространственная дисперсия несущественна.

Важно, что значения $r_{\text{кор}}$ в Плазме могут быть велики. По сравнению со средними расстояниями между частицами ($\sim N^{-1/3}$). Именно это условие делает возможным макроскопическое описание пространственной дисперсии в терминах диэлектрической проницаемости даже тогда, когда дисперсия значительна.

Напомним (см.

VIII, §83), что в обычных средах роль длины корреляции играют атомные размеры и потому уже условие применимости макроскопической теории требует соблюдения неравенства $kr_{\text{кор}} \ll 1$ (длина волны должна быть велика по сравнению с атомными размерами); именно поэтому в таких средах пространственная дисперсия (проявляющаяся, например, в так называемой естественной оптической активности) всегда оказывается лишь малой поправкой.

поиск закона дисперсии продольных волн

(????!!! см задачу про плазму)

15.8.3 Dielectric Permittivity and Susceptibility of Plasma

(!!) теория ландау

потом ее приведу, пока нет времени на нее.

итоговые свойства плазмы

????

диэлектрическая проницаемость имеет вид:

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

(?)

бывает вырожденная и невырожденная плазма.

это определяется тем, больше температура, чем энергия ферми, или меньше.

(это потом подумаю)

вывод в двух словах

????

задача 16 дз, Бурмистров 25

Найти пространственно-частотную дисперсию диэлектрической проницаемости $\varepsilon_{\alpha\beta}(\omega, k)$ в бесстолкновительной изотропной плазме, когда столкновения между частицами плазмы не играют существенной роли.

В первом приближении полностью пренебречь движением положительных ионов благодаря сильному неравенству в соотношении между массами иона и электрона $M \gg m$.

подготовка параметров и обсуждение границ применимости

Пусть $n(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ - функция распределения частиц, и $dN = n(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) d^3r d\Gamma_p$ - число частиц, координаты и импульсы которых в момент времени t лежат в интервалах $\mathbf{r} \div \mathbf{r} + d\mathbf{r}$ и $\mathbf{p} \div \mathbf{p} + d\mathbf{p}$.

С учетом двух проекций спина $d\Gamma_p = 2d^3p/(2\pi\hbar)^3$.

Запишем кинетическое уравнение

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial n}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{F} \frac{\partial n}{\partial \mathbf{p}} = \text{St}[n]$$

Здесь $\mathbf{v}$ - скорость частицы и $\mathbf{F} = q(\mathbf{E} + [\mathbf{v} \times \mathbf{B}]/c)$ - сила Лоренца, действующая на частицу с зарядом q .

Рассматривая плазму как бесстолкновительную, мы должны пренебречь столкновительным членом $\text{St}[n]$, который при малых отклонениях $\delta n = n - n_0$ от равновесной функции распределения $n_0(\mathbf{p})$, примерно равен $\delta n/\tau$, где τ - характерное время столкновений.

Возможность такого приближения возникает, если

$$\frac{\partial \delta n}{\partial t} \sim \omega \delta n \gg \frac{\delta n}{\tau} \quad \text{или} \quad v \frac{\partial \delta n}{\partial r} \sim v \frac{\delta n}{L} \gg \frac{\delta n}{\tau}.$$

Здесь ω - характерная частота и L - характерная длина, на которых во времени и в пространстве меняются электрическое $\mathbf{E}$ и магнитное $\mathbf{B}$ поля.

Таким образом, необходимо реализовать высокочастотную ситуацию $\omega\tau \gg 1$ или большую длину пробега частиц плазмы $l = v\tau \gg L$.

основные уравнения для Плазмы

Итак, в бесстолкновительной плазме мы имеем следующие кинетические уравнения для функции распределения электронов с зарядом $(-e)$ и функции распределения ионов с зарядом Ze

$$\begin{aligned} \frac{\partial n}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial n}{\partial \mathbf{r}} - e \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} [\mathbf{v} \times \mathbf{B}] \right) \frac{\partial n}{\partial \mathbf{p}} &= 0 \\ \frac{\partial n_i}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial n_i}{\partial \mathbf{r}} + Ze \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} [\mathbf{v} \times \mathbf{B}] \right) \frac{\partial n_i}{\partial \mathbf{p}} &= 0 \end{aligned}$$

Плотность заряда $\rho(\mathbf{r}, t)$ и плотность тока $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$ выразим через функции распределения

$$\begin{aligned} \rho &= e \int (Zn_i - n) d\Gamma_p \\ \mathbf{j} &= e \int \mathbf{v} (Zn_i - n) d\Gamma_p \end{aligned}$$

Чтобы получить замкнутую систему уравнений, мы должны включить в рассмотрение уравнения Максвелла, определяющие эволюцию электрического и магнитного поля под действием электрических зарядов и токов

$$\begin{aligned} \text{div } \mathbf{E} &= 4\pi\rho, & \text{div } \mathbf{B} &= 0 \\ \text{rot } \mathbf{E} &= -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, & \text{rot } \mathbf{B} &= \frac{4\pi}{c} \mathbf{j} + \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \end{aligned}$$

Все вместе уравнения выше составляют самосогласованную замкнутую систему уравнений Власова для определения функций распределения и полей $\mathbf{E}$ и $\mathbf{B}$.

малые отклонения от равновесного состояния

Так как в нашем приближении мы исключили движение ионов, то ионная функция распределения остается равновесной $n_i = n_{i0}$.

Электронную функцию представим в виде $n = n_0 + \delta n$.

В силу электронейтральности и отсутствия электрических токов в равновесии имеем

$$e \int (Zn_{i0} - n_0) d^3p = 0,$$

$$e \int v (Zn_{i0} - n_0) d^3p = 0.$$

Тогда

$$\rho = -e \int \delta n d\Gamma_{\mathbf{p}} \quad \text{и} \quad \mathbf{j} = -e \int \mathbf{v} \delta n d\Gamma_{\mathbf{p}}$$

Рассмотрим малые отклонения от равновесия $\mathbf{E}_0 = \mathbf{B}_0 = 0$.

В линейном приближении по всем отклонениям от равновесных значений мы найдем

$$\frac{\partial \delta n}{\partial t} + v \frac{\partial \delta n}{\partial r} - e \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} [\mathbf{v} \times \mathbf{B}] \right) \frac{\partial n_0}{\partial p} = 0$$

Поскольку $\partial n_0(\varepsilon_p) / \partial p = \mathbf{v} \partial n_0 / \partial \varepsilon$, то член с магнитным полем полностью выпадает и тогда

$$\frac{\partial \delta n}{\partial t} + v \frac{\partial \delta n}{\partial r} = e(v\mathbf{E}) \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon}$$

Если электрическое поле содержит одну гармонику:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_{\mathbf{k}, \omega} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r} - i\omega t),$$

то в силу линейности уравнения и $\delta n(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = \delta n_{\mathbf{k}, \omega}(\mathbf{p}) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r} - i\omega t)$, мы получим

$$(\omega - kv) \delta n_{\mathbf{k}, \omega}(\mathbf{p}) = ie(v\mathbf{E}_{\mathbf{k}, \omega}) \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon}$$

При решении этого уравнения происходит деление на нуль и возникает особая точка в виде простого полюса.

формула Сохоцкого в помощь

В этой связи сделаем следующее отступление.

Уравнение

$$xy(x) = 1,$$

вообще говоря, имеет целый ряд решений в силу тождества $x\delta(x) = 0$

$$y(x) = \mathcal{P} \frac{1}{x} + b\delta(x)$$

где $\mathcal{P}(1/x)$ - главное значение интеграла от $1/x$ и b - произвольное число.

Соответственно, уравнение на $\delta n_{\mathbf{k}, \omega}$ также имеет не единственное решение.

Для выбора решения, имеющего физический смысл, обратим внимание, что возмущение функции распределения $\delta n_{\mathbf{k}, \omega}$ электрическим полем $\mathbf{E}_{\mathbf{k}, \omega}$ представляет собой запаздывающий отклик на внешнее воздействие.

Тогда, согласно физическим принципам, отклик $\delta n_{\mathbf{k}, \omega}$ должен быть аналитической функцией частоты в верхней полуплоскости комплексной переменной ω и, следовательно, полюсная особенность $\delta n_{\mathbf{k}, \omega}$ может находиться только в нижней полуплоскости комплексной переменной ω .

Этому условию удовлетворяет решение

$$\delta n_{\mathbf{k}, \omega}(p) = \frac{ie(vE_{\mathbf{k}, \omega})}{\omega - kv + i\delta} \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} = ie(vE_{\mathbf{k}, \omega}) \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} \left(\mathcal{P} \frac{1}{\omega - kv} - i\pi\delta(\omega - kv) \right)$$

с полюсом в точке $\omega = kv - i\delta$ в нижней полуплоскости комплексной переменной ω .

Последнее равенство соответствует формуле Сохоцкого

$$\frac{1}{x + i\delta} = \mathcal{P} \frac{1}{x} - i\pi\delta(x)$$

Поляризация

Поляризация для плазмы имеет вид:

$$P_\alpha = \frac{e^2}{\omega} E_\beta \int \frac{v_\alpha v_\beta}{\omega - kv + i\delta} \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} d\Gamma_p$$

Поляризацию электронной компоненты $\mathbf{P}_{\mathbf{k},\omega}$ проще найти с помощью соотношения между током и поляризацией

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \partial \mathbf{P}(\mathbf{r}, t) / \partial t$$

или для фурье-компонент $\mathbf{j}_{\mathbf{k},\omega} = -i\omega \mathbf{P}_{\mathbf{k},\omega}$.

Таким образом, подставляя ток,

$$\omega \mathbf{P}_{\mathbf{k},\omega} = e^2 \int \mathbf{v} (\mathbf{v} \mathbf{E}_{\mathbf{k},\omega}) \frac{\partial n_0 / \partial \varepsilon}{\omega - \mathbf{k} \mathbf{v} + i\delta} d\Gamma_p$$

Или в компонентах:

$$P_\alpha = \frac{e^2}{\omega} E_\beta \int \frac{v_\alpha v_\beta}{\omega - kv + i\delta} \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} d\Gamma_p$$

Восприимчивость и диэлектрическая проницаемость

Восприимчивость $\chi_{\alpha\beta}(\omega, k)$ имеет вид:

$$\frac{e^2}{\omega} \int \frac{v_\alpha v_\beta}{\omega - kv + i\delta} \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} d\Gamma_p$$

который легко найти из соотношения

$$P_\alpha \equiv \chi_{\alpha\beta} E_\beta$$

Диэлектрическая проницаемость $\varepsilon_{\alpha\beta}$ имеет вид:

$$\varepsilon_{\alpha\beta}(\omega, k) = \left(1 + \frac{4\pi e^2}{\omega^2} \int d\Gamma_p s v^2 A(s) \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} \right) \delta_{\alpha\beta} + \left(\frac{4\pi e^2}{\omega^2} \int d\Gamma_p s v^2 B(s) \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} \right) \frac{k_\alpha k_\beta}{k^2}$$

Она находится с помощью восприимчивости:

$$\varepsilon_{\alpha\beta}(\omega, k) = \delta_{\alpha\beta} + 4\pi \chi_{\alpha\beta}(\omega, k) = \delta_{\alpha\beta} + \frac{4\pi e^2}{\omega} \int \frac{v_\alpha v_\beta}{\omega - kv + i\delta} \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} d\Gamma_p,$$

а также преобразования интеграла.

Вычисление интеграла удобно провести с помощью следующего приема.

Введем единичные векторы $\mathbf{l}$ и $\mathbf{e}$ вдоль вектора скорости $\mathbf{v}$ и волнового вектора $\mathbf{k}$, т.е. $\mathbf{v} = v\mathbf{l}$ и $\mathbf{k} = k\mathbf{e}$.

Тогда имеем

$$\varepsilon_{\alpha\beta}(\omega, \mathbf{k}) = \delta_{\alpha\beta} + \frac{4\pi e^2}{\omega^2} \int d\Gamma_p s v^2 \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} \int \frac{d\Omega_p}{4\pi} \frac{l_\alpha l_\beta}{s - \mathbf{l} \mathbf{e} + i\delta},$$

где $s = \frac{\omega}{vk}$.

Интеграл можно записать как

$$\int \frac{d\Omega_p}{4\pi} \frac{l_\alpha l_\beta}{s - \mathbf{l} \mathbf{e} + i\delta} = A(s) \delta_{\alpha\beta} + B(s) e_\alpha e_\beta.$$

Действительно, ведь интегрирование по пространственному углу вектора $\mathbf{p}$ приведет к некоторому тензору второго ранга, который зависит от двух индексов α и β , но всего имеется только два независимых тензора второго ранга: $\delta_{\alpha\beta}$ и $e_\alpha e_\beta$.

(тут пока не проверял, но суть понятна)

Осталось найти скалярные функции $A(s)$ и $B(s)$. Для этого вычислим интеграл два раза. Один раз для компонент $\alpha = \beta = z$ и второй раз для свертки.

Выберем ось z вдоль вектора $\mathbf{e}$. Тогда мы найдем

$$A \cdot 1 + B = \int \frac{d\Omega}{4\pi} \frac{l_2^2}{s - l e + i\delta} = \frac{1}{2} \int_0^\pi \sin \vartheta d\vartheta \frac{\cos^2 \vartheta}{s - \cos \vartheta + i\delta} = -sW(s)$$

$$3A + B = \int \frac{d\Omega}{4\pi} \frac{l_\alpha^2}{s - l e + i\delta} = \frac{1}{2} \int_0^\pi \sin \vartheta d\vartheta \frac{1}{s - \cos \vartheta + i\delta} = \frac{1 - W(s)}{s}$$

где функция $W(s)$ равна

$$W(s) = 1 - \frac{s}{2} \ln \frac{s+1}{s-1+i\delta}$$

Система из двух уравнений на $A(s)$ и $B(s)$ легко решается

$$A(s) = \frac{1 - W(s) + s^2 W(s)}{2s} = \frac{s}{2} \left(1 + \frac{1-s^2}{2s} \ln \frac{s+1}{s-1+i\delta} \right)$$

$$B(s) = \frac{-1 + W(s) - 3s^2 W(s)}{2s} = -\frac{s}{2} \left(3 + \frac{1-3s^2}{2s} \ln \frac{s+1}{s-1+i\delta} \right)$$

В результате находим диэлектрическую проницаемость $\varepsilon_{\alpha\beta}$

$$\varepsilon_{\alpha\beta}(\omega, k) = \left(1 + \frac{4\pi e^2}{\omega^2} \int d\Gamma_p s v^2 A(s) \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} \right) \delta_{\alpha\beta} + \left(\frac{4\pi e^2}{\omega^2} \int d\Gamma_p s v^2 B(s) \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} \right) \frac{k_\alpha k_\beta}{k^2}$$

появление затухания Ландау

При $s > 1$ или $v < \omega/k$ функция $W(s)$ действительная.

При $s < 1$ или $v > \omega/k$ функция $W(s)$ содержит мнимую часть $\text{Im } W = \pi s/2$.

Эта особенность, которая возникает при скорости частицы v , превышающей фазовую скорость ω/k , приводит к мнимой составляющей в диэлектрической проницаемости и специфическому затуханию в плазме затуханию Ландау.

(?? ну то есть у нас ничего не затухало, а когда мы начали увеличивать частоту, так что она превысила скорость электронов, то внезапно волны стали затухать?)

выделение продольной и поперечной компоненты

Разделим диэлектрическую проницаемость $\varepsilon_{\alpha\beta}$ на продольную и поперечную компоненты:

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

Смысл такого представления следующий. Если электрическое поле $\mathbf{E}_l = E\mathbf{k}/k$ - продольное, т.е. направлено вдоль вектора $\mathbf{k}$, то вектор электрической индукции $\mathbf{D}$ также направлен вдоль $\mathbf{E}_l$ и определяется продольной компонентой диэлектрической проницаемости

$$\mathbf{D} = \varepsilon_l \mathbf{E}_l$$

Для поперечного электрического поля $\mathbf{kE}_t = 0$.

Тогда легко проверить, что вектор электрической индукции $\mathbf{D}$ полностью определяется только поперечной компонентой диэлектрической проницаемости

$$\mathbf{D} = \varepsilon_t \mathbf{E}_t$$

Для продольной ε_l компоненты диэлектрической проницаемости находим окончательно:

$$\begin{aligned} \varepsilon_l &= 1 + \frac{4\pi e^2}{k^2} \int d\Gamma_p \frac{A(s) + B(s)}{s} \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} = \\ &= 1 - \frac{4\pi e^2}{k^2} \int \left(1 - \frac{s}{2} \ln \frac{s+1}{s-1+i\delta} \right) \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} \nu(\varepsilon) d\varepsilon; \end{aligned}$$

Аналогично для поперечной ε_t

$$\begin{aligned} \varepsilon_t &= 1 + \frac{4\pi e^2}{k^2} \int d\Gamma_p \frac{A(s)}{s} \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} = \\ &= 1 + \frac{2\pi e^2}{k^2} \int \left(1 + \frac{1-s^2}{2s} \ln \frac{s+1}{s-1+i\delta} \right) \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} \nu(\varepsilon) d\varepsilon. \end{aligned}$$

Здесь $\nu(\varepsilon)$ - плотность состояний, т.е. $d\Gamma_p = \nu(\varepsilon)d\varepsilon$, скорость электронов $v = v(\varepsilon)$ и параметр s равен $s = \omega/vk$.

15.8.4 Spectrum and Damping

(см Бурмистров задача 26 про плазму. до этого еще какая-то важная теория должна быть)

(кст, еще есть Левитов Шитов задача 44, там ферми жидкость и поляризационный оператор, но это в другом уже месте)

(кстати, в дз это вроде не нужно)

анализ продольной компоненты

Начнем с анализа продольной компоненты диэлектрической восприимчивости $\varepsilon_l(\omega, \mathbf{k})$.

В области высоких $\omega \gg vk$ частот мы можем разложить подынтегральное выражение по $1/s \ll 1$ и найти приближенно

$$\varepsilon_l(\omega \gg vk) = 1 + \frac{4\pi e^2}{\omega^2} \int_0^\infty \left(\frac{1}{3s^2} + \frac{1}{5s^4} + \dots \right) \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} \nu(\varepsilon) d\varepsilon = \quad (15.2)$$

$$= 1 + \frac{4\pi e^2}{3\omega^2} \int_0^\infty v^2 \left(1 + \frac{3}{5} \frac{k^2 v^2}{\omega^2} + \dots \right) \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} \nu(\varepsilon) d\varepsilon \quad (15.3)$$

Для дальнейших преобразований мы воспользуемся следующим соотношением

$$\int \varepsilon^r \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} d\Gamma_p = \int_0^\infty \varepsilon^r \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} \nu(\varepsilon) d\varepsilon = - \left(r + \frac{1}{2} \right) \int_0^\infty \varepsilon^{r-1} n_0(\varepsilon) d\Gamma_p =$$

где $r > -1/2$, которое получается за счет интегрирования по частям и учета того, что для спектра $\varepsilon = mv^2/2$ плотность состояний $\nu(\varepsilon) \sim \varepsilon^{1/2}$.

(? у меня почти получилось доказать это)

Заменим в выражении $\varepsilon_l(\omega \gg vk)$ скорость v на ε , домножив и разделив на $m/2$, и запишем выражение через так называемую плазменную частоту $\Omega^2 = \frac{4\pi n e^2}{m}$:

$$\varepsilon_l(\omega \gg vk) \approx 1 - \frac{\Omega^2}{\omega^2} \left(1 + \frac{k^2 \langle v^2 \rangle}{\omega^2} \right);$$

Здесь в плазменной частоте плотность электронов n введена как обычно $n = \int d\Gamma_p n_0(\varepsilon)$, а угловые скобки обозначают здесь и ниже следующее усреднение с функцией распределения n_0 :

$$\langle (\dots) \rangle = \frac{\int d\Gamma_p (\dots) n_0(\varepsilon)}{\int d\Gamma_p n_0(\varepsilon)}.$$

мнимая часть продольной компоненты диэлектрической проницаемости

(? тут я не знаю, откуда формула ниже, ну и ладно)

Вычисление мнимой части продольной компоненты диэлектрической проницаемости удастся провести в аналитическом виде

$$\text{Im } \varepsilon_l = -\pi \frac{4\pi e^2}{k^2} \int_{v>\omega/k} \frac{\omega}{2vk} \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} d\Gamma_p = \omega \frac{\Omega^2}{k^2} \frac{m^3}{nk} \frac{n_0(m\omega^2/2k^2)}{2\pi\hbar^3}$$

(??)

наверное, это значит, что затухание именно такой содержит множитель.

или еще где-то это нужно.

область низких частот

Для области низких ($\omega \ll vk$) частот, используя разложение подынтегрального выражения при $s \ll 1$, получим

$$\varepsilon_l(\omega \ll vk) \approx 1 - \frac{4\pi e^2}{k^2} \int d\Gamma_p \left(1 + i \frac{\pi s}{2} \right) \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} = 1 + \frac{\Omega^2}{k^2} \left\langle \frac{1}{v^2} \right\rangle + i\omega \frac{\Omega^2}{k^2} \frac{m^3}{nk} \frac{n_{0(\varepsilon=0)}}{2\pi\hbar^3}$$

дебаевское экранирование

(? суть не оч понял)

Суть его в том, что потенциал поля спадает по экспоненциальному закону, с показателем равным обратному так называемому радиусу Дебая.

Действительно.

Экранирование электрического заряда в плазме определяется статической диэлектрической проницаемостью, равной

$$\varepsilon_l(0, k) = 1 + \frac{1}{k^2 r_D^2},$$

где введен дебаевский радиус $r_D^{-2} = \Omega^2 \langle \frac{1}{v^2} \rangle$.

Действительно, фурье-компонента потенциала φ_k для точечного заряда величиной q равна

$$\varphi_k = \frac{4\pi q}{k^2 \varepsilon(0, k)} = \frac{4\pi q}{k^2 + r_D^{-2}}$$

Соответствующее пространственное поведение потенциала отвечает дебаевскому экранированию

$$\varphi(r) = \frac{q}{r} e^{-r/r_D}$$

Простое вычисление дает

$$r_D^2 = \begin{cases} \frac{T}{4\pi n e^2}, & T \gg \varepsilon_F \quad (\text{невыврожденная плазма}) \\ \frac{\varepsilon_F}{6\pi n e^2} = \frac{1}{4\pi e^2 \nu(\varepsilon_F)}, & T \ll \varepsilon_F \quad (\text{вырожденная плазма}), \end{cases}$$

где ε_F - энергия Ферми и T - температура.

условия существования продольных колебаний

Рассмотрим возможность существования продольных колебаний в плазме.

Если электрическое поле $\mathbf{E}_l(\mathbf{r}, t) \sim \mathbf{E}_l \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r} - i\omega t)$ - продольное, т.е. $\mathbf{E}_l = E\mathbf{k}/k$, то имеем $\text{rot } \mathbf{E}_l = i[\mathbf{k} \times \mathbf{E}_l] = 0$ и, следовательно, $\partial \mathbf{B}/\partial t = -i\omega \mathbf{B} = 0$.

Значит, магнитное поле отсутствует $\mathbf{B} = 0$, а значит $\text{rot } \mathbf{B} = 0$ дает $\partial \mathbf{D}/\partial t = -i\omega \mathbf{D} = 0$, т.е. $\mathbf{D} = 0$.

С другой стороны, для продольного поля вектор электрической индукции равен

$$\mathbf{D} = \varepsilon_l(\omega, \mathbf{k}) \mathbf{E}_l = 0.$$

Получаем условие нетривиальных решений:

$$\varepsilon_l(\omega, k) = 0$$

которое определяет дисперсию продольных плазменных колебаний.

спектр плазмонов квадратичный

Подставляя в это уравнение продольную диэлектрическую проницаемость, найденную выше, имеем

$$1 - \frac{\Omega^2}{\omega^2} \left(1 + \frac{k^2 \langle v^2 \rangle}{\omega^2} \right) = 0 \quad \text{или} \quad \omega^2 \approx \Omega^2 + k^2 \langle v^2 \rangle \quad \text{и} \quad \omega \approx \Omega + \frac{k^2 \langle v^2 \rangle}{2}$$

Второе слагаемое, зависящее от волнового вектора k , мало по сравнению с плазменной частотой Ω . Таким образом, в плазме существуют слабодисперсионные продольные плазменные (ленгмюровские) волны или плазмоны.

условие существования поперечных колебаний

оно имеет вид:

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

действительно.

Поперечные колебания электрического поля $\mathbf{E}_t(\mathbf{r}, t) \sim \mathbf{E}_t \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r} - i\omega t)$ подразумевают равенство $k\mathbf{E}_t = 0$. Так как $\mathbf{D}_t = \varepsilon_t \mathbf{E}_t$, то и для вектора индукции также будет $k\mathbf{D}_t = 0$.

Согласно уравнениям Максвелла для фурье-компонент электрического и магнитного полей мы найдем

$$\begin{cases} \text{rot } \mathbf{E}_t = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, & \text{div } \mathbf{B} = 0, \\ \text{rot } \mathbf{B} = \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{D}_t}{\partial t}, & \text{div } \mathbf{D}_t = 0, \end{cases} \implies \begin{cases} \mathbf{k} \times \mathbf{E}_t = \frac{\omega}{c} \mathbf{B}, & \mathbf{k} \mathbf{B} = 0 \\ \mathbf{k} \times \mathbf{B} = -\frac{\omega}{c} \mathbf{D}_t, & \mathbf{k} \mathbf{D}_t = 0. \end{cases}$$

Отсюда, исключая магнитное поле $\mathbf{B}$, получим

$$\mathbf{k} \times [\mathbf{k} \times \mathbf{E}_t] = \mathbf{k} (k E_t) - k^2 \mathbf{E}_t = \frac{\omega}{c} [\mathbf{k} \times \mathbf{B}] = -\frac{\omega^2}{c^2} \mathbf{D}_t = -\frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon_t \mathbf{E}_t$$

Чтобы существовало нетривиальное решение $\mathbf{E}_t \neq 0$, необходимо удовлетворить следующее дисперсионное уравнение

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

спектр высокочастотных поперечных высокочастотных колебаний

Оказывается, они имеют такую же зависимость, как и в вакууме.

Для высокочастотных ($\omega \gg vk$) поперечных колебаний учет пространственной дисперсии в диэлектрической проницаемости ε_t не существен в силу $v \ll c$ и можно положить $\varepsilon_t(\omega, k) \approx \varepsilon_t(\omega, 0) = 1 - \Omega^2/\omega^2$.

Это дает

$$\omega^2 = \Omega^2 + c^2 k^2$$

При $\omega \gg \Omega$ влияние плазмы не сказывается и $\omega = ck$ как в вакууме. Частоты $\omega < \Omega$ отвечают мнимым значениям волнового вектора k .

Физически это означает, колебания с такими частотами затухают и не могут распространяться вглубь плазмы.

мнимая часть поперечной компоненты диэлектрической проницаемости

В заключение выпишем мнимую часть поперечной компоненты диэлектрической проницаемости

$$\text{Im } \varepsilon_t = -\pi \frac{2\pi e^2}{k^2} \int_{v>\omega/k} \frac{v^2 k^2 - \omega^2}{2\omega v k} \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} d\Gamma_p = \frac{\pi \Omega^2}{2\omega k} \left\langle \frac{1}{v} \right\rangle \frac{m\omega^2/2k^2}{\int_0^\infty n_0(\varepsilon) d\varepsilon}.$$

В области низких ($\omega \ll vk$) частот действительная часть поперечной компоненты диэлектрической проницаемости ε_t приближенно равна

$$\text{Re } \varepsilon_t(\omega \ll vk) \approx 1 - \frac{1}{k^2 r_D^2}$$

Основной вклад в поперечную компоненту диэлектрической проницаемости ε_t связан с ее мнимой частью, которую можно оценить как

$$\text{Im } \varepsilon_t(\omega \ll vk) \approx \frac{\pi \Omega^2}{2 \omega k} \left\langle \frac{1}{v} \right\rangle \sim \frac{\Omega}{\omega k r_D}$$

Подстановка приближенного значения ε_t в дисперсионное уравнение дает

$$k^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \left(i \frac{\pi \Omega^2}{2 \omega k} \left\langle \frac{1}{v} \right\rangle \right)$$

Отсюда находим закон для дисперсии длинноволновых ($kr_D \ll 1$) поперечных колебаний

$$\omega = -i \frac{2}{\pi} \frac{c^2 k^3}{\Omega^2 \langle v^{-1} \rangle}$$

Чисто мнимое значение частоты означает, что такие плазменные колебания являются апериодическими и сильно затухающими.

15.8.5 Typical Model of Plasma Oscillations

Задача 44 левитов шитов, часть задачи 16 дз на + балл, пока не готов ее рассказывать.

итоговые свойства модели

закон дисперсии при малых k есть

$$\omega^2(\mathbf{k}) = \omega_0^2 + \frac{3}{5} \mathbf{k}^2 v_F^2 + O\left(\frac{(kv_F)^4}{\omega_0^4}\right)$$

эффект динамической экранировки затравочного взаимодействия

Рассмотрим диаграммы на рис. ниже при конечной передаваемой частоте ω и импульсе $\mathbf{k}$.

Говорят, что сумма этих диаграмм описывает эффект динамической экранировки затравочного взаимодействия $V_{\mathbf{k}}$, изображенного волнистой линией.

Закон дисперсии коллективных возбуждений $\omega(\mathbf{k})$ определяется полюсами заэкранированного взаимодействия.

поляризационный оператор

(??? что он есть такое???)

Найдем поляризационный оператор $\Pi(\omega, \mathbf{k})$ при $|\mathbf{k}| \ll p_0, \omega \ll E_F$.

Считая затравочное взаимодействие кулоновским, $V_{\mathbf{k}} = 4\pi e^2/\mathbf{k}^2$, просуммируем ряд и получим заэкранированное взаимодействие $V_{\omega, \mathbf{k}}$.

Покажем, что в этом приближении закон дисперсии плазменных волн $\omega(\mathbf{k})$ дается соотношением (8.14), полученным из кинетического уравнения ферми-жидкости.

Определите поведение $\omega(\mathbf{k})$ при малых и больших $\mathbf{k}$.

Этот ряд суммируется, как геометрическая прогрессия:

$$V_{\omega, \mathbf{k}} = V_{\mathbf{k}} + V_{\mathbf{k}}^2 \Pi(\omega, \mathbf{k}) + V_{\mathbf{k}}^3 \Pi^2(\omega, \mathbf{k}) + \dots = \frac{V_{\mathbf{k}}}{1 - V_{\mathbf{k}} \Pi(\omega, \mathbf{k})}$$

Поляризационный оператор есть (???)

$$\Pi(\omega, \mathbf{k}) = 2i \int G(\varepsilon_-, \mathbf{p}_-) G(\varepsilon_+, \mathbf{p}_+) \frac{d^3 p d\varepsilon}{(2\pi\hbar)^4}$$

где $\varepsilon_{\pm} = \varepsilon \pm \omega/2, \mathbf{p}_{\pm} = \mathbf{p} \pm \mathbf{k}/2$, а множитель 2 возникает при суммировании по спинам.

Интегрируя по частоте ε , находим

$$\Pi(\omega, \mathbf{k}) = 2 \int \frac{n(\mathbf{p}_-) - n(\mathbf{p}_+)}{\omega - \xi(\mathbf{p}_+) + \xi(\mathbf{p}_-)} \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3},$$

где $n(\mathbf{p})$ - распределение Ферми (ср. с выводом (7.85)).

Рассмотрим случай малых $|\mathbf{k}| \ll p_0$.

Приближенно можно записать

$$n(\mathbf{p}_-) - n(\mathbf{p}_+) = k \cos \theta \delta(|\mathbf{p}| - p_0)$$

где θ - угол между векторами $\mathbf{p}$ и $\mathbf{k}$.

Теперь из-за δ -функции интеграл в (8.44) оказывается ограничен на поверхность ферми-сферы:

$$\Pi(\omega, \mathbf{k}) = 2\nu_0 \int_0^\pi \frac{k v_F \cos \theta}{\omega - k v_F \cos \theta} d \cos \theta$$

Интегрируя по θ , находим

$$\Pi(\omega, \mathbf{k}) = 2\nu_0 \left(\frac{s}{2} \ln \frac{s+1}{s-1} - 1 \right)$$

где $s = \omega/kv_F$.

Мы убеждаемся, что уравнение $V_{\mathbf{k}}\Pi(\omega, \mathbf{k}) = 1$, определяющее полюс заэкранированного взаимодействия $V_{\omega, \mathbf{k}}$, тождественно соотношению (8.14), выведенному из кинетического уравнения ферми-жидкости.

Закон дисперсии плазмона при малых k можно получить, разложив выражение (8.47) по $1/s$:

$$\Pi(\omega, \mathbf{k}) = 2\nu_0 \left(\frac{1}{3s^2} + \frac{1}{5s^4} + \dots \right)$$

Тогда уравнение $V_{\mathbf{k}}\Pi(\omega, \mathbf{k}) = 1$ принимает вид

$$\frac{\omega_0^2}{\omega^2} \left(1 + \frac{3}{5} \frac{k^2 v_F^2}{\omega^2} \right) = 1$$

где $\omega_0^2 = 4\pi n e^2 / m$ ($n = p_0^3 / (3\pi^2)$ - плотность частиц).

Следовательно, закон дисперсии при малых k есть

$$\omega^2(\mathbf{k}) = \omega_0^2 + \frac{3}{5} k^2 v_F^2 + O\left(\frac{(kv_F)^4}{\omega_0^4}\right)$$

Закон дисперсии при больших k можно определить, заметив, что выражение (8.47) стремится к бесконечности при $s \rightarrow 1$.

Поэтому уравнение $V_{\mathbf{k}}\Pi(s) = 1$ имеет решение при произвольно большом $\mathbf{k}$, причем $s \rightarrow 1$ при $k \rightarrow \infty$.

Это означает, что $\omega(\mathbf{k})$ приближается к $v_F k$ при больших k , все время оставаясь выше границы квазичастичного континуума $\omega(k) = v_F k$.

Точка окончания спектра

Оказывается, что закон дисперсии плазменных волн заканчивается при некотором $k_{\max}$, вливаясь в континуум квазичастичных возбуждений.

Чтобы исследовать этот эффект с помощью диаграмм, показанных на рис.

8.3, необходимо найти поляризационный оператор более точно, чем это было сделано в части а).

Найдем поляризационный оператор при произвольных ω и k .

Решая уравнение $V_{\mathbf{k}}\Pi(\omega, \mathbf{k}) = 1$, определим точку окончания спектра $k_{\max}, \omega_{\max}$.

Дело в том, что поляризационный оператор (8.44) на самом деле остается конечным на границе континуума.

Расходимость же $\Pi(s \rightarrow 1) \rightarrow \infty$, полученная в части а), есть следствие принятого приближения (8.45).

Конечность поляризационного оператора приводит к тому, что уравнение $V_{\mathbf{k}}\Pi(\omega, \mathbf{k}) = 1$ не имеет решений за пределами квазичастичного континуума при достаточно больших $|\mathbf{k}|$.

Найдем $\Pi(\omega, \mathbf{k})$ точно, не используя приближение (8.45).

Для этого перепишем выражение (8.44) в виде

$$\Pi(\omega, \mathbf{k}) = 2 \int \left(\frac{n(\mathbf{p})}{\omega - \mathbf{k}^2/2m - \mathbf{k}\mathbf{v}} - \frac{n(\mathbf{p})}{\omega + \mathbf{k}^2/2m - \mathbf{k}\mathbf{v}} \right) \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3}$$

где $\mathbf{v} = \mathbf{p}/m$.

В этом выражении удобно сначала проинтегрировать по компонентам $\mathbf{p}$, перпендикулярным вектору $\mathbf{k}$.

Получается

$$\Pi(\omega, \mathbf{k}) = 2 \int_{-p_0}^{p_0} \left(\frac{\pi(p_0^2 - p_x^2)}{\omega - k^2/2m - kp_x/m} - \frac{\pi(p_0^2 - p_x^2)}{\omega + k^2/2m - kp_x/m} \right) \frac{dp_x}{(2\pi\hbar)^3}$$

где p_x есть компонента $\mathbf{p}$ вдоль $\mathbf{k}$.

Оставшееся интегрирование по p_x выполняется элементарно.

Результат удобно записать в виде

$$\Pi(\omega, \mathbf{k}) = \frac{\nu}{8a} (F(s-a) - F(s+a)), \quad a = \frac{k}{2p_0}, s = \frac{\omega}{v_F k},$$

где $F(u) = \int_{-1}^1 \frac{1-x^2}{u-x} dx = 2u + (1-u^2) \ln \frac{u+1}{u-1}$.

Выражение выше определяет точный поляризационный оператор.

Проверим, что при $k \ll p_0$ получается выражение (8.47), найденное выше.

Действительно, при $a = k/2p_0 \rightarrow 0$ выражение (8.53) упрощается:

$$\Pi(\omega, \mathbf{k}) = -\frac{\nu}{4} F'(s) = -\frac{\nu}{4} \left(4 - 2s \ln \frac{s+1}{s-1} \right)$$

что совпадает с (8.47).

Теперь воспользуемся выражениями (8.53), (8.54) и определим точку окончания спектра плазмонов.

Граница квазичастичного континуума есть $\omega = v_F k + k^2/2m$.

Это условие можно записать как $s - a = 1$.

Поэтому точка окончания спектра, если таковая имеется, должна удовлетворять уравнению

$$\frac{\nu}{8a} (F(1) - F(1+2a)) = \frac{k^2}{4\pi e^2}$$

Это уравнение нетрудно переписать, введя $x^2 = 4\pi e^2 \nu$:

$$(1+a) \ln \frac{1+a}{a} - 1 = \frac{2k^2}{x^2}$$

Покажем, что в интервале $0 < a \leq 1$ у уравнения (8.57) всегда имеется ровно одно решение.

Действительно, левая часть (8.57) при $0 < a < 0.5$ монотонно убывает от ∞ до значения порядка единицы, в то время как правая часть (8.57) монотонно возрастает от 0 до значения порядка p_0^2/x^2 .

В то же время $e^2/\hbar v_F \ll 1$, поскольку мы занимаемся теорией возмущений в пределе большой плотности.

Поэтому $p_0^2/x^2 \gg 1$, и значит у уравнения (8.57) имеется корень, причем ровно один.

Из сказанного также следует, что решение лежит в области $a \ll 1$.

Поэтому уравнение (8.57) можно упростить, отбросив в левой части малые члены.

Получаем $\ln(2p_0/ek) = 2k^2/x^2$, где $e = 2,71828\dots$

С логарифмической точностью решение этого уравнения есть

$$k_{\max} = x \left(\frac{1}{2} \ln \frac{p_0}{x} \right)^{1/2}$$

Находим частоту при $k = k_{\max}$:

$$\omega_{\max} = v_F k_{\max} = \omega_0 \left(\frac{3}{2} \ln \frac{p_0}{x} \right)^{1/2}$$

При $e^2/\hbar v_F \ll 1$ частота в точке окончания спектра $\omega_0 \leq \omega_{\max} \ll \varepsilon_F$.

Подчеркнем еще раз, что ключевым обстоятельством является отсутствие расходимости $\Pi(\omega, \mathbf{k})$ на границе квазичастичного спектра.

Оценить величину поляризационного оператора можно и не вычисляя $\Pi(\omega = v_F |\mathbf{k}|)$ точно.

Достаточно заметить, что ширина пояса, в котором сосредоточена функция $n(\mathbf{p}_-) - n(\mathbf{p}_+)$ при малых $\mathbf{k}$ порядка $|\mathbf{k}|$.

Поэтому δ -функция в (8.45) имеет ненулевую «ширину» порядка $|\mathbf{k}|$.

В результате, при $s = \omega/v_F k = 1$ логарифмическая расходимость выражения (8.47) обрезается на $s - 1 \approx k/p_0$, и получается $\Pi(\omega = v_F |\mathbf{k}|) = \nu_0 \ln(p_0/k)$.

Нетрудно видеть, что уравнение $V_{\mathbf{k}} \Pi = 1$ с логарифмической точностью совпадает с (8.57).

$\omega(\mathbf{k})$ имеет известный вид

(????)

Покажем, что уравнение для частоты плазменных волн $\omega(\mathbf{k})$ совпадает с соотношением

$$1 = V_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{p} \in R_k} \frac{2\omega_{\mathbf{p},\mathbf{k}}}{\omega^2 - \omega_{\mathbf{p},\mathbf{k}}^2},$$

полученным в результате диагонализации гамильтониана $\mathcal{H}_{\text{РПА}}$ Электрон-дырочных пар.

Рассмотрим теперь коллективные моды, пользуясь представлением осцилляторов электрон-дырочных пар.

Гамильтониан $\mathcal{H}_{\text{РПА}}$, даваемый суммой (8.23) и (8.24), квадратичен.

Поэтому диагонализация производится так же, как в задаче о многомерном классическом осцилляторе.

Уравнения на собственные значения имеют вид

$$\omega^2 \varphi_{\mathbf{p},\mathbf{k}} = \omega_{\mathbf{p},\mathbf{k}}^2 \varphi_{\mathbf{p},\mathbf{k}} + 2\omega_{\mathbf{p},\mathbf{k}}^{1/2} V_{\mathbf{k}} \left(\sum_{\mathbf{p}' \in R_k} \omega_{\mathbf{p}',\mathbf{k}}^{1/2} \varphi_{\mathbf{p}',\mathbf{k}} \right)$$

Находим

$$\varphi_{\mathbf{p},\mathbf{k}} = \frac{2\omega_{\mathbf{p},\mathbf{k}}^{1/2}}{\omega^2 - \omega_{\mathbf{p},\mathbf{k}}^2} V_{\mathbf{k}} \left(\sum_{\mathbf{p}' \in R_k} \omega_{\mathbf{p}',\mathbf{k}}^{1/2} \varphi_{\mathbf{p}',\mathbf{k}} \right)$$

Умножая эти равенства на $\omega_{\mathbf{p},\mathbf{k}}^{1/2}$ и суммируя по $\mathbf{k}, \mathbf{p}$ и спинам, получаем уравнение самосогласования:

$$1 = 2V_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{p} \in R_k} \frac{2\omega_{\mathbf{p},\mathbf{k}}}{\omega^2 - \omega_{\mathbf{p},\mathbf{k}}^2}$$

(коэффициент 2 перед $V_{\mathbf{k}}$ - спиновое вырождение).

Итак, мы убедились в справедливости соотношения (8.26).

Проверим теперь, что оно совпадает с $1 = V_{\mathbf{k}} \Pi(\omega, \mathbf{k})$.

Для этого в выражении (8.44) для поляризационного оператора разделим область интегрирования по $\mathbf{p}$ на две под-области: $n(\mathbf{p}_-) > n(\mathbf{p}_+) = 0$ и $n(\mathbf{p}_-) < n(\mathbf{p}_+) = 1$.

Простым сдвигом $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} + \mathbf{k}/2$ в первом случае, и $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} - \mathbf{k}/2$ - во втором, получаем области R_k и R_{-k} .

Делая в интеграле по R_{-k} замену $\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}, \mathbf{p} \rightarrow -\mathbf{p}$, не меняющую результата, приводим поляризационный оператор (8.44) к виду:

$$\Pi(\omega, \mathbf{k}) = 2 \sum_{\mathbf{p} \in R_k} \left(\frac{1}{\omega - \omega_{\mathbf{p}, \mathbf{k}}} - \frac{1}{\omega + \omega_{\mathbf{p}, \mathbf{k}}} \right)$$

Таким образом, действительно, соотношение $1 = V_{\mathbf{k}} \Pi(\omega, \mathbf{k})$, полученное суммированием диаграмм, есть не что иное, как (8.62).

В заключение отметим, что хотя точный поляризационный оператор (8.53), (8.54) и может оказаться полезным в некоторых случаях, обычно бывает совершенно достаточно пользоваться выражением (8.47), соответствующим приближению кинетического уравнения ферми-жидкости.

15.8.6 Overview of Applications of Plasma Kinetics

(????????????????)

задача о вхождении ракеты в атмосферу

говорят, там как раз интеграл столкновений и рассматриваем

16 Other about Plasma

(I'll write here not so useful chapters from Landau's book)

Part VI

Kinetics in Solid State Physics

(!!!! очень важно проверить, чтобы не было чего-то лишнего!!!! потому что тут много написано, но это все больше к твердому телу относится, а не к кинетике. Соответственно, отсюда это удалить нужно!)

17 Typical Phenomena in Solid State Physics

17.1 VII Insulators by Landau

17.1.1 §66. Interaction of phonons

The physical nature of transport processes such as thermal and electrical conduction in gases consists in transfer by the thermal motion of the gas particles: in solids, the particles are replaced by quasi-particles. In going on to study these processes, we shall begin with thermal conduction in non-magnetic insulators. The relative simplicity of the physical picture here, as compared with transport processes in solids of other kinds, arises from the presence of quasi-particles of only one sort, namely phonons.

The concept of free phonons is the result of quantization of the vibrational motion of atoms in the crystal lattice in the harmonic approximation, i.e. with only the quadratic terms (in the displacements of the atoms) included in the Hamiltonian; see SP 1, §72. The various phonon interaction processes result when terms of higher orders of smallness are considered: the anharmonic terms of the third and subsequent orders in the displacements. †

The first anharmonic (the cubic) terms in the classical lattice energy are

$$H^{(3)} = \frac{1}{6} \sum_{(n_1, s)} \Lambda_{\alpha|\beta\gamma}^{s_1 s_2 s_3} (n_1 - n_3, n_2 - n_3) U_{s_1 \alpha} (n_1) U_{s_2 \beta} (n_2) U_{s_3 \gamma} (n_3). \quad (66.1)$$

Here $\mathbf{U}_s(\mathbf{n})$ are the atomic displacement vectors in the lattice; α, β, γ are vector suffixes taking the values x, y, z ; s_1, s_2, s_3 number the atoms in the unit cell; n_1, n_2, n_3 are integral "vectors" giving the position of the cell in the lattice; $(\mathbf{n}, s)$ under the summation sign denotes summation over all n and s . Because the crystal is homogeneous, the functions Λ depend only on the relative positions $n_1 - n_3, n_2 - n_3$ of the cells, not on their absolute positions in the lattice.

The second-quantized Hamiltonian is found by replacing the displacement vectors in (66.1) by the operators $\hat{\mathbf{U}}_s(n)$ expressed in terms of the creation and annihilation operators $\hat{\mathbf{c}}_{\mathbf{k}g}^+, \hat{\mathbf{c}}_{\mathbf{k}g}$ for phonons of type g (i.e. branch g of the phonon spectrum) with quasi-momentum $\mathbf{k}$:

$$\hat{\mathbf{U}}_s(n) = \sum_{g-\mathbf{k}} [2M\mathcal{N}\omega_g(\mathbf{k})]^{-1/2} \left\{ \hat{\mathbf{c}}_{\mathbf{k}g} e_s^{(g)}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_n} + \hat{\mathbf{c}}_{\mathbf{k}g}^+ e_s^{(g)*}(\mathbf{k}) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_n} \right\}, \quad (66.2)$$

where $\sqrt{\mathcal{N}}$ is the number of cells in the lattice, M the total mass of the atoms in the cell, $e_s^{(R)}(\mathbf{k})$ the phonon polarization vectors, and $\omega_g(\mathbf{k})$ the energy of phonons of type g . † The substitution gives rise to terms which contain the operators $\hat{\mathbf{c}}$ and $\hat{\mathbf{c}}^+$ in sets of three. These terms represent processes involving three phonons: products of the form $\hat{\mathbf{c}}^+ \hat{\mathbf{c}}^+ \hat{\mathbf{c}}$ for the decay of one phonon into two, and $\hat{\mathbf{c}}^+ \hat{\mathbf{c}} \hat{\mathbf{c}}$ for the coalescence of two colliding phonons into one; terms

¹The need to take account of the anharmonicity of atomic vibrations in the lattice in considering thermal conduction in a crystal was first noted by P. Debye (1914) and M. Born (1914).

$\hat{c}\hat{c}\hat{c}$ and $\hat{c}^+\hat{c}^+\hat{c}^+$ would correspond to processes that are prohibited by the law of conservation of energy.

Let us write down, for example, the terms corresponding to the decay of a phonon k_1, g_1 into two phonons k_2, g_2 and k_3, g_3 . Changing in (66.1) from summation over n_1, n_2, n_3 to summation over $\nu_1 = n_1 - n_3, \nu_2 = n_2 - n_3, n_3$, we can put these terms in the form

$$\hat{H}_{\text{dec}}^{(3)} = \Omega \frac{\hat{c}_1 \hat{c}_2^\dagger \hat{c}_3^+}{\mathcal{N}^{3/2} (\omega_1 \omega_2 \omega_3)^{1/2}} \sum_{n_3} \exp \{i (k_1 - k_2 - k_3) \cdot r_{n_3}\}. \quad (66.3)$$

where

$$\Omega = (2M)^{-3/2} \sum_{\nu, s} \Lambda_{\alpha+\gamma}^{s_1 \kappa_2 s_1} (\nu_1, \nu_2) e_{1\alpha} e_{2\beta}^* e_3^* \exp \{i (\mathbf{k}_1, \mathbf{r}_{\nu_1} - \mathbf{k}_2, \mathbf{r}_{\nu_2})\}, \quad (66.4)$$

$$\hat{c}_1 \equiv \hat{c}_{\mathbf{k}_1 k_1}, \quad \omega_1 \equiv \omega_{\nu_1}(\mathbf{k}_1), \quad \mathbf{e}_1 \equiv \mathbf{e}_{\gamma_1}^{(k_1)}(\mathbf{k}_1), \dots$$

The exponential factor is separated in (66.3) which depends on the absolute position n_3 of the cell in the lattice. Summation of this factor over all n_3 gives N if $k_1 - k_2 - k_1$ is equal to any reciprocal lattice period b ; otherwise, it is zero. Hence

$$\hat{H}_{\text{dec}}^{(3)} = \Omega \frac{\hat{c}_1 \hat{c}_2^\dagger \hat{c}_3^+}{\hat{\mathcal{N}}^{1/2} (\omega_1 \omega_2 \omega_1)^{1/2}}, \quad (66.5)$$

and the phonon quasi-momenta satisfy the conservation law

$$k_1 = k_2 + k_3 + b. \quad (66.6)$$

The condition (66.6) is to be regarded as an equation giving the value of, say, the quasi-momentum $\mathbf{k}_3$ from specified values of $\mathbf{k}_1$ and $\mathbf{k}_2$. The latter have to be taken within some one chosen unit cell of the reciprocal lattice (including all the physically different values of the quasi-momentum), and we have to verify that $\mathbf{k}_3$ is also in that cell. This last condition determines the necessary value of $\mathbf{b}$ in (66.6), and does so unambiguously. For, if with specified $\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2$ and $\mathbf{b}$ the vector $\mathbf{k}_3$ lies in the chosen cell, then any change in $\mathbf{b}$ will certainly bring $\mathbf{k}_3$ outside that cell. Processes (in this case, phonon decay) for which the law of conservation of quasi-momentum involves a non-zero vector $\mathbf{b}$ are called Umklapp processes, in contrast to normal processes, for which $\mathbf{b} = 0$. Note that the difference between these two classes of processes is to some extent conventional: any particular process may be of either class, depending on the choice of the base cell. It is important, however,

that no choice can make b zero simultaneously for all possible processes. It is convenient to choose the base cell of the reciprocal lattice so that the point $\mathbf{k} = 0$ (infinite wavelength) is at its centre; this will be assumed henceforward. With this choice, low values of the quasi-momentum ($k \ll 1/d$, where d is the lattice constant) correspond to all low-frequency phonons, and all processes involving only low-frequency phonons are normal processes. † Large values of the quasi-momentum ($k \sim 1/d$) correspond to short-wavelength phonons with high energy (of the order of the Debye temperature Θ).

Let us return to the phonon decay process. According to the general principles of quantum mechanics (see *QM* (43.1)), the probability of a decay in which the quasi-momentum of one of the two newly formed phonons lies in the range $d^3 k_2$ is given by the square of the corresponding matrix element of the perturbation operator (66.5):

[†]In this chapter, we use units such that $\hbar = 1$. The dimensions of the momentum and the wave vector are then the same. and those of the energy and the frequency are the same.

$$dW = 2\pi \left| \langle N_1 - 1, N_2 + 1, N_3 + 1 | H^{(3)} | N_1, N_2, N_3 \rangle \right|^2 \times \\ \times \delta(\omega_1 - \omega_2 - \omega_3) \mathcal{V} d^3 k_2 / (2\pi)^3 \quad (66.7)$$

where $N_1 \equiv N_{k_1 k_1}$, N_2, N_3 are the phonon occupation numbers in the initial state of the crystal. The matrix elements of the phonon creation and annihilation operators are given by

$$\langle N - 1 | \hat{c} | N \rangle = \langle N | \hat{c}^\dagger | N - 1 \rangle = \sqrt{N}. \quad (66.8)$$

We thus obtain the decay probability in the form

$$dW = w N_1 (N_2 + 1) (N_3 + 1) \delta(\omega_1 - \omega_2 - \omega_3) d^3 k_2 / (2\pi)^3 \quad (66.9)$$

where

$$w = w(g_2 \mathbf{k}_2, g_3 \mathbf{k}_3; g_1 \mathbf{k}_1) = 2\pi v |\Omega|^2 / \omega_1 \omega_2 \omega_3, \quad (66.10)$$

and $v = \tau/\mathcal{N}$ is the volume of the crystal lattice cell. The probability of the processes is therefore proportional to the number N_1 of initial phonons in the initial state of the crystal, and also to the numbers $N_2 + 1$ and $N_3 + 1$ of final phonons in the final state. The latter property is related to the Bose statistics obeyed by the phonons, and is true of all processes involving bosons. ‡

The process inverse to decay is the coalescence of two photons $\mathbf{k}_2$ and $\mathbf{k}_3$ to form one phonon $\mathbf{k}_1$. We can easily show that the terms in the Hamiltonian that are responsible for this process differ from (66.5) in that the c -operators in the numerator are replaced by $\hat{c}_1^\dagger \hat{c}_2 \hat{c}_3$, and Ω by Ω^* . The probability of this process is therefore given by a formula which differs from (66.9) only as regards the

N -factors:

$$dW = w N_2 N_3 (N_1 + 1) \delta(\omega_1 - \omega_2 - \omega_3) d^3 k_2 / (2\pi)^3 \quad (66.11)$$

The functions w here and in (66.9) are the same, in accordance with the general rule that in the Born approximation (the first approximation of perturbation theory) the probabilities of direct and reverse scattering events are equal; see QM, § 126 .

The branches of the phonon spectrum always include three acoustic branches, for which the energy tends to zero as $\mathbf{k} \rightarrow 0$; for long-wavelength (small $\mathbf{k}$) acoustic phonons, the function $\omega(k)$ is linear. The behaviour of the function w in (66.10) for such phonons will be important below. It can be determined by noting the property of the coefficients Λ in the Hamiltonian (66.1) which expresses the fact that a simple displacement of the crystal as a whole leaves its energy unchanged, whether or not the crystal is deformed. This means that the energy $H^{(3)}$ must be unaffected if any of the factors $\mathbf{U}_s(n)$ in it is replaced by $\mathbf{U}_s + \mathbf{a}$ with a vector $\mathbf{a}$ that is independent of n and s . For this to be so, we must have

$$\sum_{\mathbf{n}_1 \cdot \mathbf{s}_1} \Lambda_{\alpha\beta\gamma}^{s_1 s_2 s_3}(\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2, \mathbf{n}_3) = 0 \quad (66.12)$$

where the summation is over at least one pair of variables $\mathbf{n}_1, \mathbf{s}_1$.

Of the three phonons involved in the process, either one or all three may be long-wavelength

¹if, on the other hand, the base cell is chosen so that the point $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ is at one of its vertices, for example, low frequencies will also correspond to the neighbourhoods of the other vertices, near which k is not small.

‡ The phonon distribution function N_k or $N(k)$ will be defined as the occupation numbers of quantum states with various values of the quasi-momentum k . The number of states belonging to an element $d^3 k$ in k -space is $d^3 k / (2\pi)^3$, and so the distribution relative to $d^3 k$ is $N_k / (2\pi)^3$.

acoustic phonons: if there are two such phonons and a shortwavelength one, the momentum and energy conservation laws cannot be satisfied. For an acoustic phonon in the limit $k \rightarrow 0$, the polarization vectors $e_s(k)$ tend to a constant independent of s , since all the atoms in the cell vibrate in unison, and the factors $\exp(ik \cdot r_n)$ tend to unity. Because of the property (66.12), the quantity Ω (66.4) therefore tends to zero, and for small $\mathbf{k}$ it is proportional to k or (the same thing for an acoustic phonon) to ω . The result is

$$w \propto k_1 \quad (66.13)$$

if there is one long-wavelength phonon, or

$$w \propto k_1 k_2 k_3 \quad (66.14)$$

if there are three.

The results (66.13) and (66.14) can also be reached in a more obvious way by noting that the long-wavelength acoustic phonons correspond to macroscopic sound waves, which can be treated by macroscopic elasticity theory. Then the energy of the deformed crystal is expressed in terms of the strain tensor

$$U_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial U_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{\partial U_\beta}{\partial x_\alpha} \right) \quad (66.15)$$

where $\mathbf{U}(\mathbf{r})$ is the macroscopic displacement vector for points in the elastic medium. The components of this tensor are the small quantities used in the expansion of the elastic energy. In second quantization, the vector $\mathbf{U}$ is replaced by the operator $\hat{\mathbf{U}}$ analogous to (66.2). The differentiation of $\hat{\mathbf{U}}$ with respect to the coordinates to obtain the operators $\hat{U}_{\alpha\beta}$ gives the additional factor k which leads to the results (66.13) and (66.14).

17.1.2 §67. The transport equation for phonons in an insulator

In a solid crystal, the phonons form a rarefied gas, and their transport equation is obtained in a similar way to that for an ordinary gas.

Let $N \equiv N_k(t, \mathbf{r}, \mathbf{k})$ be the distribution function for phonons of type g . The transport equation for each type of phonon is written as

$$\frac{\partial N}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \frac{\partial N}{\partial \mathbf{r}} = C(N) \quad (67.1)$$

where $\mathbf{u} = \partial\omega/\partial\mathbf{k}$ is the phonon velocity.

An important difference from the case of ordinary gases, however, is that in collisions in the phonon gas neither the number of phonons nor (because of Umklapp processes) their total quasi-momentum is in general conserved. The only remaining conservation law is that of energy, expressed by

$$\sum_k \int \omega C(N) d^3k / (2\pi)^3 = 0. \quad (67.2)$$

Multiplying (67.1) by ω , integrating over d^3k , and summing over g , we obtain the law of conservation of energy in the form

$$\partial E / \partial t + \text{div } \mathbf{q} = 0 \quad (67.3)$$

where the thermal energy density E of the crystal and the energy flux $\mathbf{q}$ are given by the obvious expressions

$$E = \sum_g \int \omega N d^3k / (2\pi)^3, \quad q = \sum_g \int \omega u N d^3k / (2\pi)^3 \quad (67.4)$$

The collision integral in (67.1) must in principle include all processes that can occur as a result of the interaction of phonons of type g with all other phonons. In practice, however, the chief contribution to it comes from the three-phonon processes discussed in §66. Processes involving a greater number of phonons arise from subsequent terms in the expansion of the Hamiltonian in powers of the displacements of the atoms: these terms decrease rapidly as their order increases. The reason for the decrease is that the ratio of the vibration amplitude ξ to the lattice constant d is small; in solid crystals, it remains small at all temperatures up to the melting-point. † For a rough estimate, we can begin from the classical relation

$M\omega^2\xi^2 \sim T$; estimating the characteristic frequency as $\omega \sim u/d$, † we find

$$(\xi d)^2 \sim T/Mu^2 \ll 1. \quad (67.5)$$

The collision integral is, as always, the difference between the numbers of processes (per unit time) which create phonons in a given state $g, \mathbf{k}$, and which remove phonons from that state. Taking account of three-phonon processes only, we have

$$\begin{aligned} C(N) = & \int \left\{ \frac{1}{2} \sum_{R_1, R_2} w(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2; \mathbf{k}) \delta(\omega - \omega_1 - \omega_2) \times \right. \\ & \times [(N+1)N_1N_2 - N(N_1+1)(N_2+1)] \\ & + \sum_{R_1 - \kappa_3} w(\mathbf{k}_1\mathbf{k}_1; \mathbf{k}_3) \delta(\omega_3 - \omega - \omega_1) \times \\ & \left. \times [(N+1)(N_1+1)N_3 - NN_1(N_3+1)] \right\} d^3k_1 / (2\pi)^3 \end{aligned} \quad (67.6)$$

where $N_1 \equiv N_{k_1}(\mathbf{k}_1)$, $\omega_1 \equiv \omega_{k_1}(\mathbf{k}_1)$, ... The first term in the braces corresponds to the direct and reverse processes

$$(g, k) \rightleftharpoons (g_1, k_1) + (g_2, k_2), \quad k_2 = k - k_1 - b; \quad (67.7)$$

the factor $\frac{1}{2}$ in this term takes into account the fact that, because of the identity of the phonons, we have to sum only over half of the final states. The second term in the braces corresponds to processes

$$(g_1, k_3) \rightleftharpoons (g, k) + (g_1, k_1), \quad k_3 = k + k_1 + b; \quad (67.8)$$

the factor $\frac{1}{2}$ is not needed in this term, since one of the two phonons formed by the decay is specified. In the integrand of (67.6), it should be noted, the triple products NN_1N_2 and NN_1N_3 cancel.

The collision integral is identically zero for the equilibrium phonon distribution, the Planck distribution

$$N_0 = (e^{\omega/T} - 1)^{-1} \quad (67.9)$$

This is easily shown for the integral (67.6) by direct calculation: multiplication of the factors gives

$$N_0(N_{01}+1)(N_{02}+1) = (N_0+1)N_{01}N_{02} \exp[(\omega_1 + \omega_2 - \omega)/T] \quad (67.10)$$

¹†Except in the "quantum crystal", solid helium.

and by the law of conservation of energy the exponential factor on the right is equal to unity.

If Umklapp processes were absent, not only the total energy but also the total quasi-momentum of the phonons would be zero. Then not only the distribution function (67.9), but also the functions

$$N_0 = \left[\exp \frac{\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{V}}{T} - 1 \right]^{-1} \quad (67.11)$$

corresponding to the translational motion (drift) of the phonon gas as a whole relative to the lattice with any velocity V , would be equilibrium functions. This result is in accordance with the general principles of statistical physics. It can also be proved directly: with the functions (67.11) as N_0 , a further factor $\exp[V \cdot (k - \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)/T]$ appears on the right of (67.10), and is equal to unity for non-Umklapp processes, where $k = k_1 + k_2$.

The distribution (67.11) leads, of course, to a non-zero energy flux q . Thus, in the absence of Umklapp processes, a heat flux could exist in the crystal although the temperature were constant throughout the body; that is, the crystal would have an infinite thermal conductivity. A finite conductivity arises only because Umklapp processes exist. †

To calculate the thermal conductivity, we have to write the transport equation for a crystal in which the temperature varies slowly through the volume. As usual, we seek the phonon distribution functions in the form

$$N(\mathbf{r}, \mathbf{k}) = N_0(\mathbf{k}) + \delta N(\mathbf{r}, \mathbf{k}), \quad (67.12)$$

where δN is a small correction to the equilibrium function. The transport equations are then

$$(\mathbf{u} \cdot \nabla T) \partial N_0 / \partial T = I(\delta N) \quad (67.13)$$

where $I(\delta N)$ is the linearized collision integral.

The functions δN must also satisfy the further condition

$$\sum_g \int \omega \delta N d^3 k / (2\pi)^3 = 0 \quad (67.14)$$

which signifies that the perturbed distribution functions give the same value of the lattice energy density as do the equilibrium functions. As already noted in §6, this condition essentially specifies the definition of the temperature in a non-equilibrium body. The other conditions imposed on δN in §6 do not apply to a phonon gas, in contrast to an ordinary gas. The number of particles in the phonon gas is not a fixed quantity, but depends on the temperature. The total actual momentum (not quasimomentum) of the phonons in the crystal is necessarily zero, since otherwise there would be a flow of the solid, which is certainly impossible for an ideal (defect-free) crystal lattice. Each atom in the lattice executes only a finite motion, the oscillation about the lattice site; the mean momentum of such a motion is identically zero.

Thus the phonon flux (associated with the energy flux) in a solid crystal is not accompanied by a transfer of mass. †

Let us write explicitly the linearized collision integral (67.6). Here, it is convenient to use instead of δN new unknown functions χ defined by

¹In the estimates, we shall regard u as the speed of sound, although this is of course linearly correct only for long-wavelength acoustic phonons.

^{1†}The quantum theory of thermal conduction in insulators, based on the transport equation for phonons, is due to R. E. Peierls (1929), who also first drew attention to the role of Umklapp processes in transport processes in solids.

$$\delta N = -(\partial N_0 / \partial \omega) \chi = N_0 (N_0 + 1)_{\chi} / T \quad (67.15)$$

The process of linearization is simplified by noting that

$$\delta \frac{N}{1 + N} = \frac{N_0}{1 + N_0} \frac{\chi}{T} \quad (67.16)$$

The expression in square brackets in the first integral in (67.6), for example, may be written

$$(N + 1) (N_1 + 1) (N_2 + 1) \left[\frac{N_1}{N_1 + 1} \frac{N_2}{N_2 + 1} - \frac{N}{N + 1} \right]$$

In the factors taken outside the brackets, we can put immediately $N = N_0$. The difference in the brackets gives

$$\frac{1}{T} \frac{N_0}{N_0 + 1} (\chi_1 + \chi_2 - \chi),$$

where we have used the formula

$$\frac{N_{01}}{N_{01} + 1} \frac{N_{02}}{N_{02} + 1} = \frac{N_0}{N_0 + 1}$$

The collision integral is thus brought to the form

$$\begin{aligned} C(N) \approx I(\chi) = & \frac{1}{T} \int \left\{ \frac{1}{2} \sum_{R_1, R_2} w(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2; \mathbf{k}) N_0 (N_{01} + 1) (N_{02} + 1) \times \right. \\ & \times \delta(\omega_1 + \omega_2 - \omega) (\chi_1 + \chi_2 - \chi) \\ & + \sum_{R_1, g_2} w(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1; \mathbf{k}_3) N_0 N_{01} (N_{03} + 1) \times \\ & \left. \times \delta(\omega + \omega_1 - \omega_3) (\chi_3 - \chi_1 - \chi) \right\} d^3 k_1 / (2\pi)^3 \end{aligned} \quad (67.17)$$

Note that $\chi(\mathbf{k})$ appears in the integrands as simple sums of its values for various $\mathbf{k}$. as in the classical collision integral for gases (6.4), (6.5).

To a solution of (67.13), we can always add the obvious solution of the homogeneous equation.

$$\chi = \text{constant} \times \omega, \quad (67.18)$$

which makes the integral (67.17) identically zero because of the conservation of energy in collisions. As already explained in §6, this "extra" solution corresponds simply to a small constant change in the temperature, and is excluded by the further condition (67.14).

A second "extra" solution,

$$\chi = \mathbf{k} \cdot \delta \mathbf{V}, \quad (67.19)$$

with $\delta \mathbf{V}$ a constant, corresponds to a small change in the velocity of the phonon gas as a whole (cf. (6.6)), and is excluded by the presence of Umklapp processes, which have the effect that the total phonon quasi-momentum is not conserved.

¹† Unlike a liquid, where the phonon momentum is the actual momentum and the phonon flux does involve a transfer of mass. In a liquid, the atoms execute an infinite motion: in a sufficiently long time, any atom can reach any point in the volume

17.1.3 §68. Thermal conduction in insulators. High temperatures

Equation (67.13) allows us to determine immediately the temperature dependence of the thermal conductivity of an insulator at temperatures much greater than the Debye temperature $\Theta \sim u/d$ (or huld in ordinary units).

The maximum phonon energy in all branches of the spectrum is of the order of Θ . Hence, when $T \gg \Theta$, the energies of all phonons $\omega \ll T$, and for most of them $\omega \sim \Theta$. The equilibrium distribution function (67.9) then becomes

$$N_0 \approx T/\omega \gg 1. \quad (68.1)$$

In the collision integral (67.17), the temperature separates as a factor T^2 ; the function x for frequencies $\omega \sim \Theta$ does not affect the temperature dependence of the integral. On the left-hand side of (67.13), $\partial N_1/\partial T \approx 1/\omega$ does not involve the temperature. Hence

$$\chi \propto \nabla T/T^2, \quad \delta N = -(\partial N_0/\partial \omega)_\chi \propto \nabla T/T,$$

and so the heat flux $\dagger$

$$q = \sum_g \int \omega u \delta N d^3k / (2\pi)^3 \times \nabla T/T$$

The thermal conductivity is thus inversely proportional to the temperature:

$$\kappa \propto I/T, \quad T \gg \Theta; \quad (68.2)$$

in the classical theory, this result was obtained by Debye. In an anisotropic crystal, the directions of q and ∇T are in general not the same, and the conductivity is therefore a tensor of rank two, not a scalar; we shall not take account of this when considering its temperature dependence.

Let us estimate the phonon mean free path in the temperature range concerned. According to the elementary relation (7.10) in the kinetic theory of gases, $\kappa \sim C\bar{v}l$, where C is the specific heat per unit volume, $\bar{v}$ the mean speed of the energy carriers, and l their mean free path. The specific heat of the crystal is constant at high temperatures, and so is the speed of the phonons, which may be estimated as the speed of sound u . We then see that the mean free path $l \propto 1/T$. This would have to become of the order of the lattice constant d at temperatures so high that the vibration amplitudes of the atoms are also of the order of d . According to the estimate (67.5), such a temperature is $\sim Mu^2$, and we have for the mean free path and the effective collision frequency $\nu \sim u/l$ the estimates

$$l \sim Mu^2d/T, \quad \nu \sim T/Mud. \quad (68.3)$$

From this we see that $l \gg d$ at almost all temperatures below the melting-point. In this analysis, it has essentially been assumed that the three-phonon mechanism of thermal resistance in a crystal lattice is operative for all pions. The energy fluxes carried by the various groups of phonons are additiv, and therefore so are their contributions to the thermal conductivity. If that mechanism were insufficient for even one group of phonons, it would be insufficient to provide a finite conductivity. The long-wavelength acoustic phonons need special consideration here.

[†]the obvious vanishing of q in equilibrium follows formally from the vanishing of the integral over d^3k because the integrand is an odd function of k : the frequency $\omega(k)$, and therefore $N_0(\omega)$, are even functions of k , and the velocity $u = \partial\omega/\partial k$ is an odd function. The function $\omega(k)$ is even because of the symmetry under time reversal, whatever the symmetry of the crystal lattice (see SP I. § 69).

Let us first consider processes involving only such phonons with small quasimomenta of comparable magnitude, denoted by $\mathbf{f}$ with the appropriate suffix. We shall estimate for these processes the collision integral (67.17) as regards its dependence on f . According to (66.14), in this case $w \propto f f_1 f_2 \propto f^3$. The factors $N_0 \sim T/\omega \times 1/f$. The integration in k -space is over a volume $\sim f^3$, but the delta function separates within the volume a surface with area $\sim f^2$. We thus find for the collision integral

$$I(\chi) \propto f^2 \chi \propto f^4 \delta N,$$

where the last expression uses the fact that $\delta N \propto \chi/f^2$ by (67.15); the result can also be written in terms of the effective collision frequency as

$$v(f) \propto f^4. \quad (68.4)$$

On the left-hand side of the transport equation (67.13), the factor u is (for acoustic phonons) independent of f , and $\partial N_0/\partial T \propto 1/f$. Hence

$$\delta N \propto 1/fv.$$

The contribution of the long-wavelength phonons to the energy flux q is given by the integral (67.4) taken over a volume $\sim f^3$. This integral,

$$\int \omega u \delta N d^3 f / (2\pi)^3 \propto \int d^3 f l v(f), \quad (68.5)$$

diverges as $1/f$ for small f , however. Thus the three-phonon processes between only long-wavelength acoustic phonons would lead to an infinite thermal conductivity; to arrive at a finite conductivity, collisions between these and shortwavelength phonons are necessary (I. Ya. Pomeranchuk 1941).

¹ Let a short-wavelength phonon with quasi-momentum $\mathbf{k}$ decay into a longwavelength acoustic phonon f and a short-wavelength phonon $\mathbf{k} - \mathbf{f} - \mathbf{b}$ belonging to the same branch of the spectrum $\omega(\mathbf{k})$ as the phonon $\mathbf{k}$; in the following analysis, the absolute value of k is less important than the fact that $k \gg f$. Since $\omega(k)$ is periodic in the reciprocal lattice, we have $\omega(\mathbf{k} - \mathbf{f} - \mathbf{b}) = \omega(\mathbf{k} - \mathbf{f})$, and the law of conservation of energy states that

$$\omega(\mathbf{k}) = \omega(\mathbf{k} - \mathbf{f}) + u(\mathbf{n})f. \quad (68.6)$$

The second term on the right, the acoustic phonon frequency, is a linear function of f ; $u(\mathbf{n}) = \omega(f)/f$ is the phase velocity of sound, which depends on the direction $\mathbf{n} = \mathbf{f}/f$. Expanding $\omega(\mathbf{k} - \mathbf{f})$ in powers of the small vector $\mathbf{f}$, we can put this equation in the form

$$\mathbf{f} \cdot \partial \omega / \partial \mathbf{k} = f u(\mathbf{n}). \quad (68.7)$$

It can be satisfied only if the speed of the short-wavelength phonon exceeds that of sound:

$$|\partial \omega / \partial \mathbf{k}| > u(\mathbf{n}). \quad (68.8)$$

In this sense, the most "dangerous" acoustic branch is that with the highest speed of sound, and this is the branch we shall have in mind when referring to acoustic phonons. †

Other possibilities for three-phonon processes occur when there are points of degeneracy in k -space, where the energies of two or more branches of the phonon spectrum coincide (C. Herring 1954); the presence of such points (either isolated, or forming a line or plane) is in many cases a necessary consequence of the crystal lattice symmetry. The resulting possibilities are illustrated by a graphical construction which we shall first give for the case already discussed, that of emission by a "supersonic" short-wavelength phonon.

For a given direction of $\mathbf{f}$, we take that direction as the x -axis; in Fig. 27a, the continuous curve represents the function $\omega(k_x)$ (with given k_y and k_z) for short-

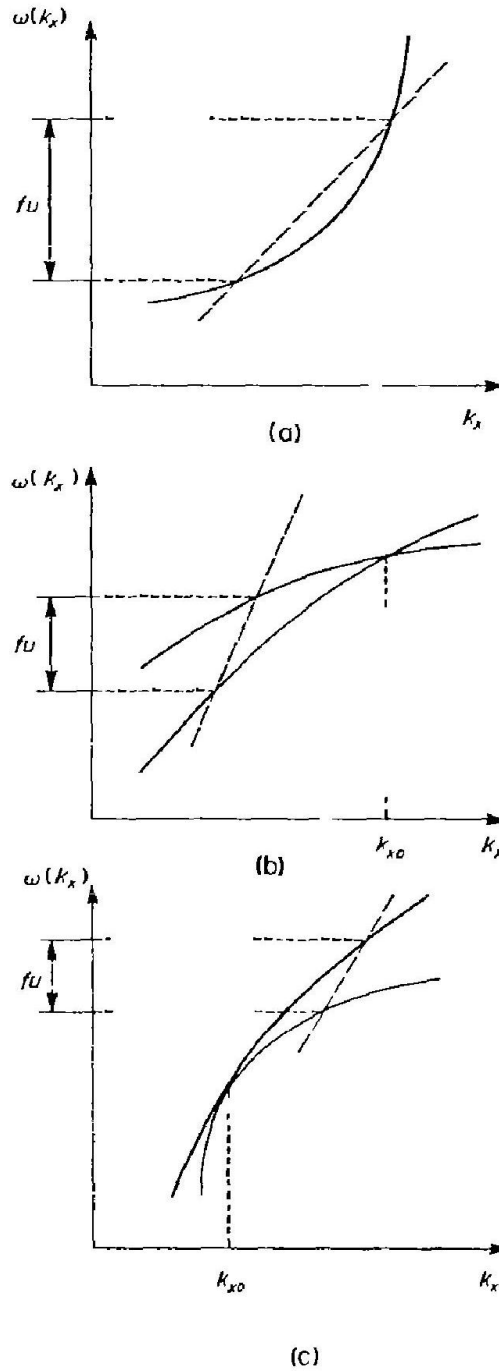


Fig. 27.

wavelength phonons. Writing the condition (68.7) in the form

$$v_x \equiv \partial\omega/\partial k_x = u(n_x),$$

we see that the emission of an acoustic phonon is possible if at some point the slope of the

¹In an isotropic solid, one branch of the acoustic spectrum corresponds to longitudinal vibrations, and the other two to transverse ones: the speed of longitudinal sound waves exceeds that of transverse waves. In an anisotropic crystal, the division of the waves into longitudinal and transverse has in general no meaning. However, in the literature the branch with the highest speed of sound is often arbitrarily called longitudinal.

curve is equal to the speed of sound. The frequencies $\omega(k)$ and $\omega(k-f)$ of the short-wavelength phonons near this point are then given by the intersections of the curve with the broken line, whose slope is $u(n_x)$; the difference between the ordinates of these points gives the frequency fu .

If, however, the curves of two branches $\omega(k_r)$ intersect at a point $k_x = k_{x0}$, a three-phonon process is always possible near that point, whatever the slopes of the curves, and whether or not k_{x0} is a simple intersection (Fig. 27b) or a point of contact (Fig. 27c). The two short-wavelength phonons then belong to different branches of the spectrum.

Let us now estimate the effective number of collisions of a long-wavelength acoustic phonon when there are points of degeneracy. These must be processes (67.8) of absorption and emission of the phonon: the decay of the phonon by the processes (67.7) would lead to two long-wavelength phonons, i.e. the case already discussed. We have therefore to estimate the second term in (67.17) with the assumption that

$$\omega_1, \omega_3 \gg \omega \approx f \rightarrow 0.$$

Here we use the facts that $w \times f, N_0 \times l/f$, and the remaining factors in the integrand may be replaced by mean values independent of f , since the integration is taken only over the neighbourhood of the degeneracy points. Again using $\delta N \approx \chi/f^2$, we obtain an estimate of the dependence of the collision integral on f in the form $I(\chi) \propto \nu(f)\delta N$, where

$$\nu(f) \propto f^2 \int \delta[\omega_1(k-f) + u(n)f - \omega_3(k)] d^3k \quad (68.9)$$

The integral can be transformed into a surface integral in $\mathbf{k}$ -space, the surface being defined by

$$\omega_1(k-f) + u(n)f - \omega_3(k) = 0, \quad (68.10)$$

by means of the formula †

$$\int \delta(F) d^3k = \oint dS |\Gamma_k F| \quad (68.11)$$

the integral being taken over the surface $F(\mathbf{k}) = 0$. We then have

$$\nu(f) \propto f^2 \Delta S(f) \left\langle \left| \frac{\partial \omega_3(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} - \frac{\partial \omega_1(\mathbf{k}-\mathbf{f})}{\partial \mathbf{k}} \right|^{-1} \right\rangle, \quad (68.12)$$

where $\Delta S(f)$ is the area of the surface (68.10). and the angle brackets denote averaging over the surface.

Let us consider a typical case, in which the degeneracy points form a curve in $\mathbf{k}$ -space. Then, as $\mathbf{f} \rightarrow \mathbf{0}$, the surface (68.10) contracts to a curve on which the this is derived immediately by noting that

$$d^3k = dS dI = dS dF / |\Gamma_k F|$$

where I is the distance along the normal to the surface.

degeneracy points lie, and for small f it is a narrow tube surrounding this line; the dependence of the area ΔS on f is therefore the same as the f -dependence of the cube diameter.

If the surfaces $\omega(\mathbf{k})$ meet on the degeneracy curve but do not touch (Fig. 27b), the distance of the point k from the degeneracy point varies linearly with f , and so $\Delta S \propto f$ also. Since the difference of the derivatives in this case is finite at the point of intersection, we have

$$\nu(f) \propto f^3 \quad (68.13)$$

The integral (68.5) now diverges only logarithmically. This divergence is to be removed in the same way as when there is no degeneracy (see below). Because the divergence is weak, it usually does not cause any significant change in the law (68.2).

Now let the surfaces $\omega(k)$ have a quadratic contact at the degeneracy point. Then, as we see from Fig. 27c, f is proportional to the square of the distance from the point of contact. The area ΔS , being proportional to this distance itself, is $\Delta S \propto f^{1/2}$. In the case concerned, the same dependence on f occurs for the difference of the derivatives in (68.12), since the derivative curves intersect without contact. In this case, therefore,

$$\nu(f) \propto f^2 \quad (68.14)$$

and there is no divergence in the thermal conductivity.

Other types of degeneracy may be treated similarly. [†]

If there are no degeneracy points in the phonon spectrum, the condition (68.6) must be satisfied for all directions n in at least one branch of the spectrum $\omega(k)$ in order to ensure a finite thermal conductivity from three-phonon processes. Otherwise, a finite conductivity results only from higher-order (four-phonon) processes, and the law (68.2) does not hold. At low temperatures the mean free path increases and may become comparable with the size L of the body; the divergence of the integral (68.5) can then be cut off at $f \sim 1/L$, which would make the thermal conductivity dependent on L .

17.1.4 §69. Thermal conduction in insulators. Low temperatures

At low temperatures ($T \ll \Theta$), heat transfer in insulators becomes quite different. The reason is that under such conditions the number of Umklapp processes becomes exponentially small, as is clear from the following arguments.

The conservation of quasi-momentum in a three-phonon process with Umklapp, expressed by $k = k_1 + k_2 + b$, requires that at least one of the three quasi-momenta should be large; let this one be $k_1 \sim b$. Then the energy $\omega_1 \sim \Theta$, and the conservation of energy ($\omega = \omega_1 + \omega_2$) requires that the energy $\omega \sim \Theta$ should also be large. When

$T \ll \Theta$, however, the majority of the phonons have energies $\sim T$, and the number with energies $\sim \Theta$ is exponentially small. Thus, both for the phonon decay process and for the inverse process of coalescence of two phonons, the numbers of initial phonons, and therefore the numbers of processes, are exponentially small. It is easy to see that the fact that it is a three-phonon process is unimportant in these arguments, which apply equally to processes involving a greater number of phonons.

In this situation, the physical picture of heat transfer is as follows. Numerous normal collisions of phonons, in which the total quasi-momentum is conserved, establish only "internal" equilibrium in the phonon gas, which may still be moving relative to the lattice with any velocity V . The small number of collisions with Umklapp change the distribution function only slightly, but establish a definite value of V , proportional to the temperature gradient; this in turn determines the heat flux. We shall now show how this picture is represented in the mathematical solution of the problem. [†]

The transport equation is written as

$$(\partial N_0 / \partial T) u \cdot \nabla T = I_N(\chi) + I_U(\chi) \quad (69.1)$$

the collision integral being separated into parts associated with normal and Umklapp collisions. The equilibrium distribution function corresponding to the movement of the gas as a

^{††} A discussion of them may be found in the original paper by C. Herring, *Physical Review* 95. 954, 1954.

whole with velocity V is obtained from $N_0(\omega)$ on replacing the argument ω by $\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{V}$; when V is small, we have

$$N_0(\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{V}) \approx N_0(\omega) - \mathbf{k} \cdot \mathbf{V} \partial N_0 / \partial \omega. \quad (69.2)$$

In accordance with the picture described above, we seek the solution of equation (69.1) in the form

$$\chi = \chi_N + \chi_U, \quad \chi_N = \mathbf{k} \cdot \mathbf{V} \quad (69.3)$$

χ_U is the part of the change in the distribution function that is due to Umklapp processes, and is small in comparison with χ_N . If ν_U and ν_N denote the orders of magnitude of the effective collision frequencies with and without Umklapp ($\nu_U \ll \nu_N$), then

$$\chi_U / \chi_N \sim \nu_U / \nu_N \quad (69.4)$$

Substitution in (69.1) gives

$$(\partial N_0 / \partial T) \mathbf{u} \cdot \nabla T = I_N(\chi_U) + I_U(\chi_N) \quad (69.5)$$

where the linear operators acting on the functions χ are defined by (67.17). In (69.5) we have used the fact that $I_N(\chi_N) = 0$, and omitted $I_U(\chi_U)$ as a small quantity; the

two remaining terms on the right are of the same order of magnitude if (69.4) is valid.

Let us emphasize first of all that, when Umklapp processes are neglected and the temperature gradient is not zero, the transport equation has no solution. For, let us multiply equation (69.5) by $\mathbf{k}$, integrate over $d^3k / (2\pi)^3$, and sum over all branches of the phonon spectrum. Since normal collisions conserve the total quasi-momentum, the term $I_N(\chi_U)$ becomes zero, leaving

$$\sum_g \int \mathbf{k} (\mathbf{u} \cdot \nabla T) \frac{\partial N_0}{\partial T} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} = \sum_g \int \mathbf{k} I_U(\chi_N) \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \quad (69.6)$$

When Umklapp processes are neglected, the right-hand side is zero, whereas the left-hand side is certainly not zero, the integrand being an even function, since $\omega(\mathbf{k})$ is even and $\mathbf{u} = \partial \omega / \partial \mathbf{k}$ is odd. This contradiction means that the transport equation has no solution.

With Umklapp processes taken into account, however, equation (69.6) determines the unknown quantity V in the solution (69.3). To simplify the notation, we shall suppose that the crystal has cubic symmetry. The anisotropy of the crystal then does not appear $^{\frac{1}{2}}$ in the integrals in (69.6), and this equation becomes, after substitution of χ_N from (69.3),

$$\beta_1 \nabla T = -\nu_v \beta_2 T V. \quad (69.7)$$

with the notation

$$\left. \begin{aligned} \beta_1 &= \frac{1}{3} \frac{\partial}{\partial T} \sum_k \int \mathbf{k} \cdot \mathbf{u} N_0 \frac{d^2k}{(2\pi)^3} \\ \beta_2 &= \frac{1}{3} \frac{\partial}{\partial T} \sum_k \int \frac{k^2}{\omega} N_0 \frac{d^2k}{(2\pi)^3} \\ T_{vU} \beta_2 &= -\frac{1}{3} \sum_k \int \mathbf{k} \cdot I_v(\mathbf{k}) \frac{d^3k}{(2\pi)^3}; \end{aligned} \right\} \quad (69.8)$$

the factor β , is separated in order to simplify the later formulae.

Equation (69.7) determines V , and the energy flux is then calculated as the integral (67.4), in which N is to be replaced by

¹fit should be noted that the unambiguous separation of Umklapp processes as a small effect is achieved by precisely the choice described in §66 for the base cell in the reciprocal lattice, as a result of which all collisions between long-wavelength phonons only, with low energies, are normal ones.

$$\delta N_N = -\mathbf{k} \cdot \mathbf{V} \partial N_0 / \partial \omega = \mathbf{k} \cdot \mathbf{V} (T/\omega) \partial N_0 / \partial T$$

Then $q = T\beta$, V , and together with (69.7) this gives $q = -\kappa \nabla T$, with the thermal conductivity

$$\kappa = \beta_1^2 / \nu_0 \beta_2 \quad (69.9)$$

It is noteworthy that in this case the calculation of κ does not require the transport equation (69.5) to be solved, but only the integrals (69.8) to be calculated.

† For cubic symmetry, any tensor of rank two reduces to a scalar: $a_{a\beta} = \{a\delta_{a\beta}, a \equiv a_{am}$

The integrals β_1 and β_2 are governed by the frequency range $\omega \sim T$, which contains the majority of the phonons. They depend on T only by a power law. Since only acoustic phonons can have low energies, β_1 and β_2 need in practice be summed only over the three acoustic branches of the spectrum. It is easy to see that we then have

$$\beta_1, \beta_2 \propto T^3. \quad (69.10)$$

The exponential dependence is contained in the integral ν_U . Its specific form can be obtained by means of (67.17). For Umklapp processes,

$$\chi_{N_1} + \chi_{N_2} - \chi_N = \mathbf{V} \cdot (\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}) = \mathbf{V} \cdot \mathbf{b}.$$

For the majority of phonons, $\omega \sim T$ and the distribution function $N_0 \sim 1$; for phonons with $\omega \gg T$, however, $N_0 \ll 1$. The factors $N_0 + 1 \sim 1$ therefore need not be considered in estimating the integral. The functions

$$N_0 = e^{-\omega/T} (N_0 + 1)$$

contain factors $e^{\omega/T}$, which may be exponentially small, and which have a decisive effect on the estimate of the integral.

Thus, if we consider only the exponential temperature dependence of ν_U , we have

$$\nu_U \propto \sum_{(\mathbf{R}, \mathbf{b})} e^{-\omega/T} \delta(\omega - \omega_t - \omega_2) d^3 k d^3 k_1 \quad (69.11)$$

the summation is over all branches g, g_1, g_2 of the spectrum and over all non-zero values of $\mathbf{b}$ occurring in Umklapp processes. The equation

$$\omega_g(k) = \omega_{g_1}(k_1) + \omega_{g_2}(k - k_1) \quad (69.12)$$

defines a five-dimensional surface in six-dimensional $\mathbf{k}\mathbf{k}_t$ -space. Let $\Delta(g, g_1, g_2)$ be the minimum value of $\omega_g(k)$ on this hypersurface; since the energies of phonons involved in Umklapp processes are large, these values are $\sim \Theta$. Each of the integrals in the sum over (g) in (69.11) is proportional to $\exp[-\Delta(g, g_1, g_2)/T]$. Retaining only the largest of them, we have

$$\nu_U \propto \exp(-\Delta_{\min}/T), \quad (69.13)$$

where $\Delta_{\min}$ is the smallest of the $\Delta(g, g_1, g_2)$.

- We thus conclude that the thermal conductivity depends on the temperature essentially according to the exponential relation

$$\kappa \propto \exp(\Delta_{\min}/T), \quad (69.14)$$

with $\Delta_{\min} \sim \Theta$ (R. E. Peierls, 1929).

The higher-order processes, involving a larger number of phonons, lead to a temperature dependence of a similar type, with Δ the lowest possible value of the energy of the initial phonons in each process (or, equivalently, half the least total energy of all phonons, initial and final, taking part in the process). In principle, it may happen that this value is less than for three-phonon processes, in which case the contribution of higher-order processes to the thermal conductivity may become predominant, despite the fact that the coefficient of the exponential decreases, of course, as the order of the process increases.

Unlike the Umklapp process frequency ν_U , the effective frequency ν_N of normal collisions decreases as a power of the temperature; we shall determine the relationship, in order to use it in §71.

Normal collisions take place between acoustic phonons with $\omega \sim T$, which form the majority. Their quasi-momenta $k \sim \omega/u \sim T/u$. In the collision integral (67.17), the integration is over a surface with area $\sim k^2$ distinguished by the delta function in a volume $\sim k^3$. In this region, the functions $N_0 \sim 1$ and $\omega \propto k^3$, according to (66.14). Hence $\nu_N \propto T^5$. The proportionality coefficient is most simply determined from the condition that when $T \sim \Theta$ this expression and the estimate (68.3) must give the same result, so that

$$\nu_N \sim T^5/\Theta^4 M u d \quad (69.15)$$

17.1.5 §70. Phonon scattering by impurities

In §§68 and 69 we have assumed that the crystal lattice is ideal and free from defects. Let us now consider the possible significance of phonon scattering by impurity atoms as regards thermal conduction in insulators.

In relation to the long-wavelength acoustic phonons, the impurity atom is a point defect in the lattice. A characteristic property of scattering by such defects is that it is elastic (the phonon frequency is unchanged), and the scattering cross-section decreases rapidly with the frequency, i.e. with the wave number, as k^4 .[†]

The collision integral for phonon scattering by impurities is

$$C(N_{\mathbf{k}}) = N_{\text{imp}} \int w(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \{N_{\mathbf{k}}(1 + N_{\mathbf{k}}) - N_{\mathbf{k}'}(1 + N_{\mathbf{k}'})\} \delta(\omega' - \omega) d^3k' / (2\pi)^3 \quad (70.1)$$

As usual, the first term in the braces gives the number of scattering events per unit time which bring a phonon into a state with a given quasi-momentum $\mathbf{k}$ from states with any other values $\mathbf{k}'$ that correspond to the same energy. Similarly, the second term gives the number of scattering events that take phonons from that state into any other. If the impurity atoms are arranged randomly, and the mean distance between them is much greater than the scattering amplitude, then different atoms scatter independently and the probabilities are additive. Under these conditions, which have been assumed in (70.1), the total number of scattering events is

proportional to the impurity atom concentration N_{imp} . For scattering in an anisotropic medium, the function $w(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ depends on the directions of both vectors $\mathbf{k}$ and $\mathbf{k}'$, but its dependence on the magnitude k is $w \propto k^4$. In (70.1) we have put $w(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = w(\mathbf{k}', \mathbf{k})$. In the Born approximation, this follows from the unitarity condition and the smallness of the scattering

[†]This is a general property of sound wave scattering by obstacles small compared with the wavelength; cf. FM, §76. Compare also the corresponding case in the scattering of long electromagnetic waves (Fields, §79).

amplitude when second-order terms are neglected (see QM, § 126). The Born approximation is not in general applicable to phonon scattering by an impurity atom. At low temperatures, however, when phonons with small k are concerned, the scattering amplitude is small for another reason, being proportional to k^2 ; if terms $\propto k^4$ are neglected, we again have the same equation.

The products $N_{\mathbf{k}}N_{\mathbf{k}'}$ in the braces in (70.1) cancel, and after the substitution $N = N_0 + \delta N$ the collision integral is immediately linearized:

$$C(N) \equiv I_{\text{imp}}(\delta N) = N_{\text{imp}} \int w' (\delta N_{\mathbf{k}'} - \delta N_{\mathbf{k}}) \delta(\omega' - \omega) d^3k' l (2\pi)^3 \quad (70.2)$$

This integral is, like w , proportional to k^4 . Since $\partial N_0 / \partial T \propto 1/\omega \propto 1/k$ when $\omega \ll T$, in this frequency range we have

$$\delta N \propto k^{-5} \quad (70.3)$$

A similar case has already occurred in §68; cf. (68.4). The relation (70.3) leads to divergence of the integral for the heat flux. Thus the presence of impurities in the crystal cannot in itself ensure a finite thermal conductivity of an insulator.

This does not mean, however, that impurities play no part in determining the conductivity. The reason is that the scattering by impurity atoms does not conserve the quasi-momentum of the phonons, and in this sense may take the place of Umklapp processes. In sufficiently pure samples, there may exist a range of low temperatures in which the effective frequency ν_{imp} of scattering by impurities (for phonons with $\omega \sim T$) is intermediate between the frequencies of normal and Umklapp collisions between phonons:

$$\nu_N \gg \nu'_{\text{imp}} \gg \nu_U. \quad (70.4)$$

Under such conditions, the role of the Umklapp processes is taken by the impurity scattering, and equations (69.6)-(69.8) remain valid if I_U is replaced by I_{imp} . The thermal conductivity is then given by (69.9) with ν_{imp} in place of ν_U :

$$\kappa = \beta_1^2 / \beta_2 \nu_{\text{imp}}.$$

According to (70.2), $\nu_{\text{imp}} \propto \omega^4 \sim T^4$. The quantities β_1 and β_2 for acoustic phonons are proportional to T^3 ; see (69.10). We thus have $\kappa \propto 1/T$ in this case.

17.1.6 §71. Phonon gas dynamics in insulators

The approximate conservation of quasi-momentum when the mean free path (l_N) for normal collisions is small compared with that (l_U) for Umklapp processes,

$$I_N / I_U \sim \nu_U / \nu_N \ll 1, \quad (71.1)$$

makes the phonon system in the crystal at low temperatures similar in many respects to an ordinary gas. The normal collisions establish internal equilibrium in each volume element of the gas (large compared with l_N), which may still be moving with any velocity $\mathbf{V}$. If $\mathbf{V}$ and the temperature $\mathbf{T}$ vary appreciably only over distances large compared with l_N (and over times long compared with $1/\nu_N$), a system of "hydrodynamic" equations can be derived for them. We shall construct these in the linear approximation with respect to the velocity $\mathbf{V}$ and the temperature gradient, which will be regarded as small quantities of the same order. Moreover, to simplify the formulae we shall again (as in §69) suppose that the crystal has cubic symmetry.

One of the required equations expresses the law of conservation of energy. It is obtained by substituting the distribution function (69.2) in (67.3) and (67.4). The integrals of $\omega(\mathbf{k} \cdot \mathbf{V}) \partial N_0 / \partial \omega$ and of $\omega \mathbf{u} N_0$ are zero when the integration over the directions of $\mathbf{k}$ is carried out;

cf. the first footnote to §68. The function $N_0(\omega)$ depends on the coordinates and the time only through T . Neglecting terms which contain the product $\mathbf{V} \cdot \nabla T$, we find

$$\beta_3 \partial T / \partial t + \beta_1 T \operatorname{div} V = 0, \quad (71.2)$$

where

$$\beta_3 = \partial E_0 / \partial T \quad (71.3)$$

E_0 is the equilibrium energy density, and β_1 is defined in (69.8).

The second equation expresses the (approximate) conservation of quasi-momentum. It is obtained from the transport equation

$$\partial N / \partial t + u \cdot \nabla N = C_N(N) + C_U(N) \quad (71.4)$$

by substituting N in the form (69.2), multiplying by $\mathbf{k}$, integrating over d^3k , and summing over the types of phonon. The integral of $\mathbf{k}C_N(N)$ is zero by the conservation of quasi-momentum in normal collisions. The result is

$$\beta_2 T \partial V / \partial t + \beta_1 \nabla T = -\nu_U \beta_2 T V, \quad (71.5)$$

with β_2 and ν_U given by (69.8). Equations (71.2) and (71.5) are the hydrodynamic equations for a phonon gas in an insulator.

The exponentially small (like ν_U) term on the right of (71.5) represents the effect of Umklapp processes. When this term is neglected, the quasi-momentum is exactly conserved. Under such conditions, undamped waves can propagate in the phonon gas, analogous to second sound waves in a superfluid (V. P. Peshkov 1946): eliminating V from (71.2) and (71.5), we have in that case

$$\partial^2 T / \partial t^2 = (\beta_1^2 / \beta_2 \beta_3) \Delta T, \quad (71.6)$$

i.e. the wave equation describing the propagation of temperature oscillations with speed

$$u_2 = (\beta_1^2 / \beta_2 \beta_3)^{1/2} \quad (71.7)$$

As already mentioned, contributions to the integrals $\beta_1, \beta_2, \beta_3$ at low temperatures come almost entirely from the acoustic branches of the spectrum. For linear dispersion relations $\omega(\mathbf{k})$, these integrals are proportional to T^3 ; the speed (71.7) is then independent of the temperature. and of the same order as the speed of sound. †

So far we have assumed the crystal to be of infinite size. At low temperatures, when the phonon mean free path rapidly increases, a situation may actually occur in which the mean free path becomes comparable with or even much greater than the size L of the crystal. This applies in particular to the exponentially increasing l_c .

Let us consider heat transfer in an insulator with $l_U \gg L$ (the condition will be more precisely specified below), but still $l_N \ll L$; the latter inequality enables us to use the equations of phonon hydrodynamics (J. A. Sussmann and A. Thellung 1963, R. N. Gurzhi 1964).

Because of the microscopic unevennesses of the crystal surface, phonons are usually reflected from it randomly (or diffusely); this means that the macroscopic velocity $\mathbf{V}$ of the phonon gas is zero at the surface. Equations (71.2) and (71.5), however, do not allow such a boundary condition; their solutions can satisfy only the condition that the normal component of the velocity is zero at the surface. As in the hydrodynamics of ordinary liquids, the boundary condition that the tangential velocity component is zero demands that the viscosity be taken into account.

In the steady state, equation (71.2) gives $\text{div } V = 0$. The inclusion of the viscosity adds a term in ΔV to the right-hand side of (71.5), similar to the corresponding term in the Navier-Stokes equation for an ordinary viscous liquid. In the steady state, this equation is

$$(\dot{\beta}_1/\beta_2 T) \nabla T = \mu \Delta V - \nu_U V \quad (71.8)$$

The quantity μ has the dimensions $[L^2/T]$ and acts as the kinematic viscosity of the phonon gas. [‡] Its calculation requires in principle the solution of the corresponding transport equation. However, for an order-of-magnitude estimate we can use the ordinary formula from the kinetic theory of gases, whereby

$$\mu \sim I_N \bar{v} \sim u^2/\nu_N \quad (71.9)$$

Size effects are predominant when the term $\nu_U V$ in (71.8) is negligible in comparison with $\mu \Delta V$. For example, let us consider heat transfer along a cylindrical rod with diameter R , which is the characteristic length as regards the variation

of the velocity V , so that $\Delta V \sim V/R^2$. We see that the term $\nu_U V$ is negligible if $\mu/R^2 \gg \nu_U$. With the estimate (71.9), this condition becomes $l_U \gg l_{\text{eff}}$, where

$$l_{\text{eff}} \sim R^2/l_N \quad (71.10)$$

acts as an effective phonon mean free path in the finite body. ^{1f} $l_{\text{eff}} \gg l_U$, on the other hand, the size of the body is unimportant, and (69.14) is valid.

The process of heat transfer along the rod when $l_U \gg l_{\text{eff}}$ is a Poiseuille flow of a viscous phonon gas, and may be described by an effective thermal conductivity which determines the energy flux as $-\kappa_{\text{eff}} \nabla T$, where ∇T is the temperature gradient along the rod. This flux may be estimated by substituting (71.10) in the expression $\kappa_{\text{eff}} \sim C u l_{\text{eff}}$. At low temperatures, the lattice specific heat $C \propto T^3$, and $l_N \sim u/\nu_N \propto T^{-5}$ according to (69.15). The effective thermal conductivity is therefore

$$\kappa_{\text{eff}} \propto R^2 T^8 \text{ when } R^2 I_U \ll I_N \ll R; \quad (71.11)$$

it decreases with falling temperature.

Lastly, at still lower temperatures, when also $l_N \gg R$, collisions between phonons become unimportant, as in the Knudsen case for highly rarefied ordinary gases. The role of the mean free path is then taken by the size R of the body, and the effective thermal conductivity is

$$\kappa_{\text{eff}} \sim C u R \propto T^3 R \quad (71.12)$$

(H. B. G. Casimir 1938).

17.1.7 §72. Sound absorption in insulators. Long waves

The nature of sound absorption in insulator crystals depends greatly on the relation between the wavelength and the mean free path l of thermal phonons. If the wavelength is much greater than l ($fl \ll I$, where f is the sound wave vector), the macroscopic theory based on the equations of elasticity theory is valid (see TE, §35), according to which the sound absorption

¹In an isotropic liquid with a phonon energy spectrum (superfluid helium at low temperatures) there is only one acoustic branch, in which $\omega = uk$. Then $\beta_1/\beta_2 = u^2$, $\beta_1/\beta_3 = \frac{1}{3}$, and the speed of second sound is $u_2 = u/\sqrt{3}$.

[‡] Considering the problem purely qualitatively, we here neglect entirely the anisotropy of the crystal. It should be remembered that, even with cubic symmetry, the viscosity is described not by a scalar coefficient but by a tensor of rank four having more than one independent component.

coefficient comprises two terms which are respectively determined by the thermal conductivity and the viscosity of the medium. Both terms are proportional to the square of the frequency. Our aim here is to find their dependence on the temperature.

The thermal conductivity contribution to the sound absorption coefficient is given in order of magnitude by [†]

$$\gamma_{\text{th}} \sim \omega^2 \kappa T \alpha^2 \rho / u C^2 \quad (72.1)$$

where α is the thermal expansion coefficient of the body, C the specific heat per unit volume and ρ the density. At high temperatures $T \gg \Theta$, the thermal conductivity

$\kappa \propto 1/T$, while C and α are independent of the temperature: see *SPI*, §65, 67. In this range, therefore, γ_{th} is independent of the temperature. At low temperatures, its temperature dependence is governed mainly (in an ideal lattice) by the thermal conductivity, which increases exponentially as T decreases.

Let us now determine the viscosity part of the sound absorption coefficient (A. I. Akhiezer 1938). The external sound field alters the phonon dispersion relation by causing a macroscopic deformation of the crystal lattice. The wavelength of thermal phonons is small in comparison with the wavelength of sound; hence the deformation may be regarded as uniform in relation to a thermal phonon, i.e. the latter may be regarded as being in a lattice that is still regular but has slightly altered periods. In the first approximation with respect to the small deformation, the phonon frequency $\omega(k)$ in such a lattice is related to its value $\omega^{(0)}(k)$ in the undeformed lattice by

$$\omega(k) = \omega^{(0)}(k) (1 + \lambda_{\alpha\beta} U_{\alpha\beta}) \quad (72.2)$$

where

$$U_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial U_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{\partial U_\beta}{\partial x_\alpha} \right)$$

is the strain tensor and $\mathbf{U}$ the displacement vector. The characteristic tensor $\lambda_{\alpha\beta}$ of the crystal in general depends on $\mathbf{k}$; for long-wavelength acoustic phonons with a linear dispersion relation, however, it does not depend on the magnitude of $\mathbf{k}$.

The parentheses in (72.2) should also contain a term of the form $\lambda \text{curl } \mathbf{U}$ expressing the trivial fact that, if the deformation causes rotation of a lattice volume element ($\text{curl } \mathbf{U} \neq 0$), this changes the direction of the axes (of the reciprocal lattice) with respect to which the quasi-momentum of a phonon in the dispersion relation is to be defined; the term $\lambda \text{curl } \mathbf{U}$ would represent the corresponding change in $\mathbf{k}$. We have not written this term in (72.2), since it is evident a priori that it cannot influence the energy dissipation in the sound wave, which concerns us here: the actual physical effect (dissipation) cannot depend on the vector $\text{curl } \mathbf{U}$, which differs from zero even for a mere rotation of the body as a whole.

The change in the phonon distribution function due to the lattice deformation is given by the transport equation

$$(\partial N / \partial \omega) \dot{\omega} + (\partial N / \partial T) \dot{T} = C(N) \quad (72.3)$$

where $C(N)$ is the phonon-phonon collision integral (67.6), and $\dot{T}$ the rate of variation of the temperature at a given point in the crystal that necessarily results from the deformation. Linearizing this equation in the usual way, and using the function χ defined by (67.15), we can reduce it to the form

[†] We give the absorption coefficient per unit path length. The frequency and temperature dependences are the same for the coefficient per unit time, since the two coefficients differ only by a constant factor, the velocity of sound.

$$\omega \frac{\partial N_0}{\partial \omega} (\lambda_{\alpha\beta} \dot{U}_{\alpha\beta} - \dot{T}/T) = I(\chi), \quad (72.4)$$

where $I(\chi)$ is the linearized collision integral (67.17). On the left-hand side, the derivative $\dot{\omega}$ has been transformed by means of (72.2); the superscript (0) to the unperturbed frequency is omitted, here and henceforward.

The derivative $\dot{T}$ can in principle be expressed in terms of the same tensor $\lambda_{\alpha\beta}$. Multiplying both sides of equation (72.4) by ω , integrating over k -space, and summing over all branches of the phonon spectrum, reduces the right-hand side to zero by virtue of the conservation of energy in collisions. The left-hand side gives

$$\dot{T}/T = \bar{\lambda}_{\alpha\beta} \dot{U}_{\alpha\beta}, \quad (72.5)$$

where $\bar{\lambda}_{\alpha\beta}$ is the tensor $\lambda_{\alpha\beta}$ averaged over $\omega^2 \partial N_0 / \partial \omega$. In both the limiting cases of high and low temperature, $\bar{\lambda}_{\alpha\beta}$ is independent of temperature: when $T \gg \Theta$, the important phonons in the averaging are those with the temperature-independent quasi-momentum $k \sim k_{\max} \sim 1/d$, and when $T \ll \Theta$ the long-wavelength acoustic phonons are the important ones, with $\lambda_{\alpha\beta}$ independent of k , so that the averaging again causes no dependence on the temperature.

With $\lambda_{\alpha\beta} - \bar{\lambda}_{\alpha\beta} = \tilde{\lambda}_{\alpha\beta}$, we write the transport equation as

$$\omega (\partial N_0 / \partial \omega) \tilde{\lambda}_{\alpha\beta} \dot{U}_{\alpha\beta} = I(\chi). \quad (72.6)$$

Next, let us derive a formula for the dissipation of energy in a non-equilibrium phonon gas. We start from the expression for the entropy per unit volume of a Bose gas:

$$S = \sum_k \int [(N+1) \log(N+1) - N \log N] d^3k / (2\pi)^3 \quad (72.7)$$

(see SP 1, §55). Differentiation with respect to time gives

$$\dot{S} = \sum_k \int \dot{N} \log \frac{N+1}{N} d^3k / (2\pi)^3. \quad (72.8)$$

Replacing $\dot{N}$ here by the integral $C(N)$ (cf. §4) and renaming appropriately the variables $\mathbf{k}, \mathbf{k}_1$ and $\mathbf{k}_2$ in the two terms in (67.6), we can put $\dot{S}$ in the form

$$\begin{aligned} \dot{S} = & \frac{1}{2} \sum_{k_1, k_2, k_3} \int w(k_2, k_3; k_1) \delta(\omega_1 - \omega_2 - \omega_3) \log \frac{(N_1+1) N_2 N_3}{N_1 (N_2+1) (N_3+1)} \times \\ & \times [(N_1+1) N_2 N_3 - N_1 (N_2+1) (N_3+1)] d^3k_1 d^3k_2 / (2\pi)^6 \end{aligned}$$

Multiplication by T gives the dissipative function, i.e. the energy dissipated per unit time and volume. Substituting $N = N_0 + \delta N$, with δN in the form (67.15), and keeping the first (quadratic) terms in the expansion in powers of δN , we find

$$\begin{aligned} T\dot{S} = & \frac{1}{2T} \sum_{k_1, k_2, k_3} \int w(k_2, k_3; k_1) \delta(\omega_1 - \omega_2 - \omega_3) \times \\ & \times (N_{01}+1) N_{02} N_{03} (\chi_1 - \chi_2 - \chi_3)^2 d^3k_1 d^3k_2 / (2\pi)^6 \end{aligned} \quad (72.9)$$

The above formulae are sufficient to determine the temperature dependence of the sound absorption coefficient. Let us first consider the range of high temperatures.

In this case, the collision integral $I(\chi)$ contains the temperature as a factor T^2 (see the beginning of §68). On the left-hand side of the transport equation (72.6), we have $\omega \partial N_0 / \partial \omega \approx -T/\omega$,

and for the majority of the phonons the frequency $\omega \sim \Theta$ is independent of the temperature. For these frequencies, therefore,

$$\chi \sim (1/T)\lambda_{n\beta}\dot{U}_{\alpha\beta}$$

From (72.9), in which we must put $N_0 \approx T/\omega \gg I$, we now find that the dissipative functional is independent of the temperature. The same is true of the absorption coefficient, obtained by dividing the dissipative function by the energy flux in the sound wave, which is independent of the temperature. When $T \gg \Theta$, therefore, both the viscosity part and the thermal-conduction part of the sound absorption coefficient are independent of the temperature.

At low temperatures there is, first of all, a fundamental difference from the problem of thermal conduction: the sound absorption coefficient is finite even when Umklapp processes (whose frequency is small at low temperatures) are neglected. In the thermal conduction case, the absence of any solution of the transport equation when Umklapp processes are neglected was shown by the contradiction arising on multiplication of this equation by $\mathbf{k}$ and integration over the whole phonon spectrum: the right-hand side is then zero, but the left-hand side is certainly not zero; cf. (69.6). For equation (72.6), however, the contradiction does not occur: since its left-hand side is an even function of $\mathbf{k}$, it becomes an odd function on multiplication by $\mathbf{k}$, and vanishes on integration over d^3k . Here we assume that the integral of the term containing the Umklapp process operator, i.e. of $\mathbf{k}I_U(\chi)$, is also zero. Since this is not ensured by any conservation law, a certain condition is thereby imposed on the solution of the transport equation: the function $\chi(\mathbf{k})$ must be even in $\mathbf{k}$ (and $k_C(\chi)$ is then an odd function, since it is easily shown that the operator I does not change the parity of χ). This condition eliminates the arbitrariness due to the existence (in contrast to Umklapp processes) of an "extra" solution of the form $\chi = \mathbf{k} \cdot \delta V'$, an odd function of $\mathbf{k}$, and ensures a correct passage to the limiting case where these processes are absent.

When $T \ll \theta$, phonons with energy $\omega \sim T$ are the most important in the collision integral (and in the dissipative function). These are long-wavelength phonons in the acoustic branches of the spectrum; their frequency varies linearly with k , and they therefore have $k \sim T/u$. According to (66.14), the function w in the integral (67.17) for collisions of such phonons is $w \propto k k_1 k_2$. The distribution function N_0 depends only on the ratio ω/T , so that $N_0 \sim 1$ when $\omega \sim T$. The integration is over $d^3k_1 = k_1^2 dk_1 d\Omega_1$, and for k_1 over a region $\sim T$. Each factor k, k_1, k_2 therefore contributes a factor T to the integral, and the delta function gives a factor $1/T$. Thus the whole integral, as regards its temperature dependence, is estimated as χT^4 . The left-hand side of the transport equation (72.6) is independent of the temperature when $\omega \sim T$. Hence we have, when $\omega \sim T$.

$$\chi \propto T^{-4} \tilde{\lambda}_{\alpha\beta} \dot{U}_{\alpha\beta}$$

A corresponding estimate of the integral (72.9) then leads to the result that the dissipative function, and therefore the viscosity part of the sound absorption coefficient, are inversely proportional to T . Thus

$$\gamma_{vi} \propto \omega^2/T \text{ when } T \ll \Theta. \quad (72.10)$$

The absence of any need for Umklapp processes has the result that this part of the absorption coefficient increases only by a power law with decreasing temperature, not exponentially.

The use of the dissipative function in the foregoing analysis has made it possible to avoid expressing the viscous stress tensor in the crystal in terms of the phonon distribution function. This is not a trivial problem, because the actual momentum flux tensor is involved, and this momentum is not the same as the quasi-momentum of the phonons. We shall show how this expression can in turn be derived from the form of the dissipative function.

To do so, we again start from the integral (72.8), and now write $\dot{N}$ in it as the expression on the left of the transport equation (72.6). The logarithm in the integrand is written in the form (see (67.16))

$$-\log \frac{N}{N+1} = -\log \left[\frac{N_0}{N_0+1} \left(1 + \frac{\chi}{T} \right) \right] \approx \frac{\omega - \chi}{T}.$$

The result is

$$T\dot{S} = \sum_{\mathbf{k}} \int \omega \tilde{\lambda}_{\alpha\beta} \delta N \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \dot{U}_{\alpha\beta} \quad (72.11)$$

where $\delta N = -\chi \partial N_0 / \partial \omega$; the term with the factor ω in place of χ is identically zero, by the definition of $\tilde{\lambda}_{\alpha\beta}$. Instead of $\tilde{\lambda}_{\alpha\beta} = \lambda_{\alpha\beta} - \bar{\lambda}_{\alpha\beta}$, we can here put simply $\lambda_{\alpha\beta}$, since the integral containing the constant factor $\lambda_{\alpha\beta}$ is zero by the further condition (67.14) imposed on δN .

The dissipative function (per unit volume) can be expressed in terms of the viscous stress tensor $\sigma'_{\alpha\beta}$ as $\sigma'_{\alpha\beta} \dot{U}_{\alpha\beta}$; cf. TE, §34. A comparison with (72.11) thus gives the following expression for the viscous stress tensor:

$$\sigma'_{\alpha\beta} = \sum_{\mathbf{k}} \int \omega \lambda_{\alpha\beta} \delta N d^3 k / (2\pi)^3 \quad (72.12)$$

(V. L. Gurevich 1980).

17.1.8 §73. Sound absorption in insulators. Short waves

In the opposite case of short wavelengths, $fl \gg 1$, the process of sound wave damping may be regarded as the result of absorption of individual sound quanta when they collide with thermal phonons (L. D. Landau and Yu. B. Rumer, 1937). For this treatment to be permissible, the energy and momentum of the thermal

phonons must be defined with sufficient precision: when changed by the absorption of a sound quantum, they must come into a range outside the quantum uncertainty due to the finite mean free path, and this is ensured by the inequality $fl \gg 1$. In practice, such a situation can occur only at low temperatures, when the mean free path becomes sufficiently long.

In the first approximation, i.e. when processes involving the smallest number of phonons are considered, we have three-phonon processes:

$$\mathbf{k}_1 + \mathbf{f} = \mathbf{k}_2, \quad \omega_1 + \omega = \omega_2, \quad (73.1)$$

where ω and f are the energy and quasi-momentum of the sound quantum, while $\omega_1, \mathbf{k}_1$ and $\omega_2, \mathbf{k}_2$ belong to thermal phonons. The latter are $\omega_1, \omega_2 \sim T$; $k_1, k_2 \sim T/u$. We shall assume that

$$\hbar\omega \ll T. \quad (73.2)$$

Then ω_1, ω_2 and k_1, k_2 are large compared with ω and f respectively.

As we have seen in §68, the conservation laws (73.1) can be obeyed only if the speed of the thermal phonon exceeds that of the sound quanta absorbed (or emitted). Without entering into a discussion of various possible cases, we shall suppose that the sound wave is not "longitudinal" (i.e. does not correspond to the acoustic branch of the phonon spectrum for which the speed is greatest), and that the condition stated may therefore be satisfied. Since ω and f are small, the initial and final thermal phonons belong in general to the same acoustic branch of the phonon spectrum: at low temperatures, they are long-wavelength phonons.

The probabilities of phonon emission or absorption in a three-phonon process are given by (66.9) or (66.11). The occupation numbers $N_1 \equiv N(\mathbf{k}_1)$ and $N_2 \equiv N(\mathbf{k}_2)$ are given by the Planck equilibrium distribution function (67.9). A macroscopic sound wave corresponds to a very large occupation number for a given phonon state f ; in comparison with it, unity is of course negligible. Omitting the factor $N(f)$, we obtain the probability per sound quantum.

Thus the probability of absorption of a sound quantum in its collisions with thermal phonons having all possible values of k_1 is given by the integral

$$\int A k_1 k_2 f N_1 (N_2 + 1) \delta(\omega_1 + \omega - \omega_2) d^3 k_1 / (2\pi)^3 \quad (73.3)$$

The probability of the inverse process of emission of a phonon f by all possible phonons $\mathbf{k}_2$ is

$$\int A k_1 k_2 f N_2 (N_1 + 1) \delta(\omega_1 + \omega - \omega_2) d^3 k_1 / (2\pi)^3 \quad (73.4)$$

The function w in (66.9) and (66.11) is written, in accordance with (66.14), in the form $A k_1 k_2 f$, all three phonons being long-wavelength ones (A is a function of the directions of all the phonons).

The phonon absorption (the relative rate of decrease of the number of phonons) is determined by the difference of these two probabilities. Since the frequency ω is small in comparison with ω_1 and ω_2 , we have

$$N_1 (N_2 + 1) \sim (N_1 + 1) N_2 = N_1 - N_2 = -(\partial N_1 / \partial \omega_1) \omega$$

The absorption coefficient is therefore

$$\gamma \propto \omega f \int A k_1 k_2 |\partial N_1 / \partial \omega_1| \delta(\omega_1 + \omega - \omega_2) d^3 k_1 \quad (73.5)$$

We are concerned with the dependence of this quantity on the sound frequency ω and the crystal temperature T . It is governed entirely by the fact that all the frequencies in (73.5) are first-order homogeneous functions of the wave vectors. To simplify the discussion, it is sufficient to take $\omega = Uf$, $\omega_1 = uk_1$, $\omega_2 = uk_2$, where U and u are speeds independent of direction.

Since f is small, we can put $k_1 \approx k_2$. For the same reason,

$$\omega_2 - \omega_1 \approx (\partial \omega_1 / \partial \mathbf{k}_1) \cdot \mathbf{f} = uf \cos \theta = \omega(u/U) \cos \theta$$

where θ is the angle between $\mathbf{f}$ and $\mathbf{k}$. Then

$$\delta(\omega_1 + \omega - \omega_2) = \frac{1}{\omega} \delta\left(1 - \frac{u}{U} \cos \theta\right)$$

and the integral (73.5) becomes

$$\gamma \propto \omega \int A k_1^2 \cdot \left| \frac{\partial N_1}{\partial \omega} \right| \delta\left(1 - \frac{u}{U} \cos \theta\right) k_1^2 dk_1 d \cos \theta \quad (73.6)$$

or, after removing the delta function,

$$\gamma \propto \omega \int k_1^4 |\partial N_1 / \partial k_1| dk_1$$

Since N_1 is a function only of the ratio $\omega_1/T = uk_1/T$ (because of the rapid convergence, the integration with respect to k_1 can be extended to infinity), the remaining integral is proportional to T^4 . Thus

$$\gamma \propto \omega T^4 \quad (73.7)$$

Here, the sound absorption coefficient varies linearly with the frequency. With the condition (73.2) assumed above, the sound attenuation mechanism in question is exactly analogous to Landau damping in a plasma. The "resonance electrons" are here represented by phonons moving in phase with the sound wave. There is therefore naturally a resemblance between (73.6) and the Landau damping formula (30.1).

17.2 VIII Quantum Liquids by Landau

17.2.1 §74. Transport equation for quasi-particles in a Fermi liquid

The transport equation for quasi-particles in a normal Fermi liquid has already been discussed (SP 2, §§4 and 5) in connection with the propagation of oscillations in it; the collision integral in the equation was there unimportant. We shall now continue the discussion of the transport equation with a view to its application to dissipative processes relating specifically to collisions.

The quasi-particles in a Fermi liquid have a spin of $\frac{1}{2}$. Accordingly, their distribution function is in general a matrix with regard to the spin variables. However, there is a wide range of problems in which it is sufficient to consider a distribution independent of the spin variables, reducing to a scalar function $n(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ normalized so that $nd^3p/(2\pi\hbar)^3$ is the number of quasi-particles per unit volume with momenta in the range d^3p and a given spin component. This will be assumed in §§74-76.

The characteristic property of the spectrum of a Fermi liquid is that the energy ϵ of the quasi-particles is a functional of the distribution function. When the latter changes by a small amount:

$$n(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = n_0(\mathbf{p}) + \delta n(\mathbf{r}, \mathbf{p}), \quad (74.1)$$

where n_0 is the equilibrium distribution, the energy changes by

$$\delta\epsilon(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \int f(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \delta n(\mathbf{r}, \mathbf{p}') d^3p' / (2\pi\hbar)^3 \quad (74.2)$$

where $f(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$ is the quasi-particle interaction function. Thus the distribution (74.1) corresponds to the quasi-particle energy

$$\epsilon(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \epsilon_0(\mathbf{p}) + \delta\epsilon(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \quad (74.3)$$

where $\epsilon_0(\mathbf{p})$ is the energy corresponding to the equilibrium distribution. The transport equation is

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial \epsilon}{\partial \mathbf{p}} \cdot \frac{\partial n}{\partial \mathbf{r}} - \frac{\partial \epsilon}{\partial \mathbf{r}} \cdot \frac{\partial n}{\partial \mathbf{p}} = C(n). \quad (74.4)$$

Its characteristic feature is that in an inhomogeneous liquid the left-hand side of the equation contains a term involving the derivative $\partial\epsilon/\partial\mathbf{r}$ even in the absence of an external field, because of the coordinate dependence of ϵ (74.3).

The collision integral on the right of (74.4) has the form

$$C(n) = \int w(\mathbf{p}, \mathbf{p}_1; \mathbf{p}', \mathbf{p}'_1) [n'n'_1(1-n)(1-n_1) - nn_1(1-n')(1-n'_1)] \times \\ \times \delta(\epsilon + \epsilon_1 - \epsilon' - \epsilon'_1) d^3p_1 d^3p'_1 (2\pi\hbar)^6 \quad (74.5)$$

where n, n_1, n', n'_1 are functions of the momenta $\mathbf{p}, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}', \mathbf{p}'_1$ of the colliding quasi-particles. The law of conservation of momentum in collisions is assumed already taken into account, so that $\mathbf{p} + \mathbf{p}_1 = \mathbf{p}' + \mathbf{p}'_1$; the integration in (74.5) is therefore taken over only two momenta, not three. The conservation of energy is ensured by the explicitly written delta function. Lastly, w is a function of the momenta which gives the collision probability. The two terms in the square brackets give respectively the numbers of quasi-particles entering and leaving a particular quantum state as a result of collisions. They differ from the corresponding terms in the Boltzmann gas collision integral by the factors $(I - n)$, etc. The presence of these factors is due to the Fermi statistics, whereby collisions can take quasi-particles only into unoccupied states.

The Born approximation is in general not applicable to collisions of quasiparticles in a Fermi liquid. Nevertheless, the probabilities of direct and reverse scattering processes may be assumed to be the same. We are considering quantities already averaged over the directions of the quasi-particle spins. Under these conditions, the scattering probability depends only on the initial and final momenta of the colliding quasi-particles. This enables us to apply the same arguments as were used in §2 when deriving the principle of detailed balancing in the form (2.8). Here it is important that in a Fermi liquid there is again invariance under spatial inversion. We thus arrive at the equation

$$w(\mathbf{p}', \mathbf{p}'_1; \mathbf{p}, \mathbf{p}_1) = w(\mathbf{p}, \mathbf{p}_1; \mathbf{p}', \mathbf{p}'_1),$$

already used in the collision integral (74.5). The function w depends in general on the state occupation numbers, and therefore on the temperature. However, since the temperature is low (an important point in the whole theory of Fermi liquids), w in the collision integral is to be taken as the function calculated for $T = 0$.

The integral (74.5) vanishes identically, as it should, when we substitute for n the Fermi equilibrium distribution function

$$n_0(\epsilon) = \left[\exp\left(\frac{\epsilon - \mu}{T}\right) + 1 \right]^{-1} \quad (74.6)$$

For, since

$$\frac{n_0}{1 - n_0} = \exp\left(-\frac{\epsilon - \mu}{T}\right)$$

we see at once that the law of conservation of energy leads to the equation

$$\frac{n_0 n_{01}}{(1 - n_0)(1 - n_{01})} = \frac{n'_0 n'_{01}}{(I - n'_0)(I - n'_{01})} \quad (74.7)$$

Let us use the transport equation to express the mass, energy and momentum conservation laws in a Fermi liquid in terms of the distribution function. The dependence of the energy of the quasi-particles on their distribution makes this a fairly specific problem.

We integrate both sides of (74.4) over $2d^3p/(2\pi\hbar)^3$; the factor 2 takes account of the two possible directions of the spin. Because of the conservation of number of quasi-particles in collisions, the integral of $C(n)$ is zero. On the left-hand side, the term $-(\partial n/\partial p) \cdot (\partial \epsilon/\partial \mathbf{r})$ is integrated by parts, and the equation then becomes

$$\partial N/\partial t + \text{div } \mathbf{i} = 0,$$

where N is the number density of quasi-particles,

$$\mathbf{i} = \langle \mathbf{v} \rangle, \quad (74.8)$$

and $\mathbf{v} = \partial\epsilon/\partial\mathbf{p}$ is the quasi-particle velocity. † This is the continuity equation for quasi-particles, and i is therefore the quasi-particle flux. Since the number of quasi-particles in a Fermi liquid is the same as the number of actual particles, i is also the flux of actual particles, so that $i = \langle \mathbf{p}/m \rangle$.

Let us now apply the same operations to (74.4) after first multiplying both sides by $\mathbf{p}$. The integral of $\mathbf{p}C(n)$ is zero, because of the conservation of the total momentum of quasi-particles in collisions. The left-hand side in vector components is

$$\frac{\partial \langle p_\alpha \rangle}{\partial t} + \int p_\alpha \left(\frac{\partial n}{\partial x_\beta} \frac{\partial \epsilon}{\partial p_\beta} - \frac{\partial n}{\partial p_\beta} \frac{\partial \epsilon}{\partial x_\beta} \right) \frac{2d^3p}{(2\pi\hbar)^3}$$

The integrand in the second term can be rewritten as

$$\frac{\partial}{\partial x_\beta} \left(p_\alpha \frac{\partial \epsilon}{\partial p_\beta} n \right) + n \frac{\partial \epsilon}{\partial x_\alpha} - \frac{\partial}{\partial p_\beta} \left(p_\alpha \frac{\partial \epsilon}{\partial x_\beta} n \right).$$

On integration, the third term gives zero, and the second term gives the derivative $\partial E/\partial x_\alpha$ of the energy density E of the liquid, the quasi-particle energy in a Fermi liquid being determined by the variation of the internal energy,

$$\delta E = \int \epsilon \delta n \cdot 2d^3p/(2\pi\hbar)^3 \quad (74.9)$$

Thus we have the equation of conservation of momentum in the form

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle p_\alpha \rangle + \frac{\partial \Pi_{\alpha\beta}}{\partial x_\beta} = 0$$

† Here and in the rest of §74, (...) denotes integration over the distribution n :

$$(\dots) = \int \dots n \cdot 2d^3p/(2\pi\hbar)^3$$

where the momentum flux tensor is

$$\Pi_{\alpha\beta} = \langle p_\alpha v_\beta \rangle + \delta_{\alpha\beta} (\langle \epsilon \rangle - E). \quad (74.10)$$

Finally, multiplying both sides of (74.4) by ϵ and integrating, we similarly obtain the equation of conservation of energy:

$$\partial E/\partial t + \text{div } \mathbf{q} = 0$$

where the energy flux is

$$\mathbf{q} = \langle \epsilon \mathbf{v} \rangle. \quad (74.11)$$

In equilibrium, all the fluxes i , $\mathbf{q}$ and $\Pi_{\alpha\beta}$ are zero. We can derive expressions for them that are linear in the small correction δn in the perturbed distribution (74.1).

The equilibrium function n_0 depends only on the energy of the quasi-particle, which in turn corresponds to the equilibrium distribution. Denoting this fact by the suffix zero to ϵ , we write the definition (74.1) in the more precise form

$$n(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = n_0(\epsilon_0) + \delta n(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \quad (74.12)$$

If n_0 is expressed as a function of the actual quasi-particle energy ϵ , we must put

$$n_0(\epsilon_0) = n_0(\epsilon) - \delta\epsilon \cdot \partial n_0/\partial\epsilon$$

and the perturbed distribution function then becomes

$$\begin{aligned} n(\mathbf{r}, \mathbf{p}) &= n_0(\epsilon) + \delta\tilde{n}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \\ \delta\tilde{n} &= \delta n - \delta\epsilon \cdot \partial n_0 / \partial \epsilon \\ &= \delta n - \frac{\partial n_0}{\partial \epsilon} \int f(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \delta n(\mathbf{r}, \mathbf{p}') d^3p' / (2\pi\hbar)^3 \end{aligned} \quad (74.13)$$

Since, in the integrals (74.8)-(74.11), ϵ and $v = \partial\epsilon/\partial\mathbf{p}$ are the actual energy and velocity of the quasi-particle, it is sufficient to substitute n in them in the form (74.13), which gives immediately

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{i} &= \int \mathbf{v} \delta\tilde{n} \cdot 2d^3p / (2\pi\hbar)^3 \\ \mathbf{q} &= \int \epsilon \mathbf{v} \delta\tilde{n} \cdot 2d^3p / (2\pi\hbar)^3 \\ \Pi_{\alpha\beta} &= \int p_\alpha v_\beta \delta\tilde{n} \cdot 2d^3p / (2\pi\hbar)^3 \end{aligned} \right\} \quad (74.14)$$

in the last expression, we have also used (74.9). Now, as the first-order terms in $\delta\tilde{n}$ have been separated, we can of course treat ϵ as $\epsilon_0(\mathbf{p})$ in the integrals (74.14).

As in previous cases, we express δn as

$$\delta n = -\psi \partial n_0 / \partial \epsilon \quad (74.15)$$

In this case, the separation of the factor $\partial n_0 / \partial \epsilon$ has a special significance. The perturbation δn is concentrated in the blurred region of the Fermi distribution. The derivative $\partial n_0 / \partial \epsilon$ too is appreciably different from zero in just that region; when this factor has been separated, the remaining function ψ is a slowly varying one. Together with (74.15), we shall write

$$\begin{aligned} \delta\tilde{n} &= -\varphi \partial n_0 / \partial \epsilon \\ &= n_0 (1 - n_0) \varphi / T, \end{aligned} \quad (74.16)$$

where

$$\varphi = \psi - \int f(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \frac{\partial h_0(\epsilon')}{\partial \epsilon'} \psi(\mathbf{r}, \mathbf{p}') \frac{d^3p'}{(2\pi\hbar)^3}. \quad (74.17)$$

In the zero-order approximation with respect to the small ratio T/ϵ_F , the function $n_0(\epsilon)$ may be replaced by a step function cut off at the limiting energy ϵ_F . Then

$$\partial n_0 / \partial \epsilon = -\delta(\epsilon - \epsilon_F), \quad (74.18)$$

and the integration over d^3p reduces to an integration over the Fermi surface $\epsilon = \epsilon_F$. The volume element between two infinitely close constant-energy surfaces in momentum space is

$$dS d\epsilon | |\partial\epsilon/\partial p|, \quad (74.19)$$

where dS is an area element on the constant-energy surface. The integration over d^3p thus becomes one over the Fermi surface according to the formula

$$\int \dots \delta(\epsilon - \epsilon_F) d^3p = \int \dots dS_F / v_F \quad (74.20)$$

where v_F is the velocity on the Fermi surface. This formula does not assume that the Fermi surface is spherical; on a sphere, $dS_F = p_F^2 d\Omega$ with constant p_F .

After this transformation, the definition (74.17) becomes

$$\varphi(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \psi(\mathbf{r}, \mathbf{p}) + \int f(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \psi(\mathbf{r}, \mathbf{p}') dS'_F / v'_F (2\pi\hbar)^3, \quad (74.21)$$

where $\mathbf{p}_F$ denotes the momentum (with variable direction) on the Fermi surface. The particle flux is

$$i = \int (v_F / v_F) \varphi \cdot 2dS_F / (2\pi\hbar)^3 \quad (74.22)$$

and the momentum flux is given by a similar expression. In the energy flux, the approximation (74.18) is certainly inadequate: it would reduce q simply to the convective energy transfer $\epsilon_F i$, the first term in the expression

$$q = \epsilon_F i - \int v (\epsilon - \epsilon_F) \frac{\partial n_0}{\partial \epsilon} \varphi \frac{2d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \quad (74.23)$$

To linearize the collision integral, it must be noted that the equilibrium distribution $n_0(\epsilon)$ as a function of the actual energy ϵ makes the collision integral zero. † The linearization is thus carried out by substituting n in the form (74.13) and (74.16). The calculations are similar to those in going from (67.6) to (67.17). The expression in the square brackets in (74.5) is written in the form

$$(1-n)(1-n_1)(1-n')(1-n'_1) \left[\frac{n'}{1-n'} \frac{n'_1}{1-n'_1} - \frac{n}{1-n} \frac{n_1}{1-n_1} \right],$$

and we use the fact that

$$\delta \frac{n}{1-n} = \frac{n_0}{1-n_0} \frac{\varphi}{T}$$

The result is

$$\begin{aligned} C(n) &\equiv I(\varphi) \\ &= \frac{I}{T} \int w n_0 n_{01} (1-n'_i) (1-n'_{01}) (\varphi' + \varphi'_1 - \varphi - \varphi_1) \times \\ &\quad \times \delta(\epsilon' + \epsilon'_1 - \epsilon - \epsilon_1) d^3p_1 d^3p' l (2\pi\hbar)^6 \end{aligned} \quad (74.24)$$

Note that the required perturbation of the distribution function (to be found by solving the transport equation) occurs in the collision integral as the same $\delta\bar{n}$ that appears in the fluxes (74.14). If the terms in δn can be omitted on the left of the transport equation (as in calculating the thermal conductivity and the viscosity; see §75), then the quasi-particle distribution function $f(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$ does not occur explicitly in the resulting equations: the equations with f for the unknown δ in are the same as those with $f \equiv 0$ for the unknown δn . In such problems, therefore, the Fermi-liquid effects do not appear, and the situation is formally identical with that for a Fermi gas.

We shall show that a similar case occurs in a particular class of problems where the first-order terms in δn have to be retained on the left-hand side of the transport equation. If the function n_0 is independent of the coordinates, these terms are

$$\begin{aligned} &\frac{\partial \delta n}{\partial t} + \frac{\partial \delta n}{\partial \mathbf{r}} \cdot \frac{\partial \epsilon_0}{\partial \mathbf{p}} - \frac{\partial n_0}{\partial \mathbf{p}} \cdot \frac{\partial \delta \epsilon}{\partial \mathbf{r}} \\ &= \frac{\partial \delta n}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial \delta n}{\partial \mathbf{r}} - \mathbf{v} \frac{\partial n_0}{\partial \epsilon} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \int f(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \delta n(\mathbf{r}, \mathbf{p}') \frac{d^3p'}{(2\pi\hbar)^3} \end{aligned}$$

† This is a general remark, which applies to any collision integral involving Fermi quasi-particles, not only to (74.5).

With $\delta\tilde{n}$ from (74.13), they become

$$\frac{\partial\delta n}{\partial t} - \mathbf{v} \cdot \frac{\partial\delta\tilde{n}}{\partial\mathbf{r}}. \quad (74.25)$$

If the time derivative may be neglected, again only $\delta\tilde{n}$ occurs here.

These statements remain valid not only for an electrically neutral Fermi liquid, discussed here, but also for the electron liquid in metals, which will be considered in Chapter IX. For this reason and in order not to have to return to the topic, some additional comments will be made here.

If the quasi-particles carry an electric charge $-e$, then in the presence of an electromagnetic field the derivative $\dot{\mathbf{p}} = -\partial\epsilon/\partial\mathbf{r}$ contains a further term, the Lorentz force on the charge. Accordingly, the left-hand side of the transport equation contains a term

$$-e \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} \frac{\partial\epsilon}{\partial\mathbf{p}} \times \mathbf{B} \right) \cdot \frac{\partial n}{\partial\mathbf{p}}.$$

The electric field is generally assumed to be weak, and in, the term $-e\mathbf{E} \cdot \partial n/\partial\mathbf{p}$ it is sufficient to put $n = n_0$. The magnetic field term is identically zero for a function $n_0(\epsilon)$ that depends only on ϵ . If the field is strong, however, it may be necessary to retain also the first-order terms in δn . These are

$$-\frac{e}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{B} \cdot \frac{\partial\delta n}{\partial\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \frac{\partial\delta\epsilon}{\partial\mathbf{p}} \times \mathbf{B} \cdot \frac{\partial n_0}{\partial\mathbf{p}} = -\frac{e}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{B} \cdot \left\{ \frac{\partial\delta n}{\partial\mathbf{p}} - \frac{\partial n_0}{\partial\epsilon} \frac{\partial\delta\epsilon}{\partial\mathbf{p}} \right\},$$

where $\mathbf{v} = \partial\epsilon_0/\partial\mathbf{p}$. The factor $\partial n_0/\partial\epsilon$ which depends only on ϵ can be taken under $\partial/\partial\mathbf{p}$ in the braces; its derivative is parallel to $\mathbf{v}$ and gives zero on multiplication by $\mathbf{v} \times \mathbf{B}$. These terms are thus brought to the form

$$-\frac{e}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{B} \cdot \frac{\partial\delta\tilde{n}}{\partial\mathbf{p}}. \quad (74.26)$$

which again contains $\delta\tilde{n}$ only.

17.2.2 §75. Thermal conductivity and viscosity of a Fermi liquid

The temperature dependences of the viscosity and thermal conductivity of a Fermi liquid can be established by simple qualitative arguments (I. Ya. Pomeranchuk 1950).

According to the elementary formula (8.11) in the kinetic theory of gases, the viscosity is $\eta \sim mN\bar{v}l$, where m is the particle mass, N the particle number density, $\bar{v}$ the mean thermal speed and l the mean free path. In the present case, the particles of the kinetic theory are quasi-particles, but since the numbers of each are the same the product mN is a quantity independent of the temperature, namely the

density of the liquid. † The speed $\bar{v} \sim v_F$, where v_F is the temperature-independent speed on the Fermi surface. The mean free path $l \sim v_F\tau$, where τ is the time between quasi-particle collisions. This time varies with temperature as T^{-2} (see SP 2, § 1), so that for the viscosity also

$$\eta \propto T^{-2} \quad (75.1)$$

The thermal conductivity is estimated from (7.10): $\kappa \sim cN\bar{v}l$, where c is the specific heat per particle. For a Fermi liquid $c \propto T$, and so

$$\kappa \propto T^{-1}. \quad (75.2)$$

For an exact determination of η and κ , we have to use the transport equation. The sequence of calculation for the conductivity is as follows.

The left-hand side of the transport equation (74.4) is transformed in a similar way to the procedure in §7 for the thermal conductivity of a classical gas.

Let there be a temperature gradient in the liquid, which is macroscopically at rest. The latter condition implies that the pressure is constant throughout the liquid, and the temperature distribution is steady. On the left of (74.4), we substitute for n and ϵ their local equilibrium values with a temperature varying through the liquid. Then $\partial\epsilon/\partial\mathbf{r} = 0$, and only the term $v.\partial n_0/\partial\mathbf{r}$ remains (we omit the suffix 0 to ϵ and v). The function n involves only the combination $(\epsilon - \mu)/T$, and since we shall seek only the limiting forms as $T \rightarrow 0$, the chemical potential $\mu(T)$ may be taken to have its value at $T = 0$ (which is the same as the limiting energy ϵ_1). Then

$$\begin{aligned} v.\partial n_0/\partial\mathbf{r} &= (\partial n_0/\partial T) \mathbf{v}.\nabla T \\ &= \frac{n_0(1-n_0)}{T} \cdot \frac{\epsilon - \mu}{T} \mathbf{v} \cdot \nabla T \end{aligned}$$

and the transport equation becomes

$$H_0(1-n_0) \frac{\epsilon - \mu}{T^2} \mathbf{v} \cdot \nabla T = I(\varphi) \quad (75.3)$$

with $I(\varphi)$ from (74.24). The solution of this equation must be subjected to a further condition which expresses the absence of any macroscopic mass transfer:

$$\int v\varphi \frac{\partial n_0}{\partial\epsilon} \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} = 0 \quad (75.4)$$

Because of this condition, only the second term remains in the energy flux (74.23).

As already noted in §74, equations (75.3) and (75.4) do not explicitly contain the quasi-particle interaction function, so that the problem of thermal conduction in a Fermi liquid (and the same applies to the viscosity problem) is formally identical with that for a Fermi gas.

In all the integrals, the most important region is that where $\epsilon - \mu \sim T$ and the Fermi distribution is blurred; the quasi-particle momenta are close to the radius p_F of the Fermi sphere, and in this range $\epsilon - \mu = v_F(p - p_F)$. Wherever the momenta occur other than as the difference $p - p_F$, we can put $p = p_F$, and the speed can everywhere be equated to v_F . In particular, this can be done in w , which then becomes a function only of the angles which describe the relative orientation of the vectors $\mathbf{p}, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}', \mathbf{p}'_1$. For given $\mathbf{p}$ and $\mathbf{p}_1$, the law of conservation of momentum fixes the angle between the vectors $\mathbf{p}'$ and $\mathbf{p}'_1 = \mathbf{p} + \mathbf{p}_1 - \mathbf{p}'$; the integration with respect to this angle removes the delta function from the collision integral. There remain integrations over the magnitudes p_t and p' (and over the other angle variables). The integration over these magnitudes is replaced by one over $T^2 du_1 du'$, where $\mathbf{t} = (\epsilon - \mu)/T = v_F(p - p_F)/T$ are variables on which the distribution functions n_0 depend; in view of the rapid convergence, these integrations can be taken from $-x$ to x . We then find that the whole integral $I(\varphi)$ is proportional to T , and the solution of (75.3) is

$$\varphi = -T \quad g(11)v.\nabla T.$$

¹† Since we shall seek the limiting form of the function $\eta(T)$ at low temperatures, this limit is of course meant for all quantities which tend to a finite value as $T \rightarrow 0$.

When this is substituted in (74.23), integration over the directions of v puts the heat flux in the form $q = -\kappa \nabla T$, with

$$\kappa = \frac{8\pi v_F p_F^2}{3T} \int_x^x u g(u) \left| \frac{\partial n_0}{\partial u} \right| du$$

Hence we see again that $\kappa \propto T^{-\frac{5}{2}}$.

The above simplifications of the collision integral are sufficient to solve the transport equation exactly (and the same is true of the viscosity problem). The formulae obtained for κ and η express them in terms of the parameters p_F and v_F and the function w suitably averaged over directions. †

17.2.3 §76. Sound absorption in a Fermi liquid ‡

It has been shown in SP 2 (§4) that the nature of waves propagating in a Fermi liquid depends essentially on the value of the product $\omega\tau$, where τ is the mean free time.

When $\omega\tau \ll 1$, we have ordinary hydrodynamic sound waves. The frequency and temperature dependences of the coefficient γ for the absorption of these waves per unit distance can be found from the familiar formula $\gamma \sim \omega^2 \eta / \rho u^3$, where η is the viscosity, ρ the density of the liquid and u the speed of sound; see *FM*, 77. Since in a Fermi liquid $\eta \propto T^{-2}$, we have

$$\gamma \propto \omega^2 / T^2. \quad (76.1)$$

This result can be more formally derived by noting that the absorption is described by the first correction term (with respect to the small parameter) in the sound dispersion relation:

$$k = (\omega/u)(1 + i\alpha\omega\tau), \quad (76.2)$$

where α is a constant. The imaginary part of this expression (for a real frequency) gives γ ; since $\tau \propto T^{-2}$, we return to (76.1).

When $\omega\tau \sim 1$ the absorption becomes very strong, and the propagation of sound waves cannot occur.

When $\omega\tau \geq 1$ the propagation of weakly damped waves (zero sound) again becomes possible. The absorption is described by a correction term in the dispersion relation, in this case involving the small parameter $1/i\omega\tau$:

$$k = \frac{\omega}{u_0} \left(1 + \frac{i\alpha}{\omega\tau} \right) \quad (76.3)$$

where u_0 is the speed of propagation of zero sound. The absorption coefficient is accordingly proportional to the collision frequency: $\gamma \propto 1/\tau$, and the latter is in turn proportional to the squared width of the blurred region of the quasi-particle distribution. When $\hbar\omega \ll T$, this width is governed by the temperature, so that $1/\tau \propto T^2$, and the absorption coefficient is

$$\gamma = aT^2, \quad T \gg \hbar\omega \gg \hbar/\tau. \quad (76.4)$$

If, however, $\hbar\omega \gg T$ (but still $\hbar\omega \ll \epsilon_F$ as the necessary condition for the whole theory to be applicable), the distribution is blurred in a region of width $\sim \hbar\omega$. The absorption of zero sound is then

$$\gamma = b\omega^2, \quad \hbar\omega \gg T. \quad (76.5)$$

¹† See G. A. Brooker and J. Sykes, *Physical Review Letters* 21, 279. 1968.

‡† The results in this section are due to L. D. Landau (1957).

This case includes, in particular, zero sound of all frequencies at $T = 0$. It will be shown below that there is a relation between the constants a and b in (76.4) and (76.5).

The difference in the nature of the absorption of ordinary and zero sound is due to a difference in their physical nature. In an ordinary sound wave, in any volume element small compared with the wavelength, the quasi-particle distribution corresponds, in the first approximation, to equilibrium for a given local temperature and velocity of the liquid. In this approximation, there is no dissipation, and sound absorption occurs only when we take into account the effect of the temperature and velocity gradients on the quasi-particle distribution. In a zero sound wave, however, the vibrations themselves cause the distribution function to depart from equilibrium in every volume element, and the collisions of quasi-particles cause absorption of sound.

According to the basic ideas of normal Fermi liquid theory, a quasi-particle in such a liquid may be regarded in one sense as a particle in the self-consistent field of the surrounding particles. In a zero sound wave, this field is periodic in time and

space. According to the general rules of quantum mechanics, a collision of two quasi-particles in such a field is accompanied by a change in their total energy and momentum by $\hbar\omega$ and $\hbar\mathbf{k}$ respectively: we may say that in the collision a "zero sound quantum" is emitted or absorbed. † The overall effect of such collisions is to reduce the total number of sound quanta; the sound absorption coefficient is proportional to the rate of this decrease.

With this approach, the absorption coefficient of zero sound is

$$\begin{aligned} \gamma = & \int W \{n_1 n_2 (1 - n'_1) (1 - n'_2) - n'_1 n'_2 (1 - n_1) (1 - n_2)\} \times \\ & \times \delta(\epsilon'_1 + \epsilon'_2 - \epsilon_1 - \epsilon_2 - \hbar\omega) \delta(\mathbf{p}'_1 + \mathbf{p}'_2 - \mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2 - \hbar\mathbf{k}) \times \\ & \times d^3 p_1 d^3 p_2 d^3 p'_1 d^3 p'_2 / (2\pi\hbar)^{12} \end{aligned} \quad (76.6)$$

In the integrand, the delta functions which provide for the conservation of energy and momentum in collisions are shown n explicitly. The first term in the braces corresponds to collisions $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2 \rightarrow \mathbf{p}'_1, \mathbf{p}'_2$ with absorption of a quantum, the second to $\mathbf{p}'_1, \mathbf{p}'_2 \rightarrow \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2$ with emission of a quantum. The function W , which is related to the probability of "radiative" collisions, is determined by the properties of the zero sound wave; this wave itself may be regarded as propagating at $T = 0$ (see SP 2, §4), and W is then independent of the temperature. ‡

It is, however, not necessary to know the function W if we seek only to express the absorption coefficient in terms of its value in the limiting case $\hbar\omega \ll T$. To do so, we note that in the integral (76.6) the only important values of the quasi-particle energies are those in the region of blurring of the Fermi distribution. In this region, the only factors in the integrand which vary rapidly are those containing the functions $n(\epsilon)$. Moreover, the angle integrals in (76.6) are almost unchanged when we go from $\hbar\omega \ll T$ to $\hbar\omega \gg T$. It is therefore sufficient to calculate the integral

$$\begin{aligned} J = & \int \{n_1 n_2 (1 - n'_1) (1 - n'_2) - n'_1 n'_2 (1 - n_1) (1 - n_2)\} \times \\ & \times \delta(\epsilon'_1 + \epsilon'_2 - \epsilon_1 - \epsilon_2 - \hbar\omega) d\epsilon_1 d\epsilon_2 d\epsilon'_1 d\epsilon'_2 \end{aligned} \quad (76.7)$$

taken only with respect to the energies. The proportionality factor between γ and J depends only on ω , not on T , so that it can be found from the limiting value of γ when $\hbar\omega/T \ll 1$.

In the integral (76.7) we can, of course, neglect the slight distortion of the distribution function in the wave, putting

$$n(\epsilon) = [e^{(\epsilon - \mu)I/T} + 1]^{-1}.$$

With the notation

$$x = (\epsilon - \mu)/T, \quad \xi = \hbar\omega/T,$$

we have

$$J = T^3 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{(1 - e^{-\xi}) \delta(x'_1 + x'_2 - x_1 - x_2 - \xi) dx_1 dx_2 dx'_1 dx'_2}{(e^{x_1} + 1)(e^{x_2} + 1)(1 + e^{-x_1})(1 + e^{-x_2})}$$

Because of the rapid convergence of the integral, the range of integration can be extended from $-\infty$ to ∞ .

To carry out the integration, we change to variables y_1, y_2, u_1, u_2 , where $y = x - x', u = e^x$. The integration with respect to u_1 and u_2 is elementary, and gives

$$\begin{aligned} T^{-3} J &= (1 - e^{-\xi}) \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^x \int_0^x \frac{\delta(y_1 + y_2 + \xi) du_1 du_2 dy_1 dy_2}{(u_1 + 1)(u_2 + 1)(u_1 + e^{y_1})(u_2 + e^{y_2})} \\ &= (1 - e^{-\xi}) \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{y_1 y_2 \delta(y_1 + y_2 + \xi)}{(1 - e^{y_1})(1 - e^{y_2})} dy_1 dy_2 \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} y(\xi + y) \left\{ \frac{1}{e^y - 1} - \frac{1}{e^{y+\xi} - 1} \right\} dy \end{aligned}$$

To calculate this difference of two divergent integrals, we first put in a finite lower limit $-\Lambda$, writing

$$\begin{aligned} T^{-3} J &= \int_{-1}^x \frac{y(\xi + y)}{e^y - 1} dy - \int_{-1+\epsilon}^x \frac{y(y - \xi)}{e^y - 1} dy \\ &= 2\xi \int_{-1}^x \frac{y}{e^y - 1} dy - \int_{-1+\xi}^{-1} \frac{y(y - \xi)}{e^y - 1} dy \end{aligned}$$

Intending to take the limit $\Lambda \rightarrow \infty$, we neglect e^y in the denominator of the second integral. The first integral is transformed as follows:

$$\begin{aligned} \int_1^x \frac{y}{e^y - 1} dy &= \int_0^x \frac{y}{e^y - 1} dy + \int_1^0 \frac{y}{e^y - 1} dy \\ &= \frac{1}{6}\pi^2 + \int_{-1}^0 \left(\frac{y}{1 - e^{-y}} - y \right) dy \\ &= \frac{1}{6}\pi^2 + \int_0^1 \frac{y}{e^y - 1} dy + \frac{1}{2}\Lambda^2 \end{aligned}$$

Cancelling terms and then taking the limit $\Lambda \rightarrow \infty$, we have finally

$$J = \frac{2}{3}\pi^2 \xi T^3 (1 + \xi^2/4\pi^2)$$

The proportionality factor between γ and J is found, as already mentioned, from the condition that when $\xi \ll 1$ we have $\gamma = aT^2$ from (76.4). This gives

$$\gamma = a [T^2 + (\hbar\omega/2\pi)^2] \quad (76.8)$$

In particular, in the limit of high frequencies $\hbar\omega \geq T$, we hence obtain

$$\gamma = (a/4\pi^2) (\hbar\omega)^2, \quad (76.9)$$

¹† Such emission or absorption by one quasi-particle is impossible, since the speed of zero sound exceeds the Fermi speed v_F .

‡ To avoid misunderstanding, it should be emphasized that W is not the same as w in the collision integral (74.5).

which establishes the relation between the coefficients in (76.4) and (76.5).

17.2.4 §77. Transport equation for quasi-particles in a Bose liquid

If the mean free path of quasi-particles in a Bose superfluid is small in comparison with the characteristic dimensions of the problem, the motion of the liquid is described by the Landau equations of two-velocity hydrodynamics (see *FM*, Chapter XVI). The dissipative terms in these equations contain several transport coefficients (the thermal conductivity and four viscosity coefficients). Their calculation requires a detailed discussion of various scattering processes, the multiplicity of which is due to the existence of two types of quasi-particles (phonons and rotons). Actually, in liquid helium, the situation is further complicated by the instability of the initial part of the phonon spectrum. Such topics will not be discussed here.

The mean free paths of the quasi-particles increase as the temperature falls, if only because of the decrease in their number density. Hence, at sufficiently low temperatures, there can easily be a considerable disequilibrium of the quasi-particle system. Under these conditions, the equations of two-velocity hydrodynamics are not applicable. The concepts of the temperature and of the normal velocity v_n also cease to be meaningful (they can be defined only in terms of an equilibrium distribution of quasi-particles), and along with v_n so does the separation of the liquid density into superfluid and normal parts. The total density ρ and the superfluid velocity v_s , however, retain their meaning, and in this respect are essentially mechanical variables. The whole set of equations describing a superfluid must then consist of the transport equation for the quasi-particle distribution function $n(t, \bar{x}, \bar{p})$, the continuity equation for the density ρ , and the equation for the velocity $\mathbf{v}_s$.

The transport equation has the usual form [†]

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial n}{\partial \mathbf{r}} \cdot \frac{\partial \tilde{\epsilon}}{\partial \mathbf{p}} - \frac{\partial n}{\partial \mathbf{p}} \cdot \frac{\partial \tilde{\epsilon}}{\partial \mathbf{r}} = C(n), \quad (77.1)$$

where $\tilde{\epsilon}$ is the quasi-particle energy, depending on the superfluid velocity v_s as a parameter; the symbol ϵ is retained for the quasi-particle energy in a fluid at rest. The relation between ϵ and $\tilde{\epsilon}$ is established as follows.

By definition, $\epsilon(p)$ is the dispersion relation for quasi-particles in a frame of reference K_0 such that $v_s = 0$. That is, in the presence of only one quasi-particle the energy of the liquid (relative to that at $T = 0$) is $\epsilon(p)$, and its momentum is equal to the momentum p of the quasi-particle. We make a Galilean transformation to a

frame of reference K at rest, in which the superfluid velocity is v_s . In this frame, the energy and momentum of a mass M of the liquid are

$$E = \epsilon(p) + \mathbf{p} \cdot \mathbf{v}_s + \frac{1}{2} M v_s^2, \quad \mathbf{P} = \mathbf{p} + M \mathbf{v}_s. \quad (77.2)$$

From this we see that, in a liquid in superfluid motion, the energy of a quasiparticle is

$$\tilde{\epsilon}(\mathbf{p}) = \epsilon(p) + \mathbf{p} \cdot \mathbf{v}_s; \quad (77.3)$$

cf. the arguments in the derivation of the superfluidity condition (*SP2*, 23).

The derivatives which occur in the transport equation are therefore [†]

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial \tilde{\epsilon}}{\partial \mathbf{p}} &= \frac{\partial \epsilon}{\partial \mathbf{p}} + \mathbf{v}_s, \\ \frac{\partial \tilde{\epsilon}}{\partial \mathbf{r}} &= \frac{\partial \epsilon}{\partial \mathbf{r}} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} (\mathbf{p} \cdot \mathbf{v}_s) = \frac{\partial \epsilon}{\partial \rho} \nabla \rho + (\mathbf{p} \cdot \nabla) \mathbf{v}_s \end{aligned} \right\} \quad (77.4)$$

^{††} It is, of course, assumed that the quasi-classicality condition is satisfied: all quantities vary only slightly over distances of the order of the quasi-particle wavelength $\hbar/p$.

In the second equation, we have used the facts that the energy ϵ depends on the variable density ρ , and so may depend on the coordinates; and (in transforming the derivative of $\mathbf{p} \cdot \mathbf{v}_s$) that the superfluid flow is always a potential flow:

$$\text{curl } v_s = 0. \quad (77.5)$$

The continuity equation for the density is

$$\partial \rho / \partial t + \text{div } \mathbf{i} = 0 \quad (77.6)$$

where $\mathbf{i}$ is by definition the momentum of the liquid per unit volume. An expression for i can be found directly from the second formula (77.2) by summation over all the quasi-particles in unit volume:

$$\mathbf{i} = \rho \mathbf{v}_s + \langle \mathbf{p} \rangle \quad (77.7)$$

Here and in the rest of §77, the angle brackets denote integration over the momentum distribution:

$$\langle \dots \rangle = \int \dots n d^3 p / (2\pi\hbar)^3$$

It remains to derive an equation for the superfluid velocity. To do so, we start from the law of conservation of momentum, expressed by

$$\frac{\partial i_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial \Pi_{\alpha\beta}}{\partial x_\beta} = 0, \quad (77.8)$$

where i is given by (77.7) and $\Pi_{\alpha\beta}$ is the momentum flux tensor. Let $\Pi_{\alpha\beta}^{(0)}$ be the value of this tensor in the frame of reference K_0 . Transformation to the frame K yields [†]

$$\begin{aligned} \Pi_{\alpha\beta} &= \Pi_{\alpha\beta}^{(0)} + \rho v_{s\alpha} v_{s\beta} + v_{s\alpha} i_\beta^{(0)} + v_{s\beta} i_\alpha^{(0)} \\ &= \Pi_{\alpha\beta}^{(0)} + \rho v_{s\alpha} v_{s\beta} + v_{s\alpha} \langle p_\beta \rangle + v_{s\beta} \langle p_\alpha \rangle; \end{aligned} \quad (77.9)$$

$\mathbf{i}^{(i)} = \langle \mathbf{p} \rangle$ is the momentum per unit volume of the liquid in the frame K_0 . This determines the dependence of the tensor $\Pi_{\alpha\beta}$ on the velocity v_s .

For a further transformation of equation (77.8), we go back to the transport equation (77.1), multiply it by p_α , and integrate over $d^3 p / (2\pi\hbar)^3$. Because the total momentum of the quasi-particles is conserved in collisions, the right-hand side of the equation becomes zero. The integral on the left-hand side is transformed exactly as in the derivation of (74.10), giving

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle p_\alpha \rangle + \frac{\partial}{\partial x_\beta} \left\langle p_\alpha \frac{\partial \epsilon}{\partial p_\beta} \right\rangle + \left\langle \frac{\partial \epsilon}{\partial x_\alpha} \right\rangle = 0. \quad (77.10)$$

We now substitute in (77.8) the expressions (77.7) and (77.9) for $\mathbf{i}$ and $\Pi_{\alpha\beta}$, and then eliminate $\partial \rho / \partial t$ and $\partial \langle \mathbf{p} \rangle / \partial t$ by means of (77.6) and (77.10). The result is

$$\frac{\partial v_{s\alpha}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \frac{v_s^2}{2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial \Pi_{\alpha\beta}^{(0)}}{\partial x_\beta} - \frac{1}{\rho} \left\langle \frac{\partial \epsilon}{\partial p_\rho} \right\rangle \frac{\partial \rho}{\partial x_\alpha} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_\beta} \left\langle p_\alpha \frac{\partial \epsilon}{\partial p_\beta} \right\rangle = 0.$$

[†]Formula (77.2) has been derived, strictly speaking, for a homogeneous superfluid flow ($v_s = \text{constant}$). In an inhomogeneous flow, the energy may contain terms in the spatial derivatives of v_s . However, if v_s is assumed to vary slowly, these terms would lead to corrections of higher orders of smallness in the transport equation.

From the condition $\text{curl } \mathbf{v}_s = 0$ (which has already been used in the second term) it follows that the sum of the last three terms must be the gradient of some function. Moreover, the tensor $\Pi_{\alpha\beta}^{(0)}$ in the absence of quasi-particles must be equal to $P_0\delta_{\alpha\beta}$, where $P_0(\rho)$ is the pressure of the liquid at $T = 0$. These arguments give as the only possible form of $\Pi_{\alpha\beta}^{(0)}$

$$\Pi_{\alpha\beta}^{(0)} = \langle p_\alpha \partial \epsilon / \partial p_\beta \rangle + \delta_{\alpha\beta} [P_0 + \rho \langle \partial \epsilon / \partial \rho \rangle]. \quad (77.11)$$

The equation for v_s now becomes

$$\frac{\partial v_s}{\partial t} + \nabla \left[\frac{1}{2} v_s^2 + \frac{\mu_0}{m} + \left\langle \frac{\partial \epsilon}{\partial \rho} \right\rangle \right] = 0 \quad (77.12)$$

where μ_0 is the chemical potential of the liquid (at $T = 0$), related to the pressure P_0 by the thermodynamic formula $d\mu_0 = m dP_0 / \rho$ (where m is the mass of a liquid particle and m/ρ the molecular volume).

Equations (77.1), (77.6) and (77.12) form a complete set for the description of a superfluid in the non-equilibrium state (I. M. Khalatnikov 1952).

For completeness, let us also consider the law of conservation of energy. This is expressed by

$$\partial E / \partial t + \text{div } \mathbf{q} = 0, \quad (77.13)$$

† The Galilean transformation formula for $\Pi_{e,\beta}$ is easily found by considering a classical system of particles, for which $\Pi_{\alpha\beta} = \sum \rho_\alpha v_\beta = \sum n v_\alpha t_\beta$, where the summation is over all the particles in unit volume.

where q is the energy flux in the liquid. According to (77.2),

$$E = E_0(\rho) + \langle \epsilon \rangle + \mathbf{v}_s \cdot \langle \mathbf{p} \rangle + \frac{1}{2} \rho v_s^2, \quad (77.14)$$

where $E_0(\rho)$ is the energy at $T = 0$, related to the chemical potential by $dE_0 = \mu_0 d\rho / m$. By differentiating (77.14) with respect to time and using the equations already available for the various quantities, the energy flux can be found. Passing over the calculations, we shall give the final result:

$$\mathbf{q} = (\langle \mathbf{p} \rangle + \rho \mathbf{v}_s) \left[\frac{\mu_0}{m} + \left\langle \frac{\partial \epsilon}{\partial \rho} \right\rangle + \frac{1}{2} v_s^2 \right] + \left\langle (\epsilon + \mathbf{p} \cdot \mathbf{v}_s) \left(\frac{\partial \epsilon}{\partial \mathbf{p}} + \mathbf{v}_s \right) \right\rangle. \quad (77.15)$$

The equilibrium quasi-particle distribution function in a frame of reference where the "quasi-particle gas" is at rest as a whole (i.e. the normal velocity $v_n = 0$) is the ordinary Bose distribution with the quasi-particle energy $\tilde{\epsilon}$ given by (77.3). The distribution in a frame where the normal velocity is not zero is obtained on replacing $\tilde{\epsilon}$ by $\tilde{\epsilon} - \mathbf{p} \cdot \mathbf{v}_n$. Thus the equilibrium distribution of quasi-particles when both motions are present is

$$n(p) = \left[\exp \frac{\epsilon + (\mathbf{v}_s - \mathbf{v}_n) \cdot \mathbf{p}}{T} - 1 \right]^{-1} \quad (77.16)$$

By averaging the above equations over this distribution, the equations of two-velocity hydrodynamics (without the dissipative terms, in this approximation) can be derived, but we shall not pause to do so here.

PROBLEM

Determine the sound absorption coefficient in a Bose liquid at frequencies $\omega \gg \nu$, where ν is the quasi-particle collision frequency. The temperature is assumed so low that almost all the quasi-particles are phonons (A. F. Andreev and I. M. Khalatnikov 1963).

Solution. Under the conditions stated, we can neglect the collision integral in (77.1). We put $\rho = \rho_0 + \delta\rho$, $n = n_0 + \delta n$ (where $\delta\rho$ and δn are small corrections to the equilibrium density of the liquid and the equilibrium phonon distribution function), and linearize equations (77.1), (77.6) and (77.12) with respect to the small quantities $\delta\rho$, δn and v_v . Assuming all these proportional to $\exp(-i\omega t + ik \cdot r)$, we find

$$(k \cdot v - \omega)\delta n = \frac{\partial n}{\partial \epsilon} v \cdot k \left(\frac{\partial \epsilon}{\partial \rho} \delta\rho + p \cdot v_5 \right) \quad (1)$$

$$\omega \delta\rho - k \cdot v \cdot \rho = \int k \cdot p \delta n d^3p / (2\pi h)^3 \quad (2)$$

$$\omega v_5 - k u_n^2 \delta\rho / \rho = k \int \{ n (\partial^2 \epsilon / \partial \rho^2) \delta\rho + (\partial \epsilon / \partial \rho) \delta n \} d^3p / (2\pi h)^3 \quad (3)$$

Here we have used the thermodynamic relations

$$d(\mu_0/m) = dP_0/\rho = u_0^2 d\rho/\rho$$

where u_0 is the speed of sound at $T = 0$: the subscript 0 to ρ and n is omitted here and henceforward.

Since the number of phonons is small at temperatures near zero, the expressions on the right of equations (1)-(3) are small corrections. Omitting them altogether, we have from (2) and (3)

$$\omega = H_0 k, \quad v_5 = H_0 (\delta\rho/\rho) k/k. \quad (4)$$

In the next approximation we substitute these on the right of (1):

$$\delta n = \frac{\partial n}{\partial \epsilon} \frac{v \cos \theta}{v \cos \theta - \omega/k} \left(\frac{\partial \epsilon}{\partial \rho} + \frac{p \mu_0}{\rho} \cos \theta \right) \delta\rho \quad (5)$$

where θ is the angle between p and k . The phonon dispersion relation is written

$$\epsilon(p) = u_0 p (1 + \alpha p^2), \quad v = \partial \epsilon / \partial p = u_0 (1 + 3\alpha p^2),$$

including the next term after the linear one in the expansion; for liquid helium at ordinary pressures, $\alpha > 0$, which means that the phonons are unstable with respect to spontaneous decay.

The presence of a "resonance" denominator in (5) leads (see below) to a large logarithmic factor in the integration. We use only logarithmic accuracy and neglect on the right of (3) the term in $\delta\rho$, which does not have such a denominator. Then, eliminating v , from (2) and (3), we finally arrive at the dispersion relation

$$\frac{\omega^2}{k^2} - u_0^2 = A \frac{u_0^2}{\rho} \int \frac{p^2}{\cos \theta - 1 + 3\alpha p^2 - 10} \frac{\partial n}{\partial \epsilon} \frac{d^2 p}{(2\pi h)^3} \quad (6)$$

where

$$A = \left(1 + \frac{p}{u_0} \frac{du_0}{dp} \right)^2$$

The imaginary part of the integral with respect to $\cos \theta$ is determined by passing round the pole (which is in the range of integration $\alpha > 0$). The real part is calculated with logarithmic accuracy by cutting off the integration at the lower limit $1 - \cos \theta \sim \alpha p^2 \sim \alpha T^2 / \mu_0^2$ and at the upper limit $1 - \cos \theta \sim 1$. The left-hand side of equation (6) is written as $2\mu u \delta u - \mu u \gamma / \omega$, where γ is the absorption coefficient and δu the correction to the speed of sound ($u = u a^+ \delta u$). Calculation of the integral gives

$$\delta u = (3\rho_n u_1 A / 4\rho) \log(u_1^2 / \alpha T^2), \quad \gamma = 3\pi\omega\rho_n A / 4\rho \quad (7)$$

where $\rho_n = 2\pi^2 T^1 / 45 h^2 u_n^5$ is the phonon part of the normal density of the liquid. The frequency and temperature dependences of γ are, of course, the same as those found in §73.

17.3 Typical Kinetic Phenomena with Electrons

Первое, что хочется научиться делать с твердыми телами - это считать разные электрические явления. Поэтому научимся это делать.

17.3.1 Parameters Used for Description of Electric Phenomena

Для электрических явлений вводятся некоторые параметры, которые ранее не были нужны. Приведем их обзор, чтобы ориентироваться в их смысле и свойствах.

электрический ток и его плотность

Плотность электрического тока имеет вид:

$$j^\alpha = -2e \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} v^\alpha \delta f$$

$\Pi_{\alpha\beta}$ - тензор плотности потока импульса

!! посчитать его хотя бы раз!!!

По определению тензор плотности потока

$$\Pi_{\alpha\beta} = \int p_\alpha v_\beta f d\Gamma = \int m v_\alpha v_\beta f d\Gamma$$

показывает, сколько α -ой компоненты импульса переносится молекулами в β -ом направлении ??? в 1 с через единичную площадку, ??? перпендикулярную оси x_β .

Связан с плотностью тока и удельной поляризацией так:

???

... см про плазму задачу (????)

используется в уравнении для потока импульса:

$$\frac{\partial j_i}{\partial t} + \frac{\partial \Pi_{ik}}{\partial x_k} = 0$$

??

удельная поляризация

коэффициент температуропроводности Q или коэффициент Зеебека

проводимость тензорная (!!!)

(важная тема из задавальника кст)

сечение рассеяния**магнитосопротивление**

Магнитосопротивление

$$\Delta\rho_{xx}(B) = \rho_{xx}(B) - \rho_{xx}(0)$$

свойства...

17.3.2 Drude Model**мотивация**

вроде одна из первых теорий, с которой познакомится следует.

итоговые формулы

Кинетическое уравнение Больцмана в приближении времени релаксации приводит для проводимости электронного газа к формуле Друде:

$$\sigma = \frac{ne_0^2\tau}{m^*}$$

σ - электрическая удельная проводимость n - концентрация электронов e_0 - элементарный заряд τ - время релаксации по импульсам (время, за которое электрон «забывает» о том, в какую сторону двигался) m^* - эффективная масса электрона. Ниже приведён вывод этого выражения для классического случая без учёта реального потенциала рассеяния.

Эта формула применима также к электронному и дырочному газу в полупроводниках (Формулу можно записать в другом виде для вырожденного электронного или дырочного газа $\sigma = e_0^2 D g$, где D - коэффициент диффузии электронов или дырок, а g - плотность электронных или дырочных состояний, причём все физические величины берутся на поверхности Ферми).

Плотности состояний в двумерном проводнике

$$g = g_s g_v \frac{m^*}{2\pi\hbar^2}$$

где g_s - спиновое вырождение, g_v - долинное вырождение, m^* - эффективная масса и не зависит от энергии.

$g_s = 2$ а долинное вырождение для GaAs $g_v = 1$ Для носителей тока с параболическим законом дисперсии (энергия отсчитывается от дна зоны проводимости)

$$E_F = \frac{mv_F^2}{2}$$

где v_F - скорость носителей на уровне Ферми, и $g = n/E_F$, можно получить выражение Друде для двумерно электронного газа

$$\sigma = e_0^2 D \frac{n}{E_F} = \frac{2e_0^2 n D}{m^* v_F^2} = \frac{n e_0^2 2D}{m^* v_F^2} = \frac{n e_0^2}{m^*} \tau$$

Вывод**17.3.3 Kinetic Equations for Electrons in Material**

Заготовим уравнения, которые будем далее использовать для моделей.

17.3.4 Scattering on Random Potential

интересная задача, которая хорошо иллюстрирует методы кинетики.

17.3.5 Ohm's Law and $\rho_{\alpha\beta}(\omega, B)$

формулировка

потом запишу

границы применимости

актуально их четко понять

обзор обобщений

тоже интересно

итоговые формулы(?!)

Проводимость имеет вид:

$$\sigma_{\alpha\beta}(\omega, B) = ne^2\tau \begin{pmatrix} \frac{(1-i\omega\tau)/m_x^*}{(1-i\omega\tau)^2+(\omega_c\tau)^2} & \mp \frac{\omega_c\tau/\sqrt{m_x^*m_y^*}}{(1-i\omega\tau)^2+(\omega_c\tau)^2} & 0 \\ \pm \frac{\omega_c\tau/\sqrt{m_x^*m_y^*}}{(1-i\omega\tau)^2+(\omega_c\tau)^2} & \frac{(1-i\omega\tau)/m_y^*}{(1-i\omega\tau)^2+(\omega_c\tau)^2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{(1-i\omega\tau)m_z^*} \end{pmatrix}$$

где $\omega_c \equiv \frac{eB}{m_{\perp}^*c}$, а также $m_{\perp}^* \equiv \sqrt{m_x^*m_y^*}$ - циклотронная частота.
закон Ома - см далее.

δf из уравнения Власова

Все наши параметры выражаются через δf , так что его следует определить, делается это, как всегда, через кинетические уравнения.

В присутствии внешнего магнитного поля $\mathbf{B}$ линейаризованное уравнение Больцмана имеет вид:

$$\frac{\partial \delta f}{\partial t} - e\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\mathcal{E}} \frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon} - \frac{e}{\hbar c} \mathbf{v} \times \mathbf{B} \cdot \frac{\partial \delta f}{\partial \mathbf{k}} = \mathcal{L} \delta f$$

Получим точное решение для тау-приближения $\mathcal{L} \delta f = -\delta f/\tau$ и приближения эффективной массы,

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \pm \frac{1}{2} \hbar^2 m_{\alpha\beta}^{-1} k^{\alpha} k^{\beta}$$

поэтому

$$v^{\alpha} = \pm \hbar m_{\alpha\beta}^{-1} k^{\beta}$$

где знак “+” для электронов, а знак “−” для дырок.

При $\boldsymbol{\mathcal{E}}(t) = \boldsymbol{\mathcal{E}} e^{-i\omega t}$ найдем решение в виде

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

где $\mathbf{A}(\varepsilon)$ это векторная функция от ε , которую будем определять.

Имеем:

$$(\tau^{-1} - i\omega) k^{\mu} A^{\mu} - \frac{e}{\hbar c} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} v^{\alpha} B^{\beta} \frac{\partial}{\partial k^{\gamma}} (k^{\mu} A^{\mu}) = e\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\mathcal{E}} \frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon}$$

где $\epsilon_{\alpha\beta\gamma}$ это тензор Леви-Чивиты.

Заметим, что

$$\begin{aligned}\epsilon_{\alpha\beta\gamma}v^\alpha B^\beta \frac{\partial}{\partial k^\gamma} (k^\mu A^\mu) &= \epsilon_{\alpha\beta\gamma}v^\alpha B^\beta \left(A^\gamma + k^\mu \frac{\partial A^\mu}{\partial k^\gamma} \right) \\ &= \epsilon_{\alpha\beta\gamma}v^\alpha B^\beta \left(A^\gamma + \hbar k^\mu v^\gamma \frac{\partial A^\mu}{\partial \varepsilon} \right) \\ &= \epsilon_{\alpha\beta\gamma}v^\alpha B^\beta A^\gamma\end{aligned}$$

за счет асимметричности тензора Леви-Чивиты $\epsilon_{\alpha\beta\gamma}v^\alpha v^\gamma = 0$.

теперь подставим $\hbar k^\alpha = \pm m_{\alpha\beta}v^\beta$, and match the coefficients of v^α in each term of the Boltzmann equation.

Получим

$$\left[(\tau^{-1} - i\omega) m_{\alpha\beta} \pm \frac{e}{c} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} B^\gamma \right] A^\beta = \pm \hbar e \frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon} \mathcal{E}^\alpha$$

Поскольку неизвестно, как решать это уравнение, просто определим функцию

$$\Gamma_{\alpha\beta} \equiv (\tau^{-1} - i\omega) m_{\alpha\beta} \pm \frac{e}{c} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} B^\gamma,$$

которая будет отражать все неизвестные параметры. Теперь запишем решение в виде

$$\delta f = e v^\alpha m_{\alpha\beta} \Gamma_{\beta\gamma}^{-1} \mathcal{E}^\gamma \frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon}$$

плотность тока и тензор проводимости: начало вывода

Теперь мы можем получить плотность тока и тензор проводимости.

Плотность электрического тока имеет вид:

$$\begin{aligned}j^\alpha &= -2e \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} v^\alpha \delta f \\ &= +2e^2 \mathcal{E}^\gamma \int_{\hat{\Omega}} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} v^\alpha v^\nu m_{\nu\beta} \Gamma_{\beta\gamma}^{-1}(\varepsilon) \left(-\frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon} \right)\end{aligned}$$

где мы делаем поправку на зависящее от энергии время релаксации $\tau(\varepsilon)$.

Note that $\Gamma_{\alpha\beta}(\varepsilon)$ is energydependent due to its dependence on τ .

Проводимость имеет вид:

$$\begin{aligned}\sigma_{\alpha\beta}(\omega, B) &= 2\hbar^2 e^2 m_{\alpha\mu}^{-1} \left\{ \int_{\hat{\Omega}} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} k^\mu k^\nu \left(-\frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon} \right) \Gamma_{\nu\beta}^{-1}(\varepsilon) \right\} \\ &= \pm \frac{2}{3} e^2 \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \varepsilon g(\varepsilon) \Gamma_{\alpha\beta}^{-1}(\varepsilon) \left(-\frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon} \right)\end{aligned}$$

where the chemical potential is measured with respect to the band edge.

Поэтому,

$$\sigma_{\alpha\beta}(\omega, \mathbf{B}) = n e^2 \langle \Gamma_{\alpha\beta}^{-1} \rangle,$$

где среднее значение определено как

$$\langle \Gamma_{\alpha\beta}^{-1} \rangle \equiv \frac{\int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \varepsilon g(\varepsilon) \left(-\frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon} \right) \Gamma_{\alpha\beta}^{-1}(\varepsilon)}{\int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \varepsilon g(\varepsilon) \left(-\frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon} \right)}$$

Величина n это плотность носителей,

$$n = \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon g(\varepsilon) \times \begin{cases} f^0(\varepsilon) & \text{(electrons)} \\ \{1 - f^0(\varepsilon)\} & \text{(holes)} \end{cases}$$

For the sake of simplicity, let us assume an energy-independent scattering time, or that the temperature is sufficiently low that only $\tau(\varepsilon_F)$ matters, and we denote this scattering time simply by τ .

удельное сопротивление

В итоге получаем удельное сопротивление ρ как обратную проводимость $(\sigma_{\alpha\beta})^{-1} = (ne^2\Gamma_{\alpha\beta}^{-1})^{-1}$

$$\rho_{\alpha\beta} = \frac{1}{ne^2}\Gamma_{\alpha\beta} = \frac{1}{ne^2} \left[(\tau^{-1} - i\omega) m_{\alpha\beta} \pm \frac{e}{c} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} B^\gamma \right]$$

Запишем сопротивление в компонентах.

Будем предполагать, что $\mathbf{B}$ направлено вдоль одной из главных осей тензора эффективной массы $m_{\alpha\beta}$, который мы определяем как $\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{y}},$ и $\hat{\mathbf{z}}$, в этом случае

$$\rho_{\alpha\beta}(\omega, B) = \frac{1}{ne^2} \begin{pmatrix} (\tau^{-1} - i\omega) m_x^* & \pm eB/c & 0 \\ \mp eB/c & (\tau^{-1} - i\omega) m_y^* & 0 \\ 0 & 0 & (\tau^{-1} - i\omega) m_z^* \end{pmatrix}$$

где $m_{x,y,z}^*$ are the eigenvalues of $m_{\alpha\beta}$ and B lies along the eigenvector $\hat{\mathbf{z}}$.

Заметим, что $\rho_{xx}(\omega, B) = \frac{m_x^*}{ne^2\tau}(1 - i\omega\tau)$ независима от B .

Следовательно, магнитосопротивление

$$\Delta\rho_{xx}(B) = \rho_{xx}(B) - \rho_{xx}(0)$$

vanishes: $\Delta\rho_{xx}(B) = 0$.

While this is true for a single parabolic band, deviations from parabolicity and contributions from other bands can lead to a nonzero magnetoresistance.

плотность тока и тензор проводимости: получение итоговых формул

Тензор проводимости $\sigma_{\alpha\beta}$ есть обратная матрица от $\rho_{\alpha\beta}$.

Используя выражение для обратной матрицы, $\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}^{-1} = 1/(ad - bc) \begin{pmatrix} d & -b \\ -c & a \end{pmatrix}$, получаем

$$\sigma_{\alpha\beta}(\omega, B) = ne^2\tau \begin{pmatrix} \frac{(1-i\omega\tau)/m_x^*}{(1-i\omega\tau)^2 + (\omega_c\tau)^2} & \mp \frac{\omega_c\tau/\sqrt{m_x^*m_y^*}}{(1-i\omega\tau)^2 + (\omega_c\tau)^2} & 0 \\ \pm \frac{\omega_c\tau/\sqrt{m_x^*m_y^*}}{(1-i\omega\tau)^2 + (\omega_c\tau)^2} & \frac{(1-i\omega\tau)/m_y^*}{(1-i\omega\tau)^2 + (\omega_c\tau)^2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{(1-i\omega\tau)m_z^*} \end{pmatrix}$$

где $\omega_c \equiv \frac{eB}{m_\perp^*c}$, а также $m_\perp^* \equiv \sqrt{m_x^*m_y^*}$ - циклотронная частота.

Поэтому диагональные проводимости равны:

$$\sigma_{xx}(\omega, B) = \frac{ne^2\tau}{m_x^*} \frac{1 - i\omega\tau}{1 + (\omega_c^2 - \omega^2)\tau^2 - 2i\omega\tau} \quad (17.1)$$

$$\sigma_{zz}(\omega, B) = \frac{ne^2\tau}{m_z^*} \frac{1}{1 - i\omega\tau} \quad (17.2)$$

Заметим, что $\sigma_{xx,yy}$ являются независимыми от поля, в отличие от соответствующих компонент тензора удельного сопротивления.

(???)

Также мы получили, зная вид всех коэффициентов, что

$$j_\alpha(\omega) = \sigma_{\alpha\beta}(\omega, \mathbf{B}) E_\beta(\omega)$$

выполнение принципе Онзагера в случае электронов

Частный случай соотношений Онзагера:

$$\sigma_{\alpha\beta}(\omega, B) = \sigma_{\beta\alpha}(\omega, -B).$$

ток $j_\alpha = \sigma_{\alpha\beta} \otimes E_\beta$

Докажем, что

$$j_\alpha = \sigma_{\alpha\beta} \otimes E_\beta.$$

(???)

Произведем преобразование Фурье:

$$j_\alpha(t) = \int_{\mathbb{R}} j_\alpha(\omega) \exp(-i\omega t) \frac{d(\omega)}{2\pi}$$

Далее подставим

$$j_\alpha(\omega) = \sigma_{\alpha\beta}(\omega, \mathbf{B}) E_\beta(\omega)$$

и сделаем преобразования

$$\begin{aligned} j_\alpha(t) &= \int_{\mathbb{R}} \sigma_{\alpha\beta}(\omega, \mathbf{B}) E_\beta(\omega) \exp(-i\omega t) \frac{d(\omega)}{2\pi} \\ &= \int_{\mathbb{R}} \frac{d(\omega)}{2\pi} \sigma_{\alpha\beta}(\omega, \mathbf{B}) \int_{\mathbb{R}} d(t') E_\beta(t') \exp(i\omega(t' - t)) = \\ &= \int_{\mathbb{R}} d(t') \left(\int_{\mathbb{R}} \frac{d(\omega)}{2\pi} \sigma_{\alpha\beta}(\omega, \mathbf{B}) \exp(i\omega(t' - t)) \right) E_\beta(t') = \\ &= \int_{\mathbb{R}} d(t') \sigma_{\alpha\beta}(t' - t) E_\beta(t'). \end{aligned}$$

Например,

$$j_z \propto \int_{\mathbb{R}} \frac{d(\omega)}{2\pi} \frac{1}{1 - i\omega\tau} \exp(-i\omega t) = \theta(t) \frac{1}{\tau} \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right)$$

17.3.6 Diffusion and Lorentz Model [see Arovas]

(пишу по Аровасу 5.6.1)

суть модели Лоренца

??!!!

что там мы...

почти дошел.

случаи применения модели Лоренца (!)

казалось бы, модель Друде уже есть и многое уже есть, чт еще нужно?

время релаксации и тау приближение это одно и то же (???)

мб это одно и то же?

связь времени релаксации и тау приближения

главная идея, как решать на больших временах

Мы видели, что времени релаксации недостаточно, а как тогда иначе?
(тут место вкратце главной идеи. пока что я тупой и не понял это.)

недостаточность приближения времени релаксации для описания диффузии

Приближение времени релаксации не способно сохранять любой интеграл столкновений (?).

Например, в случае гидродинамических процессов, таких как диффузия, оно неприменимо.

Это происходит потому что если записать решение уравнения Больцмана в терминах отклонения от равновесного распределения $\delta\tilde{n}(\mathbf{v}, t) = \tilde{n}(\mathbf{v}, t) - \tilde{n}_0(\mathbf{v})$, то из решения

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

видно, что $\tilde{n}(\mathbf{v}, t)$ экспоненциально спадает до нуля с постоянной времени τ , поэтому общее число частиц экспоненциально уменьшается до N_0 .

Чтобы увидеть это, опишем систему функцией распределения $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$, зависящей от координат, скорости и времени, а не координат, импульса и времени, как раньше. (? зачем?)

При отсутствии внешних сил уравнение Больцмана в приближении времени релаксации имеет вид

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} = -\frac{f - f^0}{\tau}$$

Плотность частиц в пространстве скоростей задается

$$\tilde{n}(\mathbf{v}, t) = \int d^3r f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$$

В равновесии это распределение Максвелла, умноженное на общее число частиц:

$$\tilde{n}_0(\mathbf{v}) = NP_M(\mathbf{v}).$$

Число частиц можно получить, проинтегрировав еще по скоростям, $N(t) = \int d^3v \tilde{n}(\mathbf{v}, t)$, и как функция времени оно должно быть постоянным.

Проинтегрировав уравнение Больцмана, можно перейти к функции распределения $\tilde{n}(\mathbf{v}, t)$: (???? почему там второй член л.ч. зануляется??)

$$\frac{\partial \tilde{n}}{\partial t} = -\frac{\tilde{n} - \tilde{n}_0}{\tau}$$

Введем отклонение от равновесного распределения $\delta\tilde{n}(\mathbf{v}, t) = \tilde{n}(\mathbf{v}, t) - \tilde{n}_0(\mathbf{v})$, и, используя его, напишем решение:

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

Таким образом, $\tilde{n}(\mathbf{v}, t)$ экспоненциально спадает до нуля с постоянной времени τ , поэтому общее число частиц экспоненциально уменьшается до N_0 .

Что физически не происходит, потому что при диффузии частицы пролетают вперед и их число меняется.

Модель Лоренца - Модифицирование уравнение Больцмана и его решения

Чтобы исправить эти нефизические расходимости, рассмотрим модифицированное уравнение Больцмана:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} = \frac{1}{\tau} \left[-f + \int \frac{d\hat{\mathbf{v}}}{4\pi} f \right].$$

Запишем его в форме

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} = \frac{1}{\tau} (\mathbb{P} - 1)f,$$

(????) где $\mathbb{P}$ проекционный оператор на пространство изотропных функций $\mathbf{v}$, то есть он действует на любую функцию $F(\mathbf{v})$ как (???? потом мб пойму, пока не понятно)

$$\mathbb{P}F = \int \frac{d\hat{\mathbf{v}}}{4\pi} F(\mathbf{v})$$

Заметим, что $\mathbb{P}F$ это функция скорости $v = |\mathbf{v}|$.

это модель Лоренца.

В этой модели можно найти (???) $\partial_t \tilde{n} = 0$.

решение модели Лоренца с помощью преобразования Лапласа

Как и для многих дифференциальных уравнений, решаем его с помощью преобразования Фурье

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

то есть проинтегрируем это уравнение, получаем: (???)

$$(s + i\mathbf{v} \cdot \mathbf{k} + \tau^{-1}) \hat{f}(\mathbf{k}, \mathbf{v}, s) = \tau^{-1} \mathbb{P} \hat{f}(\mathbf{k}, \mathbf{v}, s) + f(\mathbf{k}, \mathbf{v}, t=0)$$

(?????)

Величина $\hat{f}(\mathbf{k}, \mathbf{v}, s)$ уже выражается:

$$\hat{f}(\mathbf{k}, \mathbf{v}, s) = \frac{\tau^{-1}}{s + i\mathbf{v} \cdot \mathbf{k} + \tau^{-1}} \mathbb{P} \hat{f}(\mathbf{k}, \mathbf{v}, s) + \frac{f(\mathbf{k}, \mathbf{v}, t=0)}{s + i\mathbf{v} \cdot \mathbf{k} + \tau^{-1}},$$

и в ней осталось только найти $\mathbb{P} \hat{f}(\mathbf{k}, \mathbf{v}, s)$.

И подействуем $\mathbb{P}$, (???? тут оказывается, что двойное действие на себя такое же, как единичное, что супер странно, но потом подумаю)

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

теперь мы получаем (???? я тут просто не знаю, что это такое?)

$$\int \frac{d\hat{\mathbf{v}}}{4\pi} \frac{\tau^{-1}}{s + i\mathbf{v} \cdot \mathbf{k} + \tau^{-1}} = \int_{-1}^1 dx \frac{\tau^{-1}}{s + ivkx + \tau^{-1}} = \frac{1}{vk} \tan^{-1} \left(\frac{vk\tau}{1 + \tau s} \right).$$

Короче, абсолютно хз, как приходим, но пока что итог такой:

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

Теперь можем записать решение Лоренцевой модификации уравнения Больцмана как:

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

случай простейших начальных условий

Посмотрим, как общее решение модели Лоренца

Теперь можем записать решение Лоренцевой модификации уравнения Больцмана как:

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

упрощается в простом случае.

(??) Простейший случай - локализация координаты r и скорости v :

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

С такой функцией распределения интеграл имеет вид:

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

Также можно разложить в ряд (?)

$$1 - \frac{1}{vk\tau} \tan^{-1} \left(\frac{vk\tau}{1 + \tau s} \right) = s\tau + \frac{1}{3}k^2v^2\tau^2 + \dots$$

Поэтому решение запишем

$$\begin{aligned} \hat{f}(\mathbf{k}, \mathbf{v}, s) = \frac{\tau^{-1}}{s + i\mathbf{v} \cdot \mathbf{k} + \tau^{-1}} \cdot \frac{\tau^{-1}}{s + i\mathbf{v}_0 \cdot \mathbf{k} + \tau^{-1}} \cdot \frac{1}{s + \frac{1}{3}v_0^2k^2\tau + \dots} \cdot \frac{\delta(\mathbf{v} - \mathbf{v}_0)}{4\pi v_0^2} + \\ + \frac{\delta(\mathbf{v} - \mathbf{v}_0)}{s + i\mathbf{v}_0 \cdot \mathbf{k} + \tau^{-1}} \quad (17.3) \end{aligned}$$

Нам интересен предел больших времен $t \gg \tau$ for $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$.

(??) В таком случае преобладает $s \sim t^{-1}$, и примем, (???) что τ^{-1} преобладает над s и $i\mathbf{v} \cdot \mathbf{k}$.

Тогда первые множители становятся единицей, последнее слагаемое просто откидываем, а в знаменателе оставляем первые члены, в итоге функция распределения:

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

(????!!! тут нужно сесть и проинтегрировать, вроде это просто, потом сделаю)
Производя обратное преобразование Фурье, получаем:

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = (4\pi Dt)^{-3/2} e^{-r^2/4Dt} \cdot \frac{\delta(\mathbf{v} - \mathbf{v}_0)}{4\pi v_0^2}$$

где константа диффузии имеет вид:

$$D = \frac{1}{3}v_0^2\tau$$

Наша система единиц это $[D] = L^2/T$.

Для функции распределения нужно просто проинтегрировать по скоростям:

$$n(\mathbf{r}, t) = \int d^3v f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = (4\pi Dt)^{-3/2} e^{-r^2/4Dt}$$

Учтено, что $\int d^3r n(\mathbf{r}, t) = 1$ в любое время.

Полное число частиц сохраняется!

17.3.7 Magnetoresistance and Hall Effect

обзор магнитосопротивления

ответим, что это такое?
и зачем он?

17.3.8 одномерное рассеяние и отражение

(подумаю позже, как это связано с кинетикой, мб этому место только в твердых телах и в квантмехе???)

определение транспортного сечения (?)

определение времени релаксации импульса (?)

обзор формулы Брукса-Херринга

(??)
ее применимость: ...
(??)

общий алгоритм теории рассеяния

(тут вкратце суть прошлого параграфа будет)

матричный элемент из золотого правило Ферми

Вычислим время рассеяния τ из первых принципов, не ограничиваясь времени релаксации.

Посмотрим на рассеяние электронов от кристаллических примесей.

Интеграл столкновений записывается через золотое правило ферми (???!!!) Начнем с золотого правила Ферми:

$$\mathcal{I}_k\{f\} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{k'} |\langle k' | \mathcal{U} | k \rangle|^2 (f_{k'} - f_k) \delta(\varepsilon(k) - \varepsilon(k'))$$

где $\mathcal{U}(r)$ это сумма по всем примесным потенциалам, (??? мб это так и можно записать, проверю, вставлю в дополнения)

$$\mathcal{U}(r) = \sum_{j=1}^{N_{\text{imp}}} U(r - R_j)$$

$$|\langle k' | \mathcal{U} | k \rangle|^2 = V^{-2} \left| \hat{U}(k - k') \right|^2 \cdot \left| \sum_{j=1}^{N_{\text{imp}}} e^{i(k-k') \cdot R_j} \right|^2$$

где V это полный объем твердого тела и $\hat{U}(\mathbf{q}) = \int d^3r U(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}}$ это преобразование Фурье примесного потенциала.

Обратите внимание, что мы предполагаем один вид примесей; Но метод может быть обобщен для учета различных видов примесей, просто так мы не будем рассматривать (?).

Предположим, что позиции примесей случайны и некоррелированы, и мы усредняем их.

Используя выражение, (как его доказать???)

$$\left| \sum_{j=1}^{N_{\text{imp}}} e^{iq \cdot \mathbf{R}_j} \right|^2 = N_{\text{imp}} + N_{\text{imp}} (N_{\text{imp}} - 1) \delta_{\mathbf{q},0}$$

мы получим (???)

$$\overline{|k' \mathcal{U} k|^2} = \frac{N_{\text{imp}}}{V^2} \left| \hat{U}(k - k') \right|^2 + \frac{N_{\text{imp}} (N_{\text{imp}} - 1)}{V^2} |\hat{U}(0)|^2 \delta_{kk'}$$

Пренебрежем вторым членом в этом уравнении, потому что позже мы увидим, что он все равно сократился бы. (???)

интеграл столкновений

Подставим $f = f^0 + \delta f$, в итоге мы имеем:

$$\mathcal{I}_k\{f\} = \frac{2\pi n_{\text{imp}}}{\hbar} \int_{\hat{\Omega}} \frac{d^3 k'}{(2\pi)^3} \left| \hat{U}(k - k') \right|^2 \delta \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} - \frac{\hbar^2 k'^2}{2m^*} \right) (\delta f_{k'} - \delta f_k)$$

где $n_{\text{imp}} = N_{\text{imp}}/V$ плотность числа примесей.

(??? кст, а там дельта функцию никак изменить нельзя?)

Далее создадим анзатц (что?) то есть наверное изменение функции распределения можно записать таким образом: (??????)

$$\delta f_k = \tau(\varepsilon(k)) e\mathcal{E} \cdot v(k) \frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon} \Big|_{\varepsilon(k)}$$

и будем решать для $\tau(\varepsilon(k))$.

уравнение Больцмана

Уравнение Больцмана через интеграл столкновений имеет вид (????) (правая часть - подставили выше, а вот в левой почему только такое осталось - подумаю потом)

$$\begin{aligned} -e\mathcal{E} \cdot v(k) \frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon} &= \frac{2\pi}{\hbar} n_{\text{imp}} e\mathcal{E} \cdot \int_{\hat{\Omega}} \frac{d^3 k'}{(2\pi)^3} \left| \hat{U}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \right|^2 \delta \left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m^*} - \frac{\hbar^2 \mathbf{k}'^2}{2m^*} \right) \times \\ &\times \left(\tau(\varepsilon(\mathbf{k}')) \mathbf{v}(\mathbf{k}') \frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon} \Big|_{\varepsilon(\mathbf{k}')} - \tau(\varepsilon(\mathbf{k})) \mathbf{v}(\mathbf{k}) \frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon} \Big|_{\varepsilon(\mathbf{k})} \right) \quad (17.4) \end{aligned}$$

За счет изотропии задачи, мы должны иметь $\tau(\varepsilon(k))$ функцией только величины k .

Заменим дельта функцию от сложной функцией известной формулой, сократим лишнее, (что-то там с интегрированием странное происходит, посмотрю потом) (еще там почему-то тау вынеслось...???)

$$\frac{\hbar k}{m^*} = \frac{n_{\text{imp}}}{4\pi^2 \hbar} \tau(\varepsilon(\mathbf{k})) \int_0^\infty dk' k'^2 \int d\hat{\mathbf{k}}' \left| \hat{U}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \right|^2 \frac{\delta(k - k')}{\hbar^2 k/m^*} \frac{\hbar}{m^*} (\mathbf{k} - \mathbf{k}')$$

(???? переход к времени, импульсу ферми я просто не знаю, хз, как это???) откуда

$$\frac{1}{\tau(\varepsilon_F)} = \frac{m^* k_F n_{\text{imp}}}{4\pi^2 \hbar^3} \int d\hat{\mathbf{k}}' \left| U(k_F \hat{\mathbf{k}} - k_F \hat{\mathbf{k}}') \right|^2 (1 - \hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{k}}')$$

Если потенциал примеси $U(r)$ сам по себе изотропный, то его преобразование Фурье $\hat{U}(q)$ есть функция от $q^2 = 4k_F^2 \sin^2 \frac{1}{2}\vartheta$ где $\cos \vartheta = \hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{k}}'$ и $q = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$ это волновой вектор переброса.

Вспомним Борновское приближение для дифференциального сечения рассеяния:

$$\sigma(\vartheta) = \left(\frac{m^*}{2\pi\hbar^2} \right)^2 \left| \hat{U}(k - k') \right|^2$$

(????) так что теперь можем записать

$$\frac{1}{\tau(\varepsilon_F)} = 2\pi n_{\text{imp}} v_F \int_0^\pi d\vartheta \sigma_F(\vartheta) (1 - \cos \vartheta) \sin \vartheta$$

где $v_F = \hbar k_F / m^*$ это скорость Ферми.

Длина свободного пробега определяется как $\ell = v_F \tau$.

Заметим, что фактор $(1 - \cos \vartheta)$ говорит нам о том, что прямое рассеяние ($\vartheta = 0$) не вносит вклада в вероятность рассеяния (???), что оправдывает наше пренебрежение вторым членом в уравнении. (1.82). (????!!!!)

транспортное время (???) не чувствительно к прямом рассеянию

Величина τ должен быть совершенно нечувствителен к прямому рассеянию.

Потому что $\tau(\varepsilon_F)$ - это транспортное время, и прямое рассеяние не уменьшает ток. (???)

Поэтому $\sigma(\vartheta = 0)$ не вносит вклада в "скорость транспортного рассеяния" $\tau^{-1}(\varepsilon_F)$.

Часто в литературе встречается ссылка и на "время жизни одной частицы", которое дается тем же выражением, но без этого фактора:

$$\left\{ \begin{array}{c} \tau_{\text{sp}}^{-1} \\ \tau_{\text{tr}}^{-1} \end{array} \right\} = 2\pi n_{\text{imp}} v_F \int_0^\pi d\vartheta \sigma_F(\vartheta) \left\{ \begin{array}{c} 1 \\ (1 - \cos \vartheta) \end{array} \right\} \sin \vartheta$$

Заметим, что $\tau_{\text{sp}} = (n_{\text{imp}} v_F \sigma_{\text{F, tot}})^{-1}$, где $\sigma_{\text{r, tot}}$ это общее сечение рассеяния на энергии ε_F , a formula familiar from elementary kinetic theory.

To derive the single particle lifetime, one can examine the linearized time-dependent Boltzmann equation with $\mathcal{E} = 0$

$$\frac{\partial \delta f_k}{\partial t} = n_{\text{imp}} v_F \int d\hat{\mathbf{k}}' \vartheta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} (\delta f_{\mathbf{k}'} - \delta f_{\mathbf{k}}),$$

where $v = \hbar k / m^*$ is the velocity, and where the kernel is $\vartheta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \cos^{-1}(\mathbf{k} \cdot \mathbf{k}')$.

We now expand in spherical harmonics, writing

$$\sigma(\vartheta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}) \equiv \sigma_{\text{tot}} \sum_{L,M} \nu_L Y_{LM}(\hat{\mathbf{k}}) Y_{LM}^*(\hat{\mathbf{k}}')$$

where as before

$$\sigma_{\text{tot}} = 2\pi \int_0^\pi d\vartheta \sin \vartheta \sigma(\vartheta).$$

Expanding

$$\delta f_k(t) = \sum_{L,M} A_{LM}(t) Y_{LM}(\hat{\mathbf{k}})$$

the linearized Boltzmann equation simplifies to

$$\frac{\partial A_{LM}}{\partial t} + (1 - \nu_L) n_{\text{imp}} v_F \sigma_{\text{tot}} A_{LM} = 0$$

whence one obtains a hierarchy of relaxation rates,

$$\tau_L^{-1} = (1 - \nu_L) n_{\text{imp}} v_F \sigma_{\text{tot}}$$

which depend only on the total angular momentum quantum number L .

These rates describe the relaxation of nonuniform distributions, when $\delta f_k(t=0)$ is proportional to some spherical harmonic $Y_{LM}(k)$.

Note that $\tau_{L=0}^{-1} = 0$, which reflects the fact that the total particle number is a collisional invariant.

The single particle lifetime is identified as

$$\tau_{\text{sp}}^{-1} \equiv \tau_{L \rightarrow \infty}^{-1} = n_{\text{imp}} v_F \sigma_{\text{tot}}$$

corresponding to a point distortion of the uniform distribution.

17.4 Other Well-known Kinetic Phenomena with Electrons

мб потом удалю, просто пока их не проработал еще.

17.4.1 Scattering of Screened Electrons (???)

удельное сопротивление

Покажем, что и удельное сопротивление имеет вид:

$$\rho = \frac{m}{ne^2 \tau_{\text{tr}}} = Z^2 R_q a_B \frac{n_{\text{imp}}}{n} F(\zeta).$$

экранирование и транспортное время: обзор

Сечение $\sigma_F(\vartheta)$ для кулоновской примеси $U(r) = -Ze^2/r$, можно найти, приходя к $\hat{U}(q) = -4\pi Ze^2/q^2$ (?? пропишу это позже)

Следовательно (??),

$$\sigma_F(\vartheta) = \left(\frac{Ze^2}{4\epsilon_F \sin^2 \frac{1}{2}\vartheta} \right)^2$$

и имеется сильная расхожимость при $\vartheta \rightarrow 0$, как $\sigma_F(\vartheta) \propto \vartheta^{-4}$.

Транспортное время возрастает логарифмически (?)

Покажем, что пошло не так.

Дело в том, что мы не приняли во внимание экранирование.

Свободные заряды перераспределяются так, чтобы экранировать потенциал примесного атома.

На больших расстояниях эффективный (экранированный) потенциал убывает экспоненциально, а не как $1/r$.

Потенциал экранирования имеет юкавский вид, и его увеличение при малых q обрывается на масштабах обратной длины экранирования λ^{-1} .

Существует два типа экранирования: Томаса-Ферми и Дебая-Хюккеля

экранирование Томаса-Ферми

экранирование Томаса-Ферми это типичный механизм экранирования в металлах. Длина рассеяния Томаса-Ферми имеет вид:

$$\lambda_{\text{TF}} = (4\pi e^2 g(\varepsilon_F))^{-1/2}$$

Слабый локальный электростатический потенциал $\phi(r)$ вызовет изменение локальной электронной плотности согласно $\delta n(r) = e\phi(r)g(\varepsilon_F)$, где $g(\varepsilon_F)$ это плотность состояний на уровне Ферми.

Этот дисбаланс зарядов снова связан с $\phi(r)$ через уравнение Пуассона.

Результатом является самосогласованное уравнение для $\phi(r)$,

$$\begin{aligned}\nabla^2 \phi &= 4\pi e \delta n \\ &= 4\pi e^2 g(\varepsilon_F) \phi \equiv \lambda_{\text{TF}}^{-2} \phi\end{aligned}$$

Поэтому длина рассеяния Томаса-Ферми имеет вид:

$$\lambda_{\text{TF}} = (4\pi e^2 g(\varepsilon_F))^{-1/2}$$

(и что?)

экранирование Дебая-Хюккеля

Экранирование Дебая-Хюккеля типичен для ионных решений, и длина экранирования Дебая-Хюккеля равна

$$\lambda_{\text{DH}} = \sqrt{\frac{k_B T}{4\pi n e^2}}$$

This mechanism is typical of ionic solutions, although it may also be of relevance in solids with ultra-low Fermi energies.

Из классической статистической механики известно, что локальная вариация величины плотности электронов, вызванная за счет потенциала $\phi(r)$ равна

$$\delta n(r) = n e^{e\phi(r)/k_B T} - n \approx \frac{n e \phi(r)}{k_B T}$$

where we assume the potential is weak on the scale of $k_B T/e$.

Теперь уравнение Пуассона имеет вид:

$$\begin{aligned}\nabla^2 \phi &= 4\pi e \delta n \\ &= \frac{4\pi n e^2}{k_B T} \phi \equiv \lambda_{\text{DH}}^{-2} \phi\end{aligned}$$

то есть длина экранирования Дебая-Хюккеля равна

$$\lambda_{\text{DH}} = \sqrt{\frac{k_B T}{4\pi n e^2}}$$

дифференциальное сечение, транспортное время, сопротивление

(???) Теперь уравнение Пуассона имеет вид:

$$\nabla^2 \phi = \lambda^{-2} \phi - 4\pi Z e \delta(r)$$

Решением является так называемый потенциал Юкавы

$$U(r) = -e\phi(r) = -\frac{Ze^2}{r}e^{-r/\lambda} \implies \hat{U}(q) = \frac{4\pi Ze^2}{q^2 + \lambda^{-2}}$$

(??)

теперь дифференциальное сечение рассеяния имеет вид:

$$\sigma_F(\vartheta) = \left(\frac{Ze^2}{4\varepsilon_F} \cdot \frac{1}{\sin^2 \frac{1}{2}\vartheta + (2k_F\lambda)^{-2}} \right)^2$$

и расхождение при малых углах исчезло.

Транспортное время для кулоновского рассеяния теперь имеет вид:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau(\varepsilon_F)} &= 2\pi n_{\text{imp}} v_F \left(\frac{Ze^2}{4\varepsilon_F} \right)^2 \int_0^\pi d\vartheta \sin \vartheta (1 - \cos \vartheta) \left(\frac{1}{\sin^2 \frac{1}{2}\vartheta + (2k_F\lambda)^{-2}} \right)^2 \\ &= 2\pi n_{\text{imp}} v_F \left(\frac{Ze^2}{2\varepsilon_F} \right)^2 \left\{ \ln(1 + \pi\zeta) - \frac{\pi\zeta}{1 + \pi\zeta} \right\} \end{aligned}$$

где

$$\zeta = \frac{4}{\pi} k_F^2 \lambda^2 = \frac{\hbar^2 k_F}{m^* e^2} = k_p a_B^*$$

Здесь $a_B^* = \epsilon_\infty \hbar^2 / m^* e^2$ это эффективный Боровский радиус (в этом выражении мы восстановили фактор ϵ_∞).

Поэтому сопротивление имеет вид:

$$\rho = \frac{m^*}{ne^2\tau} = Z^2 \frac{\hbar}{e^2} a_B^* \frac{n_{\text{imp}}}{n} F(k_F a_B^*)$$

где определим функцию $F(\zeta) = \frac{1}{\zeta^3} \left\{ \ln(1 + \pi\zeta) - \frac{\pi\zeta}{1 + \pi\zeta} \right\}$.

При $\hbar/e^2 = 25,813\Omega$ и $a_B^* \approx a_B = 0.529 \text{ \AA}$, имеется значение:

$$\rho = 1.37 \times 10^{-4} \Omega \cdot \text{cm} \times Z^2 \frac{n_{\text{imp}}}{n} F(k_F a_B^*)$$

(тут таблица и график, потом из посмотрю)

17.4.2 Hall Effect in High Fields

ток электронов из уравнения Больцмана

In the high field limit, one may neglect the collision integral entirely, and write (at $\omega = 0$)

$$-e\mathbf{v} \cdot \mathcal{E} \frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon} - \frac{e}{\hbar c} \mathbf{v} \times \mathbf{B} \cdot \frac{\partial \delta f}{d\mathbf{k}} = 0$$

We'll consider the case of electrons, and take $\mathcal{E} = \mathcal{E}\hat{y}$ and $B = B\hat{z}$, in which case the solution is

$$\delta f = \frac{\hbar c \mathcal{E}}{B} k_x \frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon}$$

Note that k_x is not a smooth single-valued function over the Brillouin-zone due to Bloch periodicity.

This treatment, then, will make sense only if the derivative $\partial f^0 / \partial \varepsilon$ confines k to a closed orbit within the first Brillouin zone.

In this case, we have

$$\begin{aligned} j_x &= 2ec \frac{\mathcal{E}}{B} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} k_x \frac{\partial \varepsilon}{\partial k_x} \frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon} \\ &= 2ec \frac{\mathcal{E}}{B} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} k_x \frac{\partial f^0}{\partial k_x} \end{aligned}$$

Now we may integrate by parts, if we assume that f^0 vanishes on the boundary of the Brillouin zone.

We obtain

$$j_x = -\frac{2ec\mathcal{E}}{B} \int_{\hat{\Omega}} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} f^0 = -\frac{nec}{B} \mathcal{E}$$

В итоге имеем

$$\sigma_{xy} = -\sigma_{yx} = -\frac{nec}{B}$$

независимую от зонной структуры.

"Open orbits"- trajectories along Fermi surfaces which cross Brillouin zone boundaries and return in another zone - post a subtler problem, and generally lead to a finite, non-saturating magnetoresistance.

дырки

For holes, we have $\bar{f}^0 = 1 - f^0$ and

$$j_x = -\frac{2ec\mathcal{E}}{B} \int_{\hat{\Omega}} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} k_x \frac{\partial \bar{f}^0}{\partial k_x} = +\frac{nec}{B} \mathcal{E}$$

and $\sigma_{xy} = +nec/B$, where n is the hole density.

We define the Hall coefficient

$$R_H = -\rho_{xy}/B$$

and the Hall number

$$z_H \equiv -\frac{1}{n_{\text{ion}} ec R_H}$$

where n_{ion} is the ion density.

For high fields, the off-diagonal elements of both $\rho_{\alpha\beta}$ and $\sigma_{\alpha\beta}$ are negligible, and $\rho_{xy} = -\sigma_{xy}$.

Hence $R_H = \mp 1/nec$, and $z_H = \pm n/n_{\text{ion}}$.

The high field Hall coefficient is used to determine both the carrier density as well as the sign of the charge carriers; z_H is a measure of valency.

(???)

In Al, the high field Hall coefficient saturates at $z_H = -1$.

Why is z_H negative? As it turns out, aluminum has both electron and hole bands.

Its valence is 3 ; two electrons go into a filled band, leaving one valence electron to split between the electron and hole bands.

Thus $n = 3n_{\text{ion}}$.

The Hall conductivity is

$$\sigma_{xy} = (n_h - n_e) ec/B$$

разница между концентрациями дырок и электронов

The difference $n_h - n_e$ is determined by the following argument.

The electron density in the hole band is $n'_e = 2n_{\text{ion}} - n_h$, i.e. the total density of levels in the band (two states per unit cell) minus the number of empty levels in which there are holes.

Thus,

$$n_h - n_e = 2n_{\text{ion}} - (n_e + n'_e) = n_{\text{ion}}$$

where we've invoked $n_e + n'_e = n_{\text{ion}}$, since precisely one electron from each ion is shared between the two partially filled bands.

Thus, $\sigma_{xy} = n_{\text{ion}} ec/B = nec/3B$ and $z_H = -1$.

At lower fields, $z_H = +3$ is observed, which is what one would expect from the free electron model.

Interband scattering, which is suppressed at high fields, leads to this result.

17.4.3 Collision of Electrons and Consequences

Электрон-электронные столкновения и их вклад в сопротивление металла

Интеграл столкновений при рассеянии электронов в металле на фононах в приближении Блоха и зависимость электросопротивления и теплопроводности от температуры.

Тензор электропроводности металла в магнитном поле.

17.4.4 Hall Effect

быстро разберусь, но сперва с теорией в твердом теле и ЭСС, там все-таки основы (многое позже в запись про твердое тело добавлю)

17.5 Thermoelectric Effects

Обсудим, как связаны электрические и тепловые явления в твердых телах.

17.5.1 General Properties and Parameters of Thermoelectric Effects

применение теоремы Онзагера

Итак, теорема Онзагера позволила получить важный результат:

$$\begin{aligned}\vec{I}_1^\alpha &= \mathbf{J}_e = \sigma \boldsymbol{\varepsilon} - \beta \nabla T \\ \vec{I}_2^\alpha &= \mathbf{J}_Q = \chi \boldsymbol{\varepsilon} - \kappa \nabla T \\ L_{ik}^{\alpha\alpha} &= \begin{pmatrix} T\sigma & T^2\beta \\ T\chi & T^2\kappa \end{pmatrix} \\ \chi &= T\beta\end{aligned}$$

устойчивость системы

Условие устойчивости системы имеет вид:

$$\begin{aligned}\sigma &> 0 \\ \kappa &> 0 \\ \tilde{\kappa} &= \kappa - \chi\beta/\sigma > 0.\end{aligned}$$

Критерий устойчивости системы: матрица кинетических коэффициентов должна быть положительно определенной –это гарантирует возрастание энтропии. Это первая часть теоремы Онзагера.

Критерий Сильвестра определяет, является ли симметричная квадратная матрица положительно определённой.

17.5.2 Kinetic Equations for Thermoelectric Effects

уравнения Больцмана и получение сдвига функции распределения

Чтобы считать все кинетические параметры, необходимо найти поправку к функции распределения. Получим ее вид

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

а также обсудим многое, что происходит.

Кинетическое уравнение для электронов имеет вид уравнения Больцмана

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \dot{\mathbf{p}} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} \equiv \frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} - e\mathbf{E} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = I_{\text{coll}}(f)$$

где учтено уравнение движения для нерелятивистских электронов $\dot{\mathbf{p}} = -e\mathbf{E}$ в постоянном электрическом поле.

Его стационарное, независящее от времени решение будем искать в виде $f(t, \mathbf{r}, \mathbf{p}) = f_0(\mathbf{r}, \mathbf{p}) + \delta f(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ по теории возмущений, связанной с учетом столкновений с примесями или фононами (т.е. по сути, в гидродинамическом режиме).

Тогда получим линеаризованное кинетическое уравнение

$$\mathbf{v} \cdot \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{r}} - e\mathbf{E} \cdot \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{p}} = I_{\text{col}}(f_0 + \delta f) \approx -\frac{\delta f}{\tau},$$

где интеграл столкновений записан в так называемом приближении времени релаксации, или в τ -приближении [$\tau \equiv \tau_{tr}(v) \equiv \tau_{tr}(\varepsilon)$], а функцию нулевого приближения (равновесную) будем считать в общем случае фермиевской,

$$f_0(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = 1 / (e^{(\varepsilon - \mu)/T} + 1) \equiv F((\varepsilon - \mu)/T),$$

которая переходит в больцмановскую при $|\mu|/T \gg 1$ причем здесь $\mu \equiv \mu(\mathbf{r})$, а $\varepsilon \equiv \varepsilon(\mathbf{p}) = p^2/(2m)$.

При этом,

$$\frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{p}} = \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \cdot \frac{\partial \varepsilon}{\partial \mathbf{p}} = \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}$$

$$\frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{r}} \equiv \nabla f_0 = \frac{\partial f_0}{\partial T} \nabla T + \frac{\partial f_0}{\partial \mu} \nabla \mu = -\frac{(\varepsilon - \mu)}{T} \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \nabla T - \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \nabla \mu = -\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \left(\nabla \mu + \frac{(\varepsilon - \mu)}{T} \nabla T \right)$$

причём в пределе $T \ll \varepsilon_F$ для металла $-\partial f_0/\partial \varepsilon \approx \delta(\varepsilon - \varepsilon_F)$, а в больцмановском пределе ($f_0 = e^{(\mu - \varepsilon)/T}$) для полупроводника имеем

$$-\partial f_0/\partial \varepsilon = f_0/T.$$

Таким образом, левая часть кинетического уравнения оказывается равной:

$$\text{л.ч.} = -\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \left\{ \frac{(\varepsilon - \mu)}{T} (\nabla T \cdot \mathbf{v}) + (\mathbf{v} \cdot \{\nabla \mu + e\mathbf{E}\}) \right\},$$

так что условия равновесия есть $\nabla T = 0$ и $\nabla \mu + e\mathbf{E} = 0$.

Поскольку $\mathbf{E} = -\nabla \varphi$, то в равновесии $\mu - e\varphi = \mu_0 = \text{const}$ и $\mu(\mathbf{r}) = e\varphi(\mathbf{r}) + \mu_0 = -U(\mathbf{r}) + \mu_0$, в соответствии с распределением Ферми (или Больцмана) во внешнем поле.

Здесь μ_0 - нормировочный химический потенциал (значение μ при $\varphi = 0$), $U = -e\varphi$ - потенциальная энергия электронов, φ - электрический потенциал.

Функция распределения (в том числе равновесная нормирована на общее число электронов обычным образом, $\int f \frac{2d^3p dV}{(2\pi\hbar)^3} = N$, так что $\mu_0 + e\varphi = \mu$, где $\mu(n, T)$ - известный химический потенциал электронного газа, определенный в отсутствие электрического поля как функция плотности электронов и температуры условием $\int f_0 \frac{2d^3p}{(2\pi\hbar)^3} = N/V \equiv n$.

В присутствии поля равновесная плотность электронов, так же как μ и φ есть функции координат, и только $\mu_0 = \text{const}$, так что в равновесии $\nabla \mu_0 = \nabla(\mu - e\varphi) = \nabla \mu + e\mathbf{E} = 0$, так же как и $\nabla T = 0$.

При отклонении от равновесия в присутствии тока электронов и потока их энергии, что будет учитываться поправкой к равновесной функции распределения, это будет уже не так, то есть уже может быть $\nabla \mu + e\mathbf{E} \neq 0$, так же как и $\nabla T \neq 0$.

Поправка к функции распределения в τ -приближении имеет очевидный вид

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

Плотности тока $\mathbf{j}$ и потока энергии $\mathbf{q}$

Плотности тока $\mathbf{j}$ и потока энергии $\mathbf{q}$ электронов с зарядом $(-e)$ определяются следующим образом:

$$\begin{aligned} \mathbf{j} &= -e \int \mathbf{v} f \frac{2d^3p}{(2\pi\hbar)^3} = -e \int \mathbf{v} \delta f \frac{2d^3p}{(2\pi\hbar)^3}, \\ \mathbf{q} &= \int \mathbf{v} (\varepsilon + U) f \frac{2d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \equiv \int \mathbf{v} (\varepsilon - e\varphi) f \frac{2d^3p}{(2\pi\hbar)^3} = \int \mathbf{v} (\varepsilon - e\varphi) \delta f \frac{2d^3p}{(2\pi\hbar)^3}. \end{aligned}$$

Сначала вычисляем $\mathbf{j}$, а потом $\mathbf{q}$:

$$\begin{aligned} \mathbf{j} &= e \int \frac{2d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \mathbf{v} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \tau \left[\frac{(\varepsilon - \mu)}{T} (\nabla T \cdot \mathbf{v}) + (\mathbf{v} \cdot \{\nabla \mu + e\mathbf{E}\}) \right] = \\ &= \frac{e}{3} (\nabla \mu + e\mathbf{E}) \int \tau v^2 \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \frac{2d^3p}{(2\pi\hbar)^3} + \frac{e}{3} \frac{\nabla T}{T} \int \tau v^2 (\varepsilon - \mu) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \frac{2d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \quad (17.5) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mathbf{q} &= - \int \frac{2d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \mathbf{v} (\varepsilon - e\varphi + \mu - \mu) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \tau \left[\frac{(\varepsilon - \mu)}{T} (\nabla T \cdot \mathbf{v}) + (\mathbf{v} \cdot \{\nabla \mu + e\mathbf{E}\}) \right] = \\ &= -\frac{\mathbf{j}}{e} (\mu - e\varphi) - \frac{(\nabla \mu + e\mathbf{E})}{3} \int \tau v^2 (\varepsilon - \mu) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \frac{2d^3p}{(2\pi\hbar)^3} - \frac{1}{3} \frac{\nabla T}{T} \int \tau v^2 (\varepsilon - \mu)^2 \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \frac{2d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \quad (17.6) \end{aligned}$$

Перепишем последнее соотношение, вычитая тривиальный конвективный перенос химпотенциала и потенциальной энергии $\mu - e\varphi \equiv \mu + U$, в виде

$$\begin{aligned} \mathbf{q}' &= \mathbf{q} + \mathbf{j}(\mu - e\varphi)/e = \\ &= -\frac{(\nabla \mu + e\mathbf{E})}{3} \int \tau v^2 (\varepsilon - \mu) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \frac{2d^3p}{(2\pi\hbar)^3} - \frac{1}{3} \frac{\nabla T}{T} \int \tau v^2 (\varepsilon - \mu)^2 \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \frac{2d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \end{aligned}$$

и введем обозначение

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

где n - плотность электронов, так как при $g(\varepsilon) \propto \sqrt{\varepsilon}$ имеем $n = \frac{2}{3} \int_0^{+\infty} d\varepsilon \varepsilon g(\varepsilon) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) = \int_0^{+\infty} d\varepsilon g(\varepsilon) f_0(\varepsilon)$.

Тогда получим, что

$$\begin{aligned} \mathbf{E} + \frac{\nabla \mu}{e} &= \frac{m \mathbf{j}}{ne^2 \langle \tau \rangle} - \frac{\nabla T}{eT} \frac{\langle (\varepsilon - \mu) \tau \rangle}{\langle \tau \rangle} \equiv \frac{\mathbf{j}}{\sigma} + \alpha \nabla T \\ \mathbf{q}' &= -\frac{\langle (\varepsilon - \mu) \tau \rangle}{e \langle \tau \rangle} \mathbf{j} + \frac{\nabla T}{mT} \frac{n \langle (\varepsilon - \mu) \tau \rangle^2}{\langle \tau \rangle} - \frac{\nabla T}{mT} n \langle (\varepsilon - \mu)^2 \tau \rangle \equiv \alpha T \mathbf{j} - \kappa \nabla T. \end{aligned}$$

появление коэффициентов

Здесь коэффициенты проводимости σ , теплопроводности κ , и термоэлектрический коэффициент α (ответственный за эффекты Зеебека, Пельтье и Томсона) определены как

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

Заметим, что $\frac{e^2 \kappa}{T \sigma} = \frac{1}{T^2} \left[\frac{\langle (\varepsilon - \mu)^2 \tau \rangle}{\langle \tau \rangle} - \frac{\langle (\varepsilon - \mu) \tau \rangle^2}{\langle \tau \rangle^2} \right] = L$, где L - число Лоренца, зависящее от вида зависимости $\tau(\varepsilon)$, а само это соотношение между коэффициентами проводимости и теплопроводности называется законом Видемана-Франца.

После преобразования можно получить, что

$$L = \frac{1}{T^2} \left[\mu^2 - 2\mu \frac{\langle \varepsilon \tau \rangle}{\langle \tau \rangle} + \frac{\langle \varepsilon^2 \tau \rangle}{\langle \tau \rangle} - \mu^2 - \frac{\langle \varepsilon \tau \rangle^2}{\langle \tau \rangle^2} + 2\mu \frac{\langle \varepsilon \tau \rangle}{\langle \tau \rangle} \right] = \frac{1}{T^2} \left[\frac{\langle \varepsilon^2 \tau \rangle}{\langle \tau \rangle} - \frac{\langle \varepsilon \tau \rangle^2}{\langle \tau \rangle^2} \right].$$

Проверка соотношений симметрии Онсагера

Потоковые соотношения можно записать в следующем симметричном виде:

$$\begin{aligned} \mathbf{j} &= \sigma T \frac{\mathbf{E} + \nabla \mu / e}{T} + \underbrace{\alpha \sigma T^2}_{\alpha \sigma T^2} \nabla \left(\frac{1}{T} \right), \\ \mathbf{q}' &= \underbrace{\alpha \sigma T^2}_{\alpha \sigma T^2} \frac{\mathbf{E} + \nabla \mu / e}{T} + (\alpha^2 \sigma T^3 + \kappa T^2) \nabla \left(\frac{1}{T} \right). \end{aligned}$$

Здесь равенство выделенных коэффициентов и отражает выполнение соотношений симметрии Онсагера в этих переменных.

Рассмотрим это подробнее и покажем, что эти переменные и есть в данном случае сопряженные переменные.

Пусть энтропия есть функция термодинамических переменных $Y_1, Y_2, \dots, Y_n$, то есть $S = S(Y_1, Y_2, \dots, Y_n)$, и пусть $X_i = -\partial S / \partial Y_i$ - сопряженные силы.

Тогда сопряженные потоки выражаются линейным образом (в линейном приближении!) через сопряженные силы:

$$\dot{Y}_i = - \sum_j L_{ij} X_j.$$

При этом должно быть

$$dS/dt = - \sum_i X_i \dot{Y}_i = \sum_{i,j} L_{ij} X_i X_j > 0.$$

Соотношения Онсагера утверждают, что для таких переменных

$$L_{ij} = L_{ji}.$$

В нашем случае

$$dE = TdS + (\mu + U)dN = TdS + (\mu - e\varphi)dN.$$

Для соответствующих плотностей

$$d\epsilon = Tds + (\mu - e\varphi)dn.$$

Тогда $ds = d\epsilon/T - (\mu - e\varphi)dn/T$, и

$$\frac{\partial s}{\partial t} = \frac{1}{T} \frac{\partial \epsilon}{\partial t} - \frac{(\mu - e\varphi)}{T} \frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{T} \frac{\partial \epsilon}{\partial t} + \frac{(\mu - e\varphi)}{eT} \frac{\partial \rho}{\partial t},$$

с $\rho = -en$.

Но $\partial \rho / \partial t + \text{div } \mathbf{j} = 0$, $\partial \epsilon / \partial t + \text{div } \mathbf{q} = 0$, где $\mathbf{q}$ - поток полной энергии. Тогда

$$\begin{aligned} \frac{\partial s}{\partial t} &= -\frac{1}{T} \text{div } \mathbf{q} - \frac{(\mu - e\varphi)}{eT} \text{div } \mathbf{j} = -\text{div } \frac{\mathbf{q}}{T} + \mathbf{q} \nabla \frac{1}{T} - \text{div } \frac{(\mu - e\varphi) \mathbf{j}}{eT} + \frac{\mathbf{j}}{e} \nabla \frac{(\mu - e\varphi)}{T} \\ \frac{\partial s}{\partial t} + \text{div } \left[\frac{\mathbf{q} + \mathbf{j}(\mu - e\varphi)/e}{T} \right] &= \frac{\mathbf{j}}{T} (\mathbf{E} + \nabla \mu/e) + \{ \mathbf{q} + \mathbf{j}(\mu - e\varphi)/e \} \nabla \frac{1}{T} \\ \frac{\partial s}{\partial t} + \text{div } \frac{\mathbf{q}'}{T} &= \mathbf{j} \frac{(\mathbf{E} + \nabla \mu/e)}{T} + \mathbf{q}' \nabla \frac{1}{T} \end{aligned}$$

В результате мы имеем, что сопряженные потоки $\dot{Y}_1 = \mathbf{j}$, $\dot{Y}_2 = \mathbf{q}'$, сопряженные силы

$$X_1 = -(\mathbf{E} + \nabla \mu/e)/T,$$

$$X_2 = -\nabla(1/T),$$

$$\mathbf{j} = L_{11}(\mathbf{E} + \nabla \mu/e)/T + L_{12} \nabla(1/T),$$

$$\mathbf{q}' = L_{21}(\mathbf{E} + \nabla \mu/e)/T + L_{22} \nabla(1/T),$$

$$L_{11} = \sigma T, L_{22} = xT^2 + \sigma \alpha^2 T^3,$$

$$L_{12} = L_{21} = \alpha \sigma T^2$$

Вычисление кинетических коэффициентов в вырожденном электронном газе

Для электронов в металлах и полупроводниках

$$\frac{\partial f_0(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} = \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \frac{1}{e^{(\varepsilon-\mu)/T} + 1} = \frac{-e^{(\varepsilon-\mu)/T}}{T(e^{(\varepsilon-\mu)/T} + 1)^2} = -\frac{1}{4T \operatorname{ch}^2((\varepsilon - \mu)/(2T))}$$

и

$$g(\varepsilon) = \frac{\sqrt{2}m^{3/2}\sqrt{\varepsilon}}{\pi^2\hbar^3}.$$

В металлах при вычислении проводимости при $T \ll \varepsilon_F$ полагаем $\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \approx -\delta(\varepsilon - \mu)$, $\mu \approx \varepsilon_F$ и плотность состояний $g(\varepsilon_F) = \frac{mp_F}{\pi^2\hbar^3}$.

поэтому

$$\begin{aligned} \langle \tau(\varepsilon) \rangle &= \frac{2}{3n} \int_0^{+\infty} d\varepsilon \varepsilon g(\varepsilon) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \tau(\varepsilon) \approx \\ &\approx \frac{2}{3n} \int_0^{+\infty} d\varepsilon \varepsilon g(\varepsilon) \delta(\varepsilon - \mu) \tau(\varepsilon) \approx \frac{2\varepsilon_F g(\varepsilon_F) \tau(\varepsilon_F)}{3n} = \\ &= \frac{p_F^3}{3n\pi^2\hbar^3} \tau(\varepsilon_F) \equiv \tau(\varepsilon_F), \end{aligned}$$

и

$$\sigma = \frac{ne^2(\tau)}{m} \equiv \frac{ne^2\tau(\varepsilon_F)}{m}.$$

Теперь вычисляем термоэлектрический коэффициент α , введя функцию $\sigma(\varepsilon) = \frac{e^2 \cdot 2\varepsilon g(\varepsilon) \tau(\varepsilon)}{3m}$, так что $\sigma \equiv \sigma(\varepsilon_F)$:

$$\begin{aligned} \alpha &= -\frac{\langle (\varepsilon - \mu) \tau \rangle}{eT \langle \tau \rangle} = -\frac{ne}{m\sigma T} \langle (\varepsilon - \mu) \tau \rangle = \\ &= -\frac{2e}{3mT\sigma} \int_0^{+\infty} d\varepsilon \varepsilon g(\varepsilon) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) (\varepsilon - \mu) \tau(\varepsilon) = \\ &= -\frac{1}{eT\sigma} \int_0^{+\infty} (\varepsilon - \mu) \sigma(\varepsilon) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) d\varepsilon \approx \\ &\approx -\frac{1}{eT\sigma} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{(\varepsilon - \mu) \left(\sigma(\mu) + (\varepsilon - \mu) \frac{\partial \sigma}{\partial \varepsilon} \Big|_{\varepsilon=\mu} \right)}{4T \operatorname{ch}^2((\varepsilon - \mu)/(2T))} d\varepsilon \approx \\ &\approx -\frac{\partial \sigma / \partial \varepsilon_F}{eT\sigma} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{(\varepsilon - \mu)^2 d\varepsilon}{4T \operatorname{ch}^2[(\varepsilon - \mu)/(2T)]} = \\ &= -\frac{1}{4eT^2} \frac{\partial \ln \sigma}{\partial \varepsilon_F} \cdot \frac{\pi^2}{6} \cdot 8T^3 = -\frac{\pi^2 T}{3e} \frac{\partial \ln \sigma}{\partial \varepsilon_F} \sim \\ &\sim \frac{T}{e\varepsilon_F}. \end{aligned}$$

И, наконец, вычисляем коэффициент теплопроводности.

Выражение для него можно представить в виде

$$\begin{aligned}
 c\kappa + T\sigma\alpha^2 &= \frac{n\langle\tau\rangle}{mT} \frac{\langle(\varepsilon - \mu)^2\tau\rangle}{\langle\tau\rangle} = \\
 &= \frac{n}{mT} \frac{2}{3n} \int_0^{+\infty} d\varepsilon \varepsilon g(\varepsilon) (\varepsilon - \mu)^2 \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}\right) \tau(\varepsilon) = \\
 &= \frac{2}{3mT} \int_0^{+\infty} d\varepsilon \frac{(\varepsilon - \mu)^2 \varepsilon g(\varepsilon) \tau(\varepsilon)}{4T \operatorname{ch}^2((\varepsilon - \mu)/(2T))} = \\
 &= \frac{2\varepsilon_F g(\varepsilon_F) \tau(\varepsilon_F)}{12mT^2} \int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon \frac{(\varepsilon - \mu)^2}{\operatorname{ch}^2((\varepsilon - \mu)/(2T))} = \\
 &= \frac{2\varepsilon_F g(\varepsilon_F) \tau(\varepsilon_F)}{12mT^2} \cdot \frac{\pi^2}{6} \cdot 8T^3 = \\
 &= \frac{\sigma T \pi^2}{e^2} \frac{1}{3}
 \end{aligned}$$

Поскольку $\alpha^2 \sim (T/\varepsilon_F)^2/e^2$, то очевидно, что слагаемое $T\sigma\alpha^2$ в левой части много меньше, чем значение правой части.

Поэтому, в рамках точности вычислений этим слагаемым можно и нужно пренебречь.

И, следовательно, результат для коэффициента теплопроводности имеет простой вид:

$$\kappa \approx \frac{\sigma T \pi^2}{e^2} \frac{1}{3},$$

так что $\frac{e^2\kappa}{\sigma T} \approx \frac{\pi^2}{3}$, и число Лоренца $L = \pi^2/3$ в законе Видемана-Франца для вырожденного электронного газа.

17.5.3 Thermoelectric Effects in Semiconductors

запросто можно применить все тот же выше формализм для полупроводников.

особенности полупроводников

В другом предельном случае невырожденного электронного газа, подчиняющегося статистике Максвелла - Больцмана, выполняются условия $\zeta < 0, |\zeta|/kT \gg 1$ и функция Ферми Дирака аппроксимируется выражением

$$f_0(\varepsilon_{\vec{p}}) = \exp\left(-\frac{\varepsilon_{\vec{p}} - \zeta}{k_B T}\right)$$

Рассмотрим вычисление интегралов

$$K_l = \frac{2}{(2\pi\hbar)^3} \frac{1}{3} \int d\vec{p} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon_{\vec{p}}}\right) \tau_{\vec{p}} v^2 (\varepsilon_{\vec{p}} - \zeta)^l, \quad l = 0, 1, 2$$

в этом пределе. получаем

$$\begin{aligned}
 K_0 &= \frac{2(2m)^{1/2} e^{\zeta/k_B T} (kT)^{3/2}}{3\pi^2 \hbar^3} \int_0^\infty dx e^{-x} x^{3/2} \tau_{\vec{p}}(x) = \\
 &= \frac{4n}{3\pi^{1/2} m} \int_0^\infty dx e^{-x} x^{3/2} \tau_{\vec{p}}(x) = \frac{n}{m} \langle \tau_{\vec{p}}(x) \rangle
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
K_0 &= \frac{2(2m)^{1/2} e^{\zeta/k_B T} (k_D T)^{3/2}}{3\pi^2 \hbar^3} \int_0^\infty dx e^{-x} x^{3/2} \tau_{\vec{p}}(x) = \\
&= \frac{4n}{3\pi^{1/2} m} \int_0^\infty dx e^{-x} x^{3/2} \tau_{\vec{p}}(x) = \frac{n}{m} \langle \tau_{\vec{p}}(x) \rangle
\end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned}
\langle \tau_{\vec{p}}(x) \rangle &= \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \int_0^\infty dx e^{-x} x^{3/2} \tau_{\vec{p}}(x) \\
n &= \frac{(2mk_D T)^{3/2}}{4\pi^{3/2} \hbar^3} e^{\zeta/k_B T}
\end{aligned}$$

Суммируя результаты, имеем

$$\begin{aligned}
K_0 &= \frac{n}{m} \langle \tau_{\vec{p}}(x) \rangle, \\
K_1 &= \frac{n}{m} k_B T \langle \tau_{\vec{p}}(x) (x - \zeta/k_B T) \rangle \\
K_2 &= \frac{n}{m} (k_B T)^2 \langle \tau_{\vec{p}}(x) (x - \zeta/k_B T)^2 \rangle.
\end{aligned}$$

Найдем выражения для интересующих нас кинетических коэффициентов. Для этого подставим значения интегралов K_l в определения (4.32). В результате получаем

$$\begin{aligned}
\rho^{-1} &= \sigma = \frac{e^2 n}{m} \langle \tau_{\vec{p}}(x) \rangle \\
\alpha &= \frac{k}{e} \left(\frac{\langle \tau_{\vec{p}}(x) x \rangle}{\langle \tau_{\vec{p}}(x) \rangle} - \frac{\zeta}{k_B T} \right) \\
\tilde{\kappa} &= \frac{n}{m} k_D^2 T \left(\langle \tau_{\vec{p}}(x) x^2 \rangle - \frac{\langle \tau_{\vec{p}}(x) x \rangle^2}{\langle \tau_{\vec{p}}(x) \rangle} \right)
\end{aligned}$$

средние $\langle \tau_{\vec{p}}(x) x^k \rangle$

Рассмотрим теперь средние $\langle \tau_{\vec{p}}(x) x^k \rangle$, входящие в выражения для кинетических коэффициентов выше.

оказывается, оно имеет вид:

$$\langle \tau_{\vec{p}}(x) x^k \rangle = \tau_0 \frac{\Gamma(r + k + 5/2)}{\Gamma(5/2)}$$

докажем.

Учитывая определение (4.43) и обычно используемую аппроксимацию $\tau_{\vec{p}}(x) = \tau_0 x^r$, эти средние можно записать в виде отношения гамма-функций

$$\langle \tau_{\vec{p}}(x) x^k \rangle = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \int_0^\infty dx e^{-x} \tau_0 x^{r+k+3/2} = \tau_0 \frac{\Gamma(r + k + 5/2)}{\Gamma(5/2)}$$

где $\Gamma(p)$ означает гамма-функцию, определенную обычным образом:

$$\Gamma(p) = \int_0^\infty dx e^{-x} x^{p-1}, \quad \Gamma(5/2) = \frac{3\sqrt{\pi}}{4}.$$

коэффициенты для полупроводника: итоговый вид

получаем в итоге:

$$\rho^{-1} = \sigma = \frac{e^2 n}{m} \tau_0 \frac{\Gamma(5/2 + r)}{\Gamma(5/2)}$$

$$\alpha = \frac{k_B}{e} \left[\frac{5}{2} + r - \frac{\zeta}{k_B T} \right]$$

$$\tilde{\kappa} = \frac{n}{m} k_B^2 T \tau_0 \frac{\Gamma(5/2 + r)}{\Gamma(5/2)} (5/2 + r).$$

действительно:

$$\rho^{-1} = \sigma = \frac{e^2 n}{m} \langle \tau_{\vec{p}}(x) \rangle = \frac{e^2 n}{m} \tau_0 \frac{\Gamma(5/2 + r)}{\Gamma(5/2)}$$

$$\alpha = \frac{k_B}{e} \left(\frac{\langle \tau_{\vec{p}}(x) x \rangle}{\langle \tau_{\vec{p}}(x) \rangle} - \frac{\zeta}{k_B T} \right) = \frac{k}{e} \left[\frac{\Gamma(5/2 + r + 1)}{\Gamma(5/2 + r)} - \frac{\zeta}{k_B T} \right] = \frac{k_B}{e} \left[\frac{5}{2} + r - \frac{\zeta}{k_B T} \right]$$

$$\tilde{\kappa} = \frac{n}{m} k_B^2 T \left(\langle \tau_{\vec{p}}(x) x^2 \rangle - \frac{\langle \tau_{\vec{p}}(x) x \rangle^2}{\langle \tau_{\vec{p}}(x) \rangle} \right) = \frac{n}{m} k_B^2 T \tau_0 \left[\frac{\Gamma(5/2 + r + 2)}{\Gamma(5/2)} - \frac{\Gamma(5/2 + r + 1)^2}{\Gamma(5/2 + r) \Gamma(5/2)} \right] =$$

$$= \frac{n}{m} k_B^2 T \tau_0 \frac{\Gamma(5/2 + r)}{\Gamma(5/2)} (5/2 + r).$$

где было использовано $\Gamma(p + 1) = p\Gamma(p)$.

кстати, важная формула

$$\tau_{\vec{p}}(x) = \tau_0 x^r$$

соотношение Видемана-Франца для полупроводника

соотношение Видемана-Франца для полупроводника имеет вид:

$$\tilde{\kappa} = \sigma T L, \quad L = \frac{k_B^2}{e^2} (5/2 + r).$$

Ведь у нас

$$\rho^{-1} = \sigma = \frac{e^2 n}{m} \tau_0 \frac{\Gamma(5/2 + r)}{\Gamma(5/2)}, \quad \tilde{\kappa} = \frac{n}{m} T \tau_0 \frac{\Gamma(5/2 + r)}{\Gamma(5/2)} (5/2 + r).$$

то есть постоянные Лоренца у нас меняются. Напомним, что было так

$$L = \frac{\pi^2}{3} \frac{k_B^2}{e^2} \text{ вырожденный газ}$$

$$L = \frac{k_B^2}{e^2} (5/2 + r) \text{ больцмановский газ}$$

То есть Постоянные Лоренца не такие уж и фундаментальные, не такие уж постоянные. Если начать греть вырожденный газ, переводя его в больцмановский, то постоянная Лоренца будет меняться от температуры.

случай дырочной проводимости

по сути пара дополнений

$$\alpha = \frac{k_5}{e} \left[\frac{5}{2} + r - \frac{\zeta}{k_B T} \right]$$

Отметим также, что фигурирующий в формуле (4.51) заряд электрона e - отрицательная величина и поэтому коэффициент α является отрицательной величиной, если носители заряда электроны. В случае дырочной проводимости выражение для коэффициента дифференциальной термоэдс (4.51) остается в силе, если величину e заменить на $|e|$ и вместо химического потенциала электронов ζ ввести химический потенциал дырки:

$$\zeta_p = -E_q - \zeta$$

Таким образом, если носителями заряда являются дырки, то коэффициент термоэдс имеет положительный знак, что может быть использовано на эксперименте для определения типа носителей заряда в кристалле.

17.5.4 Seebeck effect $\mathcal{E} = Q \nabla T$

суть и главные формулы

$$\mathbf{J}_e = 0 \quad \nabla T \neq 0$$

$$\begin{aligned} \mathcal{E} &= \alpha \nabla T \\ \mathbf{J}_Q &= -\tilde{\kappa} \nabla T \end{aligned}$$

обзор применений

вывод

дополнения

17.5.5 Peltier effect $j_q = \Pi j$

давно уже с ним знаком, доучу наконец уже!

суть и главные формулы

$$\begin{aligned} \mathcal{E} &= \rho \mathbf{J}_e \\ \mathbf{J}_Q &= \Pi \mathbf{J}_e \end{aligned}$$

ведь при ∇T из

$$\begin{aligned} \mathcal{E} &= \rho \mathbf{J}_e + \alpha \nabla T \\ \mathbf{J}_Q &= \Pi \mathbf{J}_e - \tilde{\kappa} \nabla T \\ \rho &= \sigma^{-1}, \quad \alpha = \sigma^{-1} \beta \\ \Pi &= \chi \rho = T \alpha \\ \tilde{\kappa} &= \kappa - \chi \alpha \end{aligned}$$

это получается

$$\frac{\partial Q(r, t)}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{J}_Q = \mathbf{J}_e \cdot \mathcal{E}$$

обзор применений

вывод

дополнения

17.5.6 Thomson effect $j_q = -\kappa \nabla T$

суть и главные формулы

$$\frac{dQ}{dt} = \text{div}(\hat{\kappa} \vec{\nabla} T) + \vec{J} \hat{\rho} \vec{J} + \vec{J} \left(\alpha - \frac{d\hat{\Pi}}{dT} \right) \vec{\nabla} T$$

обзор применений

вывод

дополнения

17.6 Phonons by Fominov

17.6.1 Phonon Spectrum

I. ПРИБЛИЖЕНИЯ

В первой части курса речь пойдёт о фононах (т.е. о колебаниях атомов) в кристаллах. Понятие фонона введено И.Е. Таммом в 1932 г.

В нашем рассмотрении будут использоваться следующие важные приближения:

1. Адиабатика: $m_{\text{электрона}} \ll M_{\text{ядра}}$ (хорошо выполняется). После усреднения по быстрым (электронным) степеням свободы остаётся энергия взаимодействия атомов, зависящая от координат атомов: $U = U(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$. Энергия связи имеет «атомный» масштаб, т.е. $E_{\text{св}} \sim 1$ эВ.
2. Гармоническое приближение (выполняется хуже, позже мы будем обсуждать отклонения от этого приближения, которые тем не менее будут считаться слабыми). $u \ll a$ - малые отклонения атомов от положений равновесия $\mathbf{r}_j$. Здесь $\mathbf{u} = \mathbf{r} - \mathbf{r}_j$, a - межатомное расстояние.

$u = u_{\mathbf{R},j,\alpha}$, где $\mathbf{R}$ - номер ячейки, j - номер атома в ячейке, $\alpha = x, y, z$ - компонента вектора отклонения. Для краткости будем иногда обозначать набор индексов одной буквой: $\lambda = (\mathbf{R}, j, \alpha) = (\mathbf{R}, \gamma)$, где $\gamma = (j, \alpha)$.

Гармоническое приближение (в целом неплохо работает вплоть до точки плавления):

$$U = \frac{1}{2} \sum_{\lambda, \lambda'} D_{\lambda\lambda'} u_{\lambda} u_{\lambda'}, \quad D \sim \frac{E_{\text{св}}}{a^2}.$$

Коэффициенты $D_{\lambda\lambda'}$ - силовые постоянные. Симметрия: $D_{\lambda\lambda'} = D_{\lambda'\lambda}$.

Динамическая матрица и дисперсионное уравнение.

$\omega(\mathbf{k})$ - спектр. Всего в кристалле есть $3p$ ветвей фононного спектра, где p - число атомов в элементарной ячейке.

Кинетическая энергия движения атомов:

$$K = \frac{1}{2} \sum_{\lambda} m_j \dot{u}_{\lambda}^2$$

Уравнение движения:

$$m_j \ddot{u}_{\lambda} = - \sum_{\lambda'} D_{\lambda\lambda'} u_{\lambda'}$$

Для $u_{\lambda}(t) = e^{-i\omega t} u_{\lambda}$ получаем

$$m_j \omega^2 u_{\lambda} = \sum_{\lambda'} D_{\lambda\lambda'} u_{\lambda'}$$

Для $u_{\mathbf{R},j,\alpha} = e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} e_{j,\alpha}$ получаем

$$m_j \omega^2 e_{\gamma} = \sum_{\mathbf{R}',\gamma'} D_{\mathbf{R},\gamma,\mathbf{R}',\gamma'} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}'-\mathbf{R})} e_{\gamma'}$$

Учтём трансляционную инвариантность:

$$D_{\mathbf{R},\gamma,\mathbf{R}',\gamma'} = D_{\gamma\gamma'}(\mathbf{R} - \mathbf{R}')$$

Тогда определяя динамическую матрицу (фурье-образ матрицы силовых постоянных)

$$\hat{D}_{\gamma\gamma'}(\mathbf{k}) = \sum_{\rho} e^{-i\mathbf{k}\rho} D_{\gamma\gamma'}(\rho)$$

можем записать (2.4) в виде

$$m_j \omega^2 e_{\gamma} = \sum_{\gamma'} \hat{D}_{\gamma\gamma'}(\mathbf{k}) e_{\gamma'}$$

Сделаем замену $x_{\gamma} = \sqrt{m_j} e_{\gamma}$, тогда уравнение движения принимает вид

$$\omega^2 x_{\gamma} = \sum_{\gamma'} \frac{\hat{D}_{\gamma\gamma'}(\mathbf{k})}{\sqrt{m_j m_{j'}}} x_{\gamma'}.$$

Матрица в правой части имеет размер $3p \times 3p$, и ω^2 - её собственные числа.

Итак, мы получили дисперсионное уравнение:

$$\left| \omega^2 \delta_{\gamma\gamma'} - \frac{\hat{D}_{\gamma\gamma'}(\mathbf{k})}{\sqrt{m_j m_{j'}}} \right| = 0.$$

При заданном $\mathbf{k}$ это алгебраическое уравнение степени $3p$ относительно ω^2 . Разные решения - разные ветви спектра. В. Длинноволновый предел ($k \rightarrow 0$). Акустические и оптические моды.

U инвариантно относительно однородного сдвига $u_{\mathbf{R},j,\alpha} \mapsto u_{\mathbf{R},j,\alpha} + v_{\alpha}$. Соответствующая мода имеет нулевую энергию.

Теорема Голдстоуна утверждает, что если при некотором однородном преобразовании энергия не меняется, то этому преобразованию соответствует мягкая мода ($\omega \rightarrow 0$ при $\mathbf{k} \rightarrow 0$).

На языке матрицы силовых постоянных трансляционная инвариантность означает, что

$$\sum_{\mathbf{R}',j'} D_{\mathbf{R},j,\alpha,\mathbf{R}',j',\alpha'} = \sum_{\rho,j'} D_{(j,\alpha)(j',\alpha')}(\rho) = 0$$

Вспоминая определение динамической матрицы (2.6), получаем

$$\sum_{j'} \hat{D}_{(j,\alpha)(j',\alpha')}(0) = 0$$

Вспоминая уравнения движения

$$m_j \omega^2 e_{j\alpha} = \sum_{j'\alpha'} \hat{D}_{(j\alpha)(j'\alpha')}(\mathbf{k}) e_{j'\alpha'}$$

и полагая в них $\mathbf{k} = 0$ и $e_{j\alpha} = v_\alpha$, видим, что $\omega = 0$ является собственным значением. Таким образом, мы убедились, что теорема Голдстоуна выполняется.

Можно получить более общий результат, не предполагая, что сдвиг обязательно однородный (т.е., что $\mathbf{e}_j$ не зависит от j): положив в 2.12 $\mathbf{k} = 0$ и просуммировав по j , получаем

$$\omega^2(0) \sum_j m_j \mathbf{e}_j = 0.$$

Поэтому в целом при $\mathbf{k} \rightarrow 0$ есть две возможности: либо $\omega(0) = 0$, либо $\sum_j m_j \mathbf{e}_j = 0$.

Первый случай - акустические (или звуковые) колебания (все атомы одной элементарной ячейки колеблются в фазе), второй - оптические (атомы одной элементарной ячейки колеблются так, что центр тяжести ячейки остаётся в покое). Ну оптических мод $\omega(0) \neq 0$, т.к. в этом случае даже при $k = 0$ имеется конечное смещение атомов внутри элементарной ячейки, требующее конечной энергии.

При распространении волны вдоль некоторых выделенных симметрией направлений упругая волна является либо чисто продольной, либо чисто поперечной (например, в

¹ См. Левитов, Шитов, Задача 1. (Классическая цепочка осцилляторов).

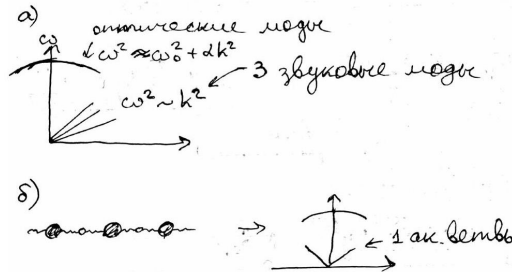


Рис. 1. а) Акустические и оптической моды в общем трёхмерном случае. Для разных оптических мод частоты ω_0 вообще говоря различны. б) Одномерная цепочка с двумя атомами в элементарной ячейке, соединёнными пружинами одинаковой жёсткости. В одномерном случае полное число мод равно p , из них 1 - акустическая. При $p = 2$ получаем одну акустическую и одну оптическую моду.

кубическом кристалле такими являются направления $[100]$, $[110]$, $[111]$ и другие, получающиеся вращениями, соответствующими кубической симметрии) ² В этом случае из трёх акустических ветвей одна является продольной, а две - поперечными. Если в поперечной плоскости имеется симметрия двух ортогональных направлений (как в случае кубического кристалла), то скорости звука для двух поперечных мод равны.

Соотношение ортогональности: собственные векторы $x_{j\alpha}^{(s)} = \sqrt{m_j} e_{j\alpha}^{(s)}$, отвечающие разным номерам мод s , должны быть ортогональны, поэтому

$$\sum_{j,\alpha} m_j e_{j\alpha}^{(s)*} e_{j\alpha}^{(s')} = 0 \quad \text{при } s \neq s'$$

Мы можем нормировать собственные векторы $e_{j\alpha}^{(s)}$ как угодно, физические амплитуды колебаний $e_{j\alpha}$ будут выражаться через них с помощью размерных амплитуд w_s :

$$e_{j\alpha} = \sum_s w_s e_{j\alpha}^{(s)}$$

2 Продольность или поперечность обычно обозначаются буквами L и T, принадлежность акустической или оптической ветви - буквами A и O соответственно. Поэтому четыре типа фононов обозначаются как LA, LO, TA, TO. Выберем следующую нормировку: 3

$$\sum_{j,\alpha} m_j e_{j\alpha}^{(s)*} e_{j\alpha}^{(s')} = M \delta_{ss'}$$

где M - полная масса элементарной ячейки. При этом $e_{j\alpha}^{(s)}$ - безразмерные векторы.

Для акустических мод при $\mathbf{k} = 0$ уравнение движения 2.12 становится тривиальным тождеством, поэтому в качестве собственных векторов смещений можно взять любые три линейно независимых вектора. Для акустической моды с номером β естественно взять вектор $e_{j\alpha}^{(\beta)} = \delta_{\alpha\beta}$ (физически это означает, что в качестве трёх независимых однородных мод мы можем взять смещения вдоль трёх пространственных осей, поэтому $\mathbf{e}_j^{(1)}$ не зависит от j и направлен вдоль x и т.д.). Она ортогональна любой оптической моде, поэтому

$$\sum_{j,\alpha} m_j e_{j\alpha}^{(\beta)*} e_{j\alpha}^{\text{onT}} = 0 = \sum_j m_j e_{j\beta}^{\text{onT}}$$

Таким образом, мы ещё раз приходим к тому, что центр масс в оптической моде не смещается.

С. Сингулярности Ван Хова в плотности состояний.

Пусть мы вычисляем величину типа энергии (или теплоёмкость и т.д.). При этом возникают интегралы вида (d - размерность пространства)

$$\int f(\omega(\mathbf{k})) \frac{d^d \mathbf{k}}{(2\pi)^d} = \int f(\omega) \nu(\omega) d\omega, \quad \nu(\omega) = \int \delta(\omega - \omega(\mathbf{k})) \frac{d^d \mathbf{k}}{(2\pi)^d}.$$

Здесь $\nu(\omega)$ - плотность состояний.

Например,

$$E = \int \frac{\hbar \omega(\mathbf{k})}{\exp \frac{\hbar \omega(\mathbf{k})}{T} - 1} \frac{d^d \mathbf{k}}{(2\pi)^d}$$

Плотность состояний может быть записана в виде интеграла по изоэнергетической

³ В дополнение к 2.16 можно получить ещё одно полезное соотношение:

$$\sum_s e_{j\alpha}^{(s)*} e_{j'\beta}^{(s)} = \frac{M}{m_j} \delta_{jj'} \delta_{\alpha\beta}$$

[для этого нужно умножить 2.16 на $e_{j'\beta}^{(s)}$ и просуммировать по s]. И это соотношение, и 2.16 на самом деле просто следствия того, что $\sqrt{m_j} \mathbf{e}_j^{(s)}$ - собственные векторы эрмитовой матрицы. поверхности ⁴

$$\nu(\omega) = \int_{\omega(\mathbf{k})=\omega} \frac{1}{|d\omega(\mathbf{k})/d\mathbf{k}|} \frac{d^{d-1} \mathbf{k}}{(2\pi)^d}$$

В знаменателе возникает групповая скорость:

$$\mathbf{v}(\mathbf{k}) = \frac{d\omega}{d\mathbf{k}}$$

В так называемых критических точках, в которых $\mathbf{v}(\mathbf{k}) = 0$, плотность состояний имеет особенности. Эти особенности называются сингулярностями Ван Хова (Van Hove singularities), они дают большой вклад в вычисляемую величину. Это общее явление для всех типов квазичастиц, не только для фононов.

Например, в 1D цепочке с двумя атомами в элементарной ячейке оптическая мода имеет закон дисперсии, меняющийся между $\omega_{\min}$ и $\omega_{\max}$. Вблизи экстремума

$$\omega(k) \approx \omega_0 + \frac{A}{2} (k - k_0)^2, \quad v(k) \approx A (k - k_0)$$

Тогда

$$\nu(\omega) \propto \frac{1}{v} \Big|_{k=k_0 \pm \sqrt{\frac{2|\omega-\omega_0|}{|A|}}} \propto \frac{1}{\sqrt{|\omega - \omega_0|}}$$

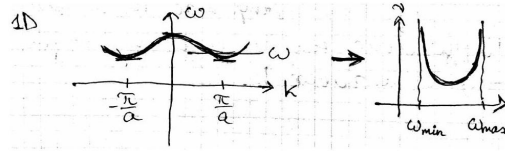


Рис. 2. Сингулярности Ван Хова в плотности состояний одномерной цепочки с двумя атомами в элементарной ячейке (вклад оптической моды).

⁴ Напоминание [для случая функции одной переменной $g(x)$, обращающейся в ноль в точке x_0]:

$$\delta(g(x)) = \frac{1}{|g'(x_0)|} \delta(x - x_0)$$

17.6.2 Dielectric Permittivity

А. Частотная зависимость диэлектрической проницаемости.

Рассмотрим ионный кристалл - это диэлектрический кристалл, составленный из ионов (суммарный заряд ионов одной элементарной ячейки равен нулю).⁵

Свет взаимодействует с оптическими фононами, т.к. оптические фононы приводят к возникновению дипольного момента внутри элементарной ячейки, и этот дипольный момент взаимодействует с электромагнитным полем света. Оптические фононы дают вклад в диэлектрическую проницаемость $\varepsilon(\omega)$. Это величина, которая для монохроматического поля определяет связь напряжённости электрического поля и электрической индукции:

$$\mathbf{D}(\omega) = \varepsilon(\omega) \mathbf{E}(\omega)$$

$\varepsilon(\infty)$ определяется электронами - под бесконечными здесь подразумеваются частоты, много больше характерных фононных, но много меньше характерных электронных (т.е. для электронов это статический отклик) $\sqcup^6$

Можно записать $\varepsilon(\omega) = \varepsilon(\infty) + 4\pi\kappa(\omega)$, где $\kappa(\omega)$ - диэлектрическая восприимчивость фононов.

Будем рассматривать длинноволновое (т.е. почти однородное) электрическое поле ($k \ll a^{-1}$). Уравнение движения при наличии поля:

$$m_j \ddot{e}_{j\alpha} = - \sum_{j'\alpha'} \hat{\mathcal{D}}_{j\alpha, j'\alpha'}(0) e_{j'\alpha'} + q_j E_\alpha.$$

Ищем решение для смещения в виде $e_{j\alpha} \propto e^{-i\omega t}$, где ω - частота поля. Решение можно разложить по фононным модам как

$$e_{j\alpha} = \sum_s w_s e_{j\alpha}^{(s)}$$

где $e_{j\alpha}^{(s)}$ - собственные векторы динамической матрицы:

$$\sum_{j'\alpha'} \hat{\mathcal{D}}_{j\alpha, j'\alpha'}(0) e_{j'\alpha'}^{(s)} = m_j \omega_s^2 e_{j\alpha}^{(s)}.$$

⁵ Кроме ионных, бывают ещё кристаллы с ковалентной связью, которые классифицируют на полярные и неполярные (в зависимости от наличия дипольного момента).

⁶ Если же пойти на еще бОльшие частоты, пройти электронные частоты и уйти вверх, то в конце концов на настоящей бесконечности будет $\varepsilon = 1$, т.к. никакие заряды не успевают сместиться и поляризация среды не возникает. Подставляем, получаем:

$$- \sum_s m_j \omega_s^2 e_{j\alpha}^{(s)} w_s = - \sum_s m_j \omega_s^2 e_{j\alpha}^{(s)} w_s + q_j E_\alpha$$

Собственные векторы $e_{j\alpha}^{(s)}$ безразмерные, а $e_{j\alpha}$ и w_s имеют размерность длины. Применяя операцию

$$\sum_{j\alpha} e_{j\alpha}^{(s')} \times$$

и используя ортонормированность (2.16), ⁷ находим

$$w_s = \frac{\sum_{j\alpha} e_{j\alpha}^{(s)} q_j E_\alpha}{M (\omega_s^2 - \omega^2)}$$

Комбинация

$$q_\alpha^{(s)} = \sum_j e_{j\alpha}^{(s)} q_j$$

имеет смысл эффективного дипольного момента, соответствующего s -той моде. Таким образом,

$$w_s = \frac{\sum_\alpha q_\alpha^{(s)} E_\alpha}{M (\omega_s^2 - \omega^2)}.$$

Дипольный момент одной элементарной ячейки:

$$P_\alpha = \sum_j e_{j\alpha} q_j = \sum_{sj} w_s e_{j\alpha}^{(s)} q_j = \sum_s w_s q_\alpha^{(s)} = \sum_{s\beta} \frac{q_\alpha^{(s)} q_\beta^{(s)}}{M (\omega_s^2 - \omega^2)} E_\beta$$

Тут становится ясно, почему мы рассматриваем именно оптические фононы: акустические не имеют дипольного момента [поэтому суммирование в 3.10 фактически идёт только по оптическим модам]. Чтобы получить поляризацию (дипольный момент единицы объёма), нужно еще умножить на концентрацию N_c элементарных ячеек в веществе. В результате получаем тензор диэлектрической проницаемости:

$$\varepsilon_{\alpha\beta}(\omega) = \varepsilon_{\alpha\beta}(\infty) + 4\pi \sum_s \frac{N_c q_{\alpha}^{(s)} q_{\beta}^{(s)}}{M(\omega_s^2 - \omega^2)}.$$

Рассмотрим теперь случай, когда в элементарной ячейке имеется два иона, а решётка (трёхмерная) имеет кубическую симметрию (например, именно такая ситуация имеет ⁷ В условии ортонормированности есть сопряжение, тем не менее в формуле (3.6) вектор $e_{j\alpha}^{(s')}$ написан без звёздочки. Так можно делать, поскольку при $\mathbf{k} = 0$ такой вектор становится вещественным. Это так из-за того, что бегущая экспонента $e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}}$ превращается в единицу, и $e_{j\alpha} = u_{\mathbf{R}j\alpha}$, а смещения вещественны. См. также формулу 6.3 и рассуждения ниже неё. место в поваренной соли NaCl). Тогда имеется $3 \cdot (2 - 1) = 3$ оптических фононных моды (одна из них - продольная, а две - поперечные). Тензоры, описывающие систему такой симметрии [в частности, динамическая матрица и тензоры, входящие в формулу (3.11)], становятся изотропными, т.е. пропорциональны $\delta_{\alpha\beta}$. Три оптические моды при $\mathbf{k} = 0$ тогда имеют одинаковые частоты, обозначим их ω_0 [это собственные частоты динамической матрицы, см. формулу (3.4), т.е. решение задачи о динамике решётки без учёта взаимодействия со светом].

В результате формула (3.11) принимает скалярный вид

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon(\infty) + \frac{A}{\omega_0^2 - \omega^2}$$

с положительной величиной A . Величина A может быть взята из решения задачи Ф3, но если мы знаем общий вид (3.12), то смысл величин ω_0 и A нам даже не требуется знать, сейчас мы всё выясним из результатов, к которым приводит эта формула.

Пусть мы возбуждаем собственную продольную моду (теперь мы уже рассматриваем решётку не саму по себе, а при наличии электрического поля). Тогда (в правой части ноль, а не $4\pi\rho$, т.к. плотность свободных зарядов равна нулю)

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = 0 \quad \Rightarrow \quad \mathbf{k} \cdot \mathbf{D} = kD = 0 \quad \Rightarrow \quad \mathbf{D} = 0$$

поэтому $\varepsilon(\omega_{\parallel}) = 0$ (продольность означает, что $\mathbf{k} \parallel \mathbf{D}$).

Теперь пусть мы возбуждаем собственную поперечную моду. Если $\omega/c \ll k$ (как мы увидим ниже, в этом пределе фононы не взаимодействуют с электромагнитным полем; при этом мы по-прежнему рассматриваем длинноволновой предел в смысле $k \ll a^{-1}$), то

$$\nabla \times \mathbf{E} = 0 \quad \Rightarrow \quad \mathbf{k} \times \mathbf{E} = 0 \quad \Rightarrow \quad kE = 0 \quad \Rightarrow \quad \mathbf{E} = 0,$$

поэтому $\varepsilon(\omega_{\perp}) = \infty$ (поперечность означает, что $\mathbf{k} \perp \mathbf{E}$).

Полученные соотношения означают, что

$$\begin{aligned} \omega_{\perp} &= \omega_0, \\ \omega_{\parallel}^2 &= \omega_0^2 + \frac{A}{\varepsilon(\infty)}. \end{aligned}$$

С точки зрения эксперимента A напрямую неизвестно. Избавляясь от неё, можем переписать 3.12 в виде

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon(\infty) \frac{\omega^2 - \omega_{\parallel}^2}{\omega^2 - \omega_{\perp}^2},$$

откуда следует, что частоты $\omega_{\parallel}$ и $\omega_{\perp}$ связаны соотношением Лиддена-Сакса-Теллера (Lyddane-Sachs-Teller): 8

$$\frac{\omega_{\parallel}^2}{\omega_{\perp}^2} = \frac{\varepsilon(0)}{\varepsilon(\infty)}.$$

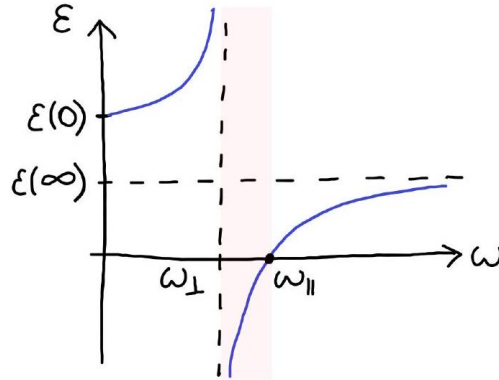


Рис. 3. $\varepsilon(\omega)$ для случая кубического ионного кристалла с двумя ионами в элементарной ячейке. Интервал частот, в котором $\varepsilon(\omega) < 0$ - это область непрозрачности кристалла. Электромагнитная волна вида e^{iKx} в этой области становится затухающей, т.к. $K = \sqrt{\varepsilon(\omega)}\omega/c = i\sqrt{|\varepsilon(\omega)|}\omega/c$

В. Поляритоны.

Если не предполагать условия $\omega/c \ll k$ (теперь учтём взаимодействие фононов с электромагнитным полем), то для поперечных колебаний нужно писать:

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad \Rightarrow \quad \mathbf{k} \times \mathbf{E} = \frac{\omega}{c} \mathbf{B}$$

Если вещество немагнитно, то можно заменить $\mathbf{B}$ на $\mathbf{H}$. Тогда, применяя операцию $\mathbf{k} \times$ и используя ещё одно уравнение Максвелла [в нём слагаемого $(4\pi/c)\mathbf{j}$ нет, т.к. нет токов свободных зарядов]

$$\mathbf{k} \times \mathbf{H} = -\frac{\omega}{c} \mathbf{D}$$

получаем соотношение

$$k^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon(\omega)$$

8 Типичные значения частот $\omega_{\parallel}$ и $\omega_{\perp}$ - порядка 10^{13}с^{-1} , что соответствует инфракрасному диапазону. Моды (квазичастицы), дисперсию которых мы только что нашли, называются «поляритонами» - это бозевские квазичастицы, соответствующие совместным колебаниям электромагнитного поля и кристаллической решётки (колебания решётки должны быть «дипольными»). Таким образом, поляритоны являются результатом взаимодействия фотонов с поперечными фононами (в более общем смысле поляритоном может называться квазичастица, получающаяся в результате взаимодействия фотона с любым возбуждением, обладающим электрическим или магнитным дипольным моментом) 9

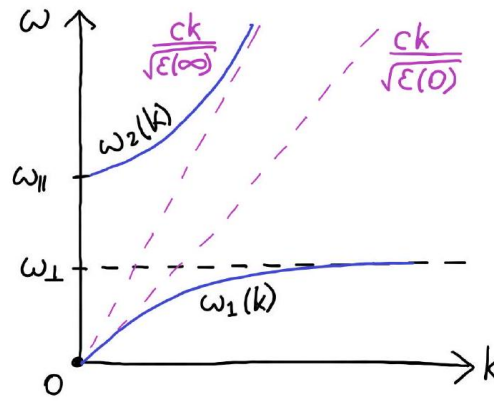


Рис. 4. Две ветви поляритонов $\omega_{1,2}(k)$ и две асимптотики $\omega = ck/\sqrt{\varepsilon(0)}$ и $\omega = ck/\sqrt{\varepsilon(\infty)}$. Поляритоны - это результат взаимодействия поперечных оптических фононов с электромагнитным полем (т.е. с фотонами). В интервале $\omega_{||} < \omega < \omega_{\perp}$ ничего нет, т.к. мы изучаем закон дисперсии для незатухающих волн, а в этом диапазоне кристалл непрозрачен и волны затухают.

Результат решения уравнения 3.12 показан на рис. 4

- Если мы полностью выключим взаимодействие фононов с электромагнитным полем (т.е. с фотонами), то этому соответствует $A = 0$ в формулах (3.12) и (3.16). Тогда $\omega_{\perp} = \omega_{||} = \omega_0$ и $\varepsilon(0) = \varepsilon(\infty)$, поэтому два характерных значения на вертикальной оси «склеиваются», две линейные асимптоты тоже склеиваются. Две ветви спектра при этом превращаются в две прямые: горизонтальная чисто фононная ветвь $\omega = \omega_0$ и линейный фотонный закон $\omega = ck/\sqrt{\varepsilon}$. Эти две ветви

⁹ Нужно не путать поляритоны с поляронами. Поляроны - это фермиевские квазичастицы, представляющие собой электрон, одетый «шубой» фононов в результате электрон-фононного взаимодействия. пересекаться. Включение взаимодействия фононов с фотоном приводит к явлению «avoided level crossing» - пересечение пропадает, ветви «переплетаются» и описывают уже не чистые фононы и чистые фотоны, а их суперпозиции (поляритоны). Именно это изображено на рисунке.

- Из рис. 4 наглядно видно, в каком смысле условие $\omega/c \ll k$, которое мы предполагали при написании формулы (3.14), означает, что фононы не взаимодействуют с электромагнитным полем. Этот предел соответствует тому, что мы ушли далеко вправо от точки пересечения, которая была бы для полностью невзаимодействующих ветвей спектра, в результате чего фононы и фотоны становятся почти чистыми.
- Наконец, отметим, что на рис. 4 показаны только ветви спектра, получающиеся из поперечных оптических фононов. Сюда можно добавить также ветвь, соответствующую продольным оптическим фононам: поскольку такие фононы не взаимодействуют с фотонами (т.к. электромагнитное поле поперечно), эта ветвь есть просто горизонтальная линия $\omega = \omega_{||}$.

17.6.3 Theory of Elasticity for Acoustic Vibrations

В этом разделе подразумевается суммирование по повторяющимся индексам.

Атомы в элементарной ячейке колеблются в фазе, волновой вектор моды предполагается малым, $k \ll a^{-1}$. В этом случае смещение очень медленно меняется в

пространстве и вещество можно считать непрерывной средой. Тогда работает теория упругости. В гармоническом приближении энергию упругой деформации можно записать через (симметричный) тензор деформации

$$u_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)$$

в случае $|u_{ij}| \ll 1$ как

$$E = \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} \lambda_{ijkl} u_{ij} u_{kl}.$$

[Полезно понимать, что случай $\partial u_i / \partial x_j = -\partial u_j / \partial x_i$, в котором тензор деформации зануляется, соответствует повороту. А след тензора деформации, u_{ii} , в общем случае равен относительному изменению объёма при деформации.] Пусть на вещество действуют силы $f_i(\mathbf{r})$. Это приводит к деформации и изменению энергии:

$$\delta E = \int d\mathbf{r} \lambda_{ijkl} \delta u_{ij} u_{kl} = \int d\mathbf{r} \lambda_{ijkl} \frac{\partial (\delta u_i)}{\partial x_j} u_{kl}$$

Вводя понятие тензора упругих напряжений

$$\sigma_{ij} = \lambda_{ijkl} u_{kl}$$

можем написать

$$\delta E = \int d\mathbf{r} \sigma_{ij} \frac{\partial (\delta u_i)}{\partial x_j} = \int d\mathbf{r} \left(-\delta u_i \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\sigma_{ij} \delta u_i) \right) = - \int d\mathbf{r} \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} \delta u_i + \int dS \sigma_{ij} \delta u_i n_j.$$

С другой стороны, изменение энергии можно записать через действие внешних сил:

$$\delta E = \int d\mathbf{r} f_i \delta u_i + \delta E_{\text{surface}}$$

Нас интересует объёмная часть. Видим, что условием равновесия является

$$f_i = - \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j}$$

При этом в равновесии внешняя сила уравнивает внутренние силы. Значит, сила, возникающая внутри среды из-за деформации, равна $\partial \sigma_{ij} / \partial x_j$.

Величины λ_{ijkl} составляют тензор модулей упругости.

- У этого тензора есть очевидные симметрии: по перестановке индексов в первой паре, по перестановке индексов во второй паре, по перестановке первой и второй пары индексов.
- Посчитаем максимальное число независимых переменных, которые могут задавать такой тензор. По каждой паре индексов он является 3-мерным симметричным тензором второго ранга, для размерности n число переменных есть $n(n+1)/2$, поэтому при $n=3$ получаем 6 независимых переменных. Далее, поскольку каждая пара индексов принимает 6 разных независимых значений, то по парам индексов тензор $\lambda_{(ij)(kl)}$ является 6-мерным тензором второго ранга. Число независимых переменных для него равно $6(6+1)/2 = 21$. - В изотропном случае можно доказать, что λ_{ijkl} задаётся всего двумя независимыми переменными, коэффициентами Ламэ λ и μ (второй коэффициент Ламэ μ - это модуль сдвига):10

$$\lambda_{ijkl} = \lambda \delta_{ij} \delta_{kl} + \mu (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk})$$

Собственные колебания (в первом уравнении используем найденное нами выражение для упругих сил внутри среды):

$$\begin{aligned} \rho \ddot{u}_i &= \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} = \\ &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\lambda_{ijkl} \frac{\partial u_k}{\partial x_l} \right) = \lambda_{ijkl} \frac{\partial^2 u_k}{\partial x_j \partial x_l}, \end{aligned}$$

откуда получаем

$$-\rho \omega^2 u_i = -\lambda_{ijkl} k_j k_l u_k$$

Записывая волновой вектор с помощью направляющих косинусов,

$$k_j = \nu_j k$$

видим, что закон дисперсии должен иметь вид

$$\omega(\mathbf{k}) = c_\phi(\boldsymbol{\nu}) k$$

а фазовая скорость c_ϕ находится из дисперсионного уравнения

$$|\rho c_\phi^2 \delta_{ik} - \lambda_{ijkl} \nu_j \nu_l| = 0$$

[обратите внимание, что групповая скорость $d\omega(\mathbf{k})/d\mathbf{k}$ из-за зависимости $c(\boldsymbol{\nu})$ может быть направлена не по $\mathbf{k}$]

Из дисперсионного уравнения, в частности, следует

$$c_\phi \propto 1/\sqrt{\rho}$$

Коэффициенты Ламэ и модуль всестороннего сжатия K .

10 Покажем, как коэффициенты Ламэ связаны с модулем всестороннего сжатия K .

Для всестороннего сжатия имеем $u_{ij} = (\varepsilon/3)\delta_{ij}$, $\sigma_{ij} = -p\delta_{ij}$, $\delta V = u_{ii} = \varepsilon$, где p - давление, и соответствующий модуль вводится следующим образом: $K = -p/\varepsilon$. При этом

$$\sigma_{ij} = \lambda_{ijkl} u_{kl} = \lambda \delta_{ij} u_{kk} + 2\mu u_{ij} = (\lambda + 2\mu/3)\varepsilon \delta_{ij},$$

поэтому $K = \lambda + 2\mu/3$. Через них же можно выразить и другие упругие коэффициенты, такие как модуль Юнга и коэффициент Пуассона (возникающие при рассмотрении растяжения стержня).

11 Для изотропного случая будет $\lambda_{ijkl} \nu_j \nu_l = \mu \delta_{ik} + (\lambda + \mu) \nu_i \nu_k$. Эта матрица для любого направления имеет невырожденное собственное значение $\lambda + 2\mu$, соответствующее продольной скорости звука $c_l = \sqrt{(\lambda + 2\mu)/\rho}$, и двукратно вырожденное собственное значение μ , соответствующее поперечной скорости звука $c_t = \sqrt{\mu/\rho}$. Таким образом, в этом случае скорости звука от направления не зависят.

17.6.4 Anharmonicity and Thermal Expansion

Помимо гармонического есть также ангармонические вклады в энергию деформации кристалла, главный из них - кубический:

$$U = \frac{1}{2} \sum_{\lambda\lambda'} D_{\lambda\lambda'} u_{\lambda} u_{\lambda'} + \frac{1}{6} \sum_{\lambda\lambda'\lambda''} A_{\lambda\lambda'\lambda''} u_{\lambda} u_{\lambda'} u_{\lambda''}$$

Можно сделать преобразование Фурье по координатам $\mathbf{R}, \mathbf{R}', \mathbf{R}''$ и записать кубический ангармонизм в виде

$$U_3 = \frac{1}{6} \sum_{\mathbf{q}\mathbf{q}'\mathbf{q}''} A(\mathbf{q}, \mathbf{q}', \mathbf{q}'') u_{\mathbf{q}} u_{\mathbf{q}'} u_{\mathbf{q}''}$$

(еще идёт суммирование по индексам j, α , но для краткости его не пишем). Вследствие трансляционной инвариантности должен выполняться закон сохранения импульса, т.е. условие

$$\mathbf{q} + \mathbf{q}' + \mathbf{q}'' = 0$$

(считаем сейчас вещество непрерывной средой).

Здесь содержатся различные процессы. Обратим внимание на случай $\mathbf{q} \rightarrow 0$ (это соответствует однородному расширению¹², т.е. нас интересует вклад

$$\frac{1}{6} \cdot 3 \sum_{\mathbf{q}'} A(0, \mathbf{q}', -\mathbf{q}') u_0 u_{\mathbf{q}'} u_{-\mathbf{q}'}$$

- здесь учтено, что ещё можно рассмотреть вклады от $\mathbf{q}' \rightarrow 0$ и $\mathbf{q}'' \rightarrow 0$, которые дают то же самое. В этом вкладе остались две «живые» переменные, $u_{\mathbf{q}'}$ и $u_{-\mathbf{q}'}$, поэтому это есть добавка к гармонической части энергии, причём она пропорциональна u_0 , т.е. относительному растяжению. Поэтому этот вклад приводит к сдвигу частоты фононов за счёт однородного расширения (вызываемого, например, нагреванием):

$$\tilde{\omega}_{s,q} = \omega_{s,q}(1 - \gamma\varepsilon), \quad u_{ij} = \frac{\varepsilon}{3} \delta_{ij}$$

Здесь по определению ε есть относительное изменение объёма при деформации, поэтому u_0 пропорционально этой величине, и естественно, что ей же пропорционально относительное изменение частоты фононов. Вопрос только в том, какой коэффициент γ стоит в формуле. Этот коэффициент называется константой Грюнайзена. Для многих

¹² Можно представить себе волну e^{iqR} , которая при $q \ll L^{-1}$ (где L - размер образца) превращается в $(1 + iqR)$ - тогда q пропорциональна относительному удлинению и мала.

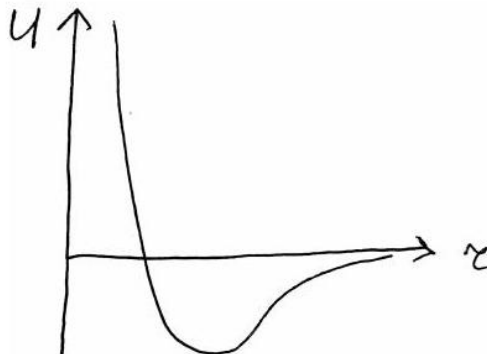


Рис. 5. Характерный вид межатомного потенциала $U(r)$.

веществ она оказывается примерно равной 2. Это обусловлено тем, что межатомные силы в различных веществах имеют похожий вид.

Свободная энергия с учётом вкладов однородного расширения и свободного фононного газа:

$$F = \frac{K\varepsilon^2}{2} + F_{\text{ph}}(\varepsilon)$$

где K - модуль всестороннего сжатия, a^{13}

$$F_{\text{ph}} = T \sum_{s, \mathbf{q}} \ln \left(1 - e^{-\frac{\hbar \tilde{\omega}_{s, \mathbf{q}}}{T}} \right)$$

Минимизируем F по ε :

$$\frac{\partial F}{\partial \varepsilon} = 0 = K\varepsilon + \frac{\partial F_{\text{ph}}}{\partial \varepsilon}$$

Найдём последнее слагаемое:

$$\frac{\partial F_{\text{ph}}}{\partial \varepsilon} = \sum_{s, \mathbf{q}} \frac{e^{-\frac{\hbar \tilde{\omega}_{s, \mathbf{q}}}{T}} \hbar \frac{\partial \tilde{\omega}_{s, \mathbf{q}}}{\partial \varepsilon}}{1 - e^{-\frac{\hbar \tilde{\omega}_{s, \mathbf{q}}}{T}}} \approx -\gamma \sum_{s, \mathbf{q}} \hbar \omega_{s, \mathbf{q}} n_{s, \mathbf{q}} = -\gamma E_{\text{ph}},$$

где E_{ph} - полная энергия фононов (без учёта сдвижки спектра). Приближённое равенство появилось оттого, что распределение Бозе-Эйнштейна

$$n_{s, \mathbf{q}} = \frac{1}{e^{\frac{\hbar \omega_{s, \mathbf{q}}}{T}} - 1}$$

мы записали для несдвинутого фононного спектра (т.е. в нём $\tilde{\omega}_{s, \mathbf{q}}$ заменили $\omega_{s, \mathbf{q}}$ - учёт этого различия здесь дал бы следующий порядок малости). В результате получаем

$$\varepsilon = \frac{\gamma}{K} E_{\text{ph}}$$

В частности это означает, что ε растёт с температурой, т.к. растёт E_{ph} .

¹³ Пояснение к формуле 5.7):

$$\begin{aligned} F_{\text{ph}} &= \sum_{s, \mathbf{q}} F_{\text{ph}}^{(s, \mathbf{q})} = \sum_{s, \mathbf{q}} -T \ln \sum_n e^{-E_n/T} = -T \sum_{s, \mathbf{q}} \ln \sum_{n=0}^{\infty} e^{-n \hbar \tilde{\omega}_{s, \mathbf{q}}/T} = \\ &= -T \sum_{s, \mathbf{q}} \ln \frac{1}{1 - e^{-\hbar \tilde{\omega}_{s, \mathbf{q}}/T}} = T \sum_{s, \mathbf{q}} \ln \left(1 - e^{-\frac{\hbar \tilde{\omega}_{s, \mathbf{q}}}{T}} \right). \end{aligned}$$

17.6.5 Quantization of Phonons

$n_{s, \mathbf{q}} \ll 1$ при $T \ll T_D$ и наоборот, $n_{s, \mathbf{q}} \gg 1$ при $T \gg T_D$, где T_D - температура Дебая. Обычно $T_D \sim 100 - 1000$ К. Поэтому получается, что в широком диапазоне не слишком высоких температур числа заполнения малы, а значит бальмановская статистика не работает, и нужно работать с квантовой статистикой. Для этого нужно произвести процедуру квантования фононов.

А. Нормальные координаты и квантование.

Имея в виду формулы

$$u_{\mathbf{R},j,\alpha} = \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}} e_{\mathbf{q},j,\alpha}, \quad e_{\mathbf{q},j,\alpha} = \sum_s w_{s,\mathbf{q}} e_{j,\alpha}^{(s,\mathbf{q})},$$

введём так называемые нормальные координаты $Q_{s,\mathbf{q}} = \sqrt{N} w_{s,\mathbf{q}}$:

$$u_{\mathbf{R},j,\alpha} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{s,\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}} e_{j,\alpha}^{(s,\mathbf{q})} Q_{s,\mathbf{q}}$$

где N - число ячеек во всём кристалле. Будем использовать соотношения

$$Q_{s,\mathbf{q}}^* = Q_{s,-\mathbf{q}}, \quad \left(e_{j,\alpha}^{(s,\mathbf{q})} \right)^* = e_{j,\alpha}^{(s,-\mathbf{q})}$$

последнее из которых было доказано в задаче Ф1. А дальше можно сказать, что $u_{\mathbf{R},j,\alpha}$ - вещественная функция, поэтому для её фурье-образа $e_{j,\alpha}^{(s,\mathbf{q})} Q_{s,\mathbf{q}}$ изменение знака импульса приводит к комплексному сопряжению. Это даёт нужное соотношение и для Q .

В нормальных координатах получаем для кинетической энергии

$$K = \frac{1}{2} \sum_{\lambda} m_j \dot{u}_{\lambda}^2 = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{R},j,\alpha} \sum_{s,\mathbf{q}} \sum_{s',\mathbf{q}'} m_j e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}+i\mathbf{q}'\mathbf{R}} e_{j,\alpha}^{(s,\mathbf{q})} e_{j,\alpha}^{(s',\mathbf{q}')} \dot{Q}_{s,\mathbf{q}} \dot{Q}_{s',\mathbf{q}'}$$

Учитывая соотношение

$$\sum_{\mathbf{R}} e^{i(\mathbf{q}+\mathbf{q}')\mathbf{R}} = N \delta_{\mathbf{q},-\mathbf{q}'}$$

условие нормировки 2.16 и соотношения (6.3), получаем (потенциальная энергия вычисляется аналогично)

$$K = \frac{M}{2} \sum_{s,\mathbf{q}} \left| \dot{Q}_{s,\mathbf{q}} \right|^2, \quad U = \frac{M}{2} \sum_{s,\mathbf{q}} \omega_{s,\mathbf{q}}^2 |Q_{s,\mathbf{q}}|^2$$

где M - масса элементарной ячейки.

Теперь можно произвести квантование по аналогии с гармоническим осциллятором, в котором

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} = \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right)$$

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x + i \frac{p}{\sqrt{2\hbar m\omega}}.$$

В нашем случае

$$\hat{Q}_{s,\mathbf{q}} = \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_{s,\mathbf{q}}}} \left(\hat{a}_{s,\mathbf{q}} + \hat{a}_{s,-\mathbf{q}}^\dagger \right), \quad \hat{P}_{s,\mathbf{q}} = -i\sqrt{\frac{\hbar M\omega_{s,\mathbf{q}}}{2}} \left(\hat{a}_{s,\mathbf{q}} - \hat{a}_{s,-\mathbf{q}}^\dagger \right),$$

что означает (т.к. $\hat{a}_{s,\mathbf{q}} \propto e^{-i\omega_{s,\mathbf{q}}t}$)

$$P_{s,\mathbf{q}} = M \dot{Q}_{s,\mathbf{q}}$$

Учитывая, что

$$|P_{s,\mathbf{q}}|^2 = P_{s,\mathbf{q}} P_{s,-\mathbf{q}}$$

можем переписать гамильтониан в виде

$$H = \sum_{s,\mathbf{q}} \left(\frac{|P_{s,\mathbf{q}}|^2}{2M} + \frac{M\omega_{s,\mathbf{q}}^2}{2} |Q_{s,\mathbf{q}}|^2 \right) = \sum_{s,\mathbf{q}} \hbar\omega_{s,\mathbf{q}} \left(\hat{a}_{s,\mathbf{q}}^\dagger \hat{a}_{s,\mathbf{q}} + \frac{1}{2} \right).$$

Введённые нами операторы рождения/уничтожения фононов - бозевские и подчиняются обычным соотношениям

$$[\hat{a}_{s,\mathbf{q}}, \hat{a}_{s,\mathbf{q}}^\dagger] = 1, \quad \langle \hat{a}_{s,\mathbf{q}}^\dagger \hat{a}_{s,\mathbf{q}} \rangle = n_{s,\mathbf{q}}$$

(а если индексы у $\hat{a}$ и $\hat{a}^\dagger$ не совпадают, то получается ноль в обеих формулах).

В. Устойчивость решётки относительно флуктуаций.

Величину флуктуаций положений атомов можно выяснить, посчитав при заданной температуре следующее среднее: 14

$$\langle u_{\mathbf{R},j,\alpha} u_{\mathbf{R},j,\beta} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{s,\mathbf{q},s',\mathbf{q}'} e_{j,\alpha}^{(s,\mathbf{q})} e_{j,\beta}^{(s',\mathbf{q}')} e^{i(\mathbf{q}+\mathbf{q}')\mathbf{R}} \langle Q_{s,\mathbf{q}} Q_{s',\mathbf{q}'} \rangle$$

14 См. Левитов, Шитов, Задача 38. (Флуктуации смещений решётки). Рассмотрим получившееся среднее от нормальных координат:

$$\langle Q_{s,\mathbf{q}} Q_{s',\mathbf{q}'} \rangle = \frac{\hbar}{2M\sqrt{\omega_{s,\mathbf{q}}\omega_{s',\mathbf{q}'}}} \left\langle \left(a_{s,\mathbf{q}} + a_{s,-\mathbf{q}}^\dagger \right) \left(a_{s',\mathbf{q}'} + a_{s',-\mathbf{q}'}^\dagger \right) \right\rangle.$$

Ненулевой результат в этом среднем получится только в случае $s' = s, \mathbf{q}' = -\mathbf{q}$:

$$\begin{aligned} \langle Q_{s,\mathbf{q}} Q_{s,-\mathbf{q}} \rangle &= \frac{\hbar}{2M\omega_{s,\mathbf{q}}} \left(\langle a_{s,\mathbf{q}} a_{s,\mathbf{q}}^\dagger \rangle + \langle a_{s,-\mathbf{q}}^\dagger a_{s,-\mathbf{q}} \rangle \right) = \\ &= \frac{\hbar}{2M\omega_{s,\mathbf{q}}} (n_{s,\mathbf{q}} + n_{s,-\mathbf{q}} + 1). \end{aligned}$$

В результате (6.15) даёт:

$$\langle u_{\mathbf{R},j,\alpha} u_{\mathbf{R},j,\beta} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{s,\mathbf{q}} e_{j,\alpha}^{(s,\mathbf{q})} e_{j,\beta}^{(s,\mathbf{q})*} \langle Q_{s,\mathbf{q}} Q_{s,-\mathbf{q}} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{s,\mathbf{q}} e_{j,\alpha}^{(s,\mathbf{q})} e_{j,\beta}^{(s,\mathbf{q})*} \frac{\hbar}{M\omega_{s,\mathbf{q}}} \left(n_{s,\mathbf{q}} + \frac{1}{2} \right).$$

В пределе бесконечного кристалла (объём $V \rightarrow \infty$) сумма по q превращается в интеграл:

$$\langle u_{\mathbf{R},j,\alpha} u_{\mathbf{R},j,\beta} \rangle = \frac{V}{N} \sum_s \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^d} e_{j,\alpha}^{(s,\mathbf{q})} e_{j,\beta}^{(s,\mathbf{q})*} \frac{\hbar}{M\omega_{s,\mathbf{q}}} \left(n_{s,\mathbf{q}} + \frac{1}{2} \right)$$

Частота оказалась в знаменателе, поэтому особенно важны мягкие моды. У акустических мод $\omega \propto q$, поэтому вклад квантовых флуктуаций (происходящих от $1/2$ в скобках под интегралом) имеет вид

$$\int d^d q \frac{1}{\omega} \propto \int \frac{d^d q}{q}$$

В размерности $d = 1$ возникает инфракрасная расходимость (т.е. расходимость при $q \rightarrow 0$), поэтому бесконечных одномерных кристаллов не существует. (Возможные ультрафиолетовые расходимости при $q \rightarrow \infty$ обрезаются на масштабе обратной постоянной решётки.)

Вклад тепловых флуктуаций имеет вид

$$\int d^d q \frac{1}{\omega} n_q \propto \int \frac{n_q d^d q}{q}$$

При ненулевой температуре и малых q для мягких мод имеем

$$n_q = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{T}} - 1} \approx \frac{T}{\hbar\omega}.$$

Поэтому акустические фононы дают следующий вклад в тепловые флуктуации:

$$\int \frac{d^d q}{q^2}$$

В размерностях $d = 1, 2$ возникает инфракрасная расходимость. С одномерными кристаллами всё совсем плохо, расходимость сильная. В двумерном случае - логарифмическая, но всё равно приведённое рассуждение говорит о том, что бесконечных двумерных кристаллов при конечной температуре не существует. В целом, роль флуктуаций растёт с понижением размерности (меньше соседей, флуктуации легче распространяться).

Здесь нужно оговориться, заметив, что приведённое рассуждение - очень упрощённое. Например, может возникнуть вопрос: почему же существует двумерный графен? Во-первых, в двумерном случае полученная нами расходимость - логарифмическая по размеру кристалла (инфракрасная логарифмическая расходимость по q для конечного кристалла обрезается обратным размером образца). Если посмотреть на параметры графена и задаться вопросом, при каком размере флуктуации разрушают кристаллический порядок, то окажется, что этот размер очень велик, и все реалистичные образцы гораздо меньше этого размера. Но, что ещё важнее, при учёте взаимодействия между фононами расходимость пропадает. Интеграл оказывается конечным, зависящим от температуры. И при нулевой температуре с графеном всё хорошо, а разрушение кристаллического порядка происходит при некоторой конечной температуре. Наконец, мы никак не учитывали, что наш кристалл может быть стабилизирован подложкой, на которой он лежит.

17.6.6 Scattering of Sound on Impurities

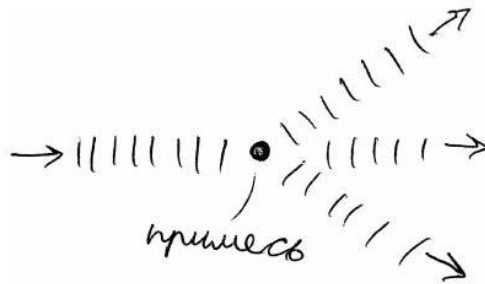


Рис. 6. Рассеяние звука на примеси. Хотим найти сечение рассеяния в зависимости от частоты, $\sigma(\omega)$

Рассмотрим точечный дефект. Например, это может быть атом примеси, замещающий основной атом решётки. От примеси есть два эффекта: 1) у неё другая масса, поэтому меняется кинетическая энергия, 2) она по-другому взаимодействует с соседними атомами, поэтому меняются силовые константы (потенциальная энергия). Для простоты будем говорить об изотопическом рассеянии, когда важен только первый эффект. Изменение

массы при этом почти всегда мало (за исключением случаев водорода и гелия), поэтому будем считать его малым параметром и делать теорию возмущений.

Выберем начало отсчёта в точке расположения примеси. Тогда возмущение имеет вид

$$\delta H = \sum_{j\alpha} \frac{\delta m}{2} \dot{u}_{0,j,\alpha}^2 = \frac{1}{N} \frac{\delta m}{2} \sum_{j,\alpha,s,\mathbf{q},s',\mathbf{q}'} e_{j,\alpha}^{(s,\mathbf{q})} e_{j,\alpha}^{(s',\mathbf{q}')} \frac{P_{s,\mathbf{q}}}{M} \frac{P_{s',\mathbf{q}'}}{M}.$$

Подставляем P через a и получаем из 7.1 вклад вида

$$\delta H_1 = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q},\mathbf{q}'} V_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} a_{\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{q}'}$$

приводящий к рассеянию в первом порядке теории возмущений. Здесь V - полный объём кристалла, а матричный элемент имеет вид

$$V_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} = \frac{V}{N} \frac{\delta m}{2} \sqrt{\frac{\hbar\omega_{s,-\mathbf{q}}}{M}} \sqrt{\frac{\hbar\omega_{s',\mathbf{q}'}}{M}} e_{j,\alpha}^{(s,-\mathbf{q})} e_{j,\alpha}^{(s',\mathbf{q}')}.$$

Вероятность перехода в единицу времени по золотому правилу Ферми:

$$w = \int \frac{d\mathbf{q}'}{(2\pi)^3} \frac{2\pi}{\hbar} |V_{\mathbf{q}\mathbf{q}'}|^2 \delta(\hbar\omega_{s'\mathbf{q}'} - \hbar\omega_{s\mathbf{q}})$$

Учитывая, что

$$\delta(\hbar\omega_{s'\mathbf{q}'} - \hbar\omega_{s\mathbf{q}}) = \frac{\delta(q' - \frac{c}{c'}q)}{\hbar c'}$$

получаем

$$\frac{dw}{d\Omega} = \frac{2\pi}{\hbar^2 c'} |V_{\mathbf{q}\mathbf{q}'}|^2 \frac{q'^2}{(2\pi)^3}, \quad q' = \frac{c}{c'} q$$

Учитывая, что матричный элемент 7.3 ведёт себя как $V_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} \propto \sqrt{\omega\omega'}$, и $\omega = \omega'$ в силу закона сохранения энергии при рассеянии, получаем следующее частотное поведение сечения рассеяния:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \propto \frac{dw}{d\Omega} \propto \omega^4$$

Рассеяние с таким законом называют рэлеевским рассеянием.

17.6.7 Kinetics of the Phonon Gas

А. Кинетическое уравнение Больцмана.

Кинетика - это наука о том, как протекают процессы не в равновесии. Основной объект, с которым работает кинетика - функция распределения (частиц или квазичастиц, которые мы изучаем). Эта функция распределения находится из кинетического уравнения. Мы будем рассматривать газ фононов. Неравновесие - это ситуация, в которой функция распределения фононов отличается от бозевской.

Будем иметь в виду задачу о приложенном градиенте температуры, в результате чего через решётку начинает течь тепло (т.е. фононы). В этом случае имеется пространственная неоднородность макроскопического масштаба. Тогда удобно использовать представление фононных волновых пакетов (волновой пакет - это суперпозиция монохроматических колебаний решётки, принадлежащих определённой

ветви, занимающая ограниченную область в пространстве). ¹⁵ Если у волнового пакета размер d , то разброс импульсов составляющих его колебаний имеет порядок $\delta k \sim 1/d$.

Предполагаем

$$L \gg d \gg \lambda$$

где L - размер образца (например, в направлении градиента температуры). Первое условие позволяет говорить о координате пакета $\mathbf{r}$. Второе условие означает $1/\delta k \gg 2\pi/k$, т.е. $k \gg \delta k$, т.е. можно говорить об определённом импульсе пакета k .

В результате, о пакетах можно говорить как о частицах с координатой и импульсом. Их дальше и будем называть фононами.

Введём функцию распределения в фазовом пространстве f (т.е. плотность вероятности в фазовом пространстве), так что число фононов в интервале импульсов и координат есть

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) \frac{d^3 k dV}{(2\pi)^3}.$$

Закон дисперсии $\omega(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ может зависеть от координаты в неоднородном случае. Уравнения движения (можно вывести, но не будем этого делать для экономии времени; фактически все сводится к тому, что ω является функцией Гамильтона):

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{r}}{dt} &= \mathbf{v} = \frac{\partial \omega(\mathbf{k}, \mathbf{r})}{\partial \mathbf{k}}, \\ \frac{d\mathbf{k}}{dt} &= -\frac{\partial \omega}{\partial \mathbf{r}}. \end{aligned}$$

Если столкновения фононов между собой или с какими-либо препятствиями отсутствуют, то $df/dt = 0$ (полная производная здесь означает дифференцирование вдоль ¹⁵ Переход к описанию с помощью волновых пакетов можно рассматривать как каноническое преобразование. траектории в фазовом пространстве, определяемой уравнениями движения). Расписывая полную производную через частные, получаем

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} \dot{\mathbf{r}} + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{k}} \dot{\mathbf{k}} = 0$$

или

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} - \frac{\partial \omega}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{k}} = 0$$

Учёт столкновений приводит к тому, что функция распределения перестаёт быть постоянной вдоль фазовых траекторий. В этом случае в правой части стоит так называемый интеграл столкновений $I_{\text{ст}}(f)$ [иногда его обозначают $(\partial f/\partial t)_{\text{ст}}$ или $(df/dt)_{\text{ст}}$ или $\text{St } f$] - в результате получается кинетическое уравнение Больцмана

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} - \frac{\partial \omega}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{k}} = I_{\text{ст}}(f).$$

Интеграл столкновений - название условное, но он обычно действительно имеет вид интеграла, и в подынтегральное выражение входит искомая функция распределения. Тогда уравнение является интегро-дифференциальным.

В интеграл столкновений могут давать вклад разные процессы, например,

$$I_{\text{ст}} = I_{\text{ph-ph}} + I_{\text{imp}} + I_{\text{b}}$$

где первый вклад - из-за фонон-фононного взаимодействия (ангармонизм), второй от рассеяния на примесях, третий - от рассеяния на стенках. Условие применимости кин.уравнения:

$$\omega\tau \gg 1$$

где τ - время свободного пробега между столкновениями (т.е. τ велико по сравнению с периодом колебаний решётки).

Даже в идеальном кристалле отдельные фононные состояния нестационарны хотя бы из-за ангармонизма. При учёте ангармонизма фононы взаимодействуют, что приводит к квантовым переходам между разными фононными состояниями. Если ангармонизм мал, то переходы редки, а между ними фононы ведут себя как свободные частицы (аналогия с почти идеальным газом). При фонон-фононных столкновениях число фононов может не сохраняться (они могут рождаться и уничтожаться).

В. τ -приближение.

При использовании кин.уравнения самый сложный вопрос - это работа с интегралом столкновений (найти его и решить уравнение при его наличии). Очень важным является так называемое τ -приближение (или приближение времени релаксации), в котором интеграл столкновений записывается в простом виде

$$I_{\text{СТ}} = -\frac{f - f_0}{\tau} = -\frac{\delta f}{\tau},$$

где f_0 - равновесная функция распределения, а отклонение $\delta f \equiv f - f_0$ считается малым. Фононы являются бозонами, поэтому равновесная функция для них есть просто бозевское распределение,

$$f_0(\varepsilon) = n(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\varepsilon/T} - 1}$$

(в дальнейшем для этой функции мы будем использовать оба обозначения).¹⁶ Надо иметь в виду, что несмотря на свою простоту и привлекательность, τ -приближение (с параметром τ , не являющимся функцией переменных) не всегда справедливо (т.е. не всегда может быть строго выведено).

С. Коэффициент теплопроводности и закон Казимира.

Чтобы немного познакомиться с кин.уравнением, рассмотрим задачу о линейном коэффициенте теплопроводности. В этом случае в системе есть слабый градиент температуры, температура является функцией координаты $T = T(\mathbf{r})$. В то же время, ω от $\mathbf{r}$ не зависит. В τ -приближении имеем

$$\mathbf{v} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} = -\frac{\delta f}{\tau}$$

Поток тепла обозначим $\mathbf{Q}$. Тогда

$$Q_i = - \sum_j \kappa_{ij} \nabla_j T = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \hbar \omega(\mathbf{k}) v_i(\mathbf{k}) \delta f = - \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \tau \hbar \omega(\mathbf{k}) v_i(\mathbf{k}) \left(\mathbf{v}(\mathbf{k}) \frac{\partial f}{\partial T} \nabla T \right).$$

¹⁶ Обратите внимание, что хим.потенциал фононов равен нулю. Это связано с тем, что число фононов не фиксировано и должно находиться из условия минимума свободной энергии, $\partial F / \partial N = 0$. А хим.потенциал равен как раз этой производной. Малость здесь уже содержится в градиенте температуры, поэтому f можно заменить на f_0 . В результате

$$\varkappa_{ij} = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \tau \hbar \omega(\mathbf{k}) v_i(\mathbf{k}) v_j(\mathbf{k}) \frac{\partial f_0}{\partial T}.$$

При низких температурах ($T \ll T_D$) это даёт

$$\varkappa \sim \int dk \cdot k^2 \tau \hbar \omega c^2 \cdot \frac{\hbar \omega}{T^2} \frac{1}{\text{sh}^2 \frac{\hbar \omega}{2T}} \sim \frac{\tau T^3}{\hbar^3 c} \int_0^{T_D/2T} \frac{x^4 dx}{\text{sh}^2 x} \propto T^3$$

- закон Казимира. Это баллистический (кнудсеновский) режим. Другие возможные режимы: диффузионный, пуазейлев, второй звук.

17.6.8 Phonon Interactions

А. Анггармонизм и взаимодействие. Слияния и распады. N- и U-процессы.

Вспоминаем, что процедура квантования фононов привела к следующему выражению для отклонений [см. 6.2 и 6.9 ; у и и е ещё есть индекс j , но мы его не будем писать для краткости]:

$$\mathbf{u} = \sqrt{\frac{\hbar}{2MN}} \sum_{\mathbf{k},s} \frac{\mathbf{e}_{\mathbf{k}s} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}}}{\sqrt{\omega(\mathbf{k})}} (a_{\mathbf{k}s} + a_{-\mathbf{k}s}^\dagger)$$

Энергия деформации имеет вид (чтобы не следить за точным соответствием коэффициентов разложения тому, что было раньше, снабдим их индексом)

$$U = U_0 + \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'} D_1 (\mathbf{R} - \mathbf{R}') (u(\mathbf{R}) - u(\mathbf{R}'))^2 + \\ + \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{R}', \mathbf{R}''} K_1 (\mathbf{R} - \mathbf{R}', \mathbf{R} - \mathbf{R}'') (u(\mathbf{R}) - u(\mathbf{R}')) (u(\mathbf{R}) - u(\mathbf{R}'')) (u(\mathbf{R}') - u(\mathbf{R}''))$$

Анггармоническое слагаемое даёт

$$\left(\frac{\hbar}{2MN} \right)^{3/2} \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{R}', \mathbf{R}''} K_2 (\mathbf{R} - \mathbf{R}', \mathbf{R} - \mathbf{R}'') \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{k}''} \frac{1}{\sqrt{\omega(\mathbf{k})\omega(\mathbf{k}')\omega(\mathbf{k}'')}} \times \\ \times (a_{\mathbf{k}} + a_{-\mathbf{k}}^\dagger) (a_{\mathbf{k}'} + a_{-\mathbf{k}'}^\dagger) (a_{\mathbf{k}''} + a_{-\mathbf{k}''}^\dagger) (e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} - e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}'}) (e^{i\mathbf{k}'\mathbf{R}} - e^{i\mathbf{k}'\mathbf{R}''}) (e^{i\mathbf{k}''\mathbf{R}'} - e^{i\mathbf{k}''\mathbf{R}''}).$$

Здесь есть разные процессы (про процессы aa и $a^\dagger a^\dagger a^\dagger$ не говорим, потому что в главном порядке в рамках золотого правила Ферми они не сработают - в них нельзя удовлетворить закону сохранения энергии; в то же время они могут давать вклад в более высокие порядки теории возмущений как виртуальные процессы):

- Слияние (также эти процессы называют рассеянием): $a_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}'} a_{-\mathbf{k}''}^\dagger$,
- Распад: $a_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}'}^\dagger a_{-\mathbf{k}''}^\dagger$

причём амплитуды этих процессов умножаются на

$$e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{k}'+\mathbf{k}'')\mathbf{R}} (1 - e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}'-\mathbf{R})}) (1 - e^{i\mathbf{k}'(\mathbf{R}''-\mathbf{R})}) (e^{i\mathbf{k}''(\mathbf{R}'-\mathbf{R})} - e^{i\mathbf{k}''(\mathbf{R}''-\mathbf{R})})$$

Из-за суммирования по $\mathbf{R}$ первый множитель даёт что-то типа дельта-функции.¹⁸ Но тут нужна некоторая осторожность.

Как мы формулируем задачу о кристалле? Обычно рассматривается решётка с дискретным расположением атомов и периодическими граничными условиями, $\mathbf{u}(L) = \mathbf{u}(0)$. Вспоминая формулу (9.1), понимаем, что тогда должно быть

$$e^{ikL} = 1$$

поэтому $\mathbf{k}$ дискретны с шагом $2\pi/L$ (именно это мы и имеем в виду, когда пишем сумму по $\mathbf{k}$). То есть, ограниченность координаты сверху привела к дискретности при малых k . Аналогично, дискретность положений атомов на малых расстояниях приводит к ограниченности k сверху (т.е. мы можем считать $\mathbf{k}$ лежащими в первой зоне Бриллюэна). В результате,

$$k_x = \frac{2\pi}{L}n, \quad n = 0, \dots, \frac{L}{a_x},$$

$$k_x \in \left(0, \frac{2\pi}{a_x}\right) \quad \text{или} \quad -\frac{\pi}{a_x} < k_x < \frac{\pi}{a_x}.$$

Базисные векторы обратной решётки:

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi [\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3]}{\mathbf{a}_1 \cdot [\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3]}.$$

¹⁸ Здесь имеется в виду, что от трёх переменных $\mathbf{R}, \mathbf{R}', \mathbf{R}''$ мы можем перейти к трём другим независимым переменным $\mathbf{R}, \mathbf{R}' - \mathbf{R}, \mathbf{R}'' - \mathbf{R}$. И тогда суммирование по $\mathbf{R}$ отделяется. Так вот, из-за суммирования по $\mathbf{R}$ в формуле (9.4) сумма $(\mathbf{k} + \mathbf{k}' + \mathbf{k}'')$ должна быть равна нулю с точностью до (любого) вектора обратной решётки:

$$\mathbf{k} + \mathbf{k}' + \mathbf{k}'' = \mathbf{b}$$

т.е.

$$\sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{K}\mathbf{R}} = N \sum_{\mathbf{b}} \delta_{\mathbf{K}, \mathbf{b}}$$

В результате ангармоническое слагаемое 9.3 можно переписать как 19

$$H_{\text{ВЗ}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k} + \mathbf{k}' + \mathbf{k}'' = \mathbf{b}} B \left(a_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}'} a_{-\mathbf{k}''}^\dagger + a_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}'}^\dagger a_{-\mathbf{k}''}^\dagger \right),$$

где

$$B(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{k}'') = \left(\frac{\hbar}{2M} \right)^{3/2} \frac{1}{\sqrt{\omega \omega' \omega''}} \sum_{\mathbf{R} = \mathbf{R}', \mathbf{R} = \mathbf{R}''} K_2(\mathbf{R} - \mathbf{R}', \mathbf{R} - \mathbf{R}'') \times$$

$$\times \left(1 - e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}' - \mathbf{R})} \right) \left(1 - e^{i\mathbf{k}'(\mathbf{R}'' - \mathbf{R})} \right) \left(e^{i\mathbf{k}''(\mathbf{R}' - \mathbf{R})} - e^{i\mathbf{k}''(\mathbf{R}'' - \mathbf{R})} \right).$$

Два слагаемых в гамильтониане 9.11) эрмитово сопряжены друг другу и описывают обратные друг другу процессы. Первое - это слияние (два в один), а второе - распад фононов (один в два). Если $\mathbf{b} = 0$, то это N-процесс (нормальный). Если $\mathbf{b} \neq 0$, то это U-процесс (Umklapp - процесс переброса).

Рис. 7. N- и U-процессы.

Энергия должна сохраняться,

$$\omega(\mathbf{k}) \pm \omega(\mathbf{k}') - \omega(\mathbf{k}'') = 0$$

(верхний знак - слияние, нижний - распад). При этом полезно иметь в виду соотношения

$$\omega(-\mathbf{k}) = \omega(\mathbf{k}), \quad \omega(\mathbf{k} + \mathbf{b}) = \omega(\mathbf{k})$$

Обсудим некоторые особенности N- и U-процессов. Мы говорим о трёхфононных процессах. В N-процессах все три фонона могут быть длинноволновыми, а могут быть коротковолновыми (т.е. с длиной волны порядка межатомного расстояния). В U-процессе в формуле 9.11 сумма по векторам обратной решётки $\mathbf{b}$ явно не написана, но подразумевается.

Имеется в виду, что $\mathbf{k} + \mathbf{k}' + \mathbf{k}''$ равно любому вектору обратной решётки. по крайней мере два фонона из трёх должны быть коротковолновыми (один - в начальном, один - в конечном состоянии). Третий может быть любым. Это можно углядеть из законов сохранения импульса и энергии:

$$\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3 = \mathbf{b}$$

$$k_1 \pm k_2 - k_3 = 0$$

где в последнем равенстве (закон сохранения энергии) соответствует слиянию и распаду соответственно. Можно считать, что $\mathbf{k}_1$ и $\mathbf{k}_3$ - коротковолновые. Если же третий фонон $\mathbf{k}_2$ длинноволновый, то $k_1 \approx k_3$. Поэтому возможен, например, процесс, в котором $\mathbf{k}_1 \approx \mathbf{k}_3 \approx \mathbf{b}/2$, т.е. начальный импульс $\mathbf{k}_1$ сменяется на почти противоположный $-\mathbf{k}_3 \approx -\mathbf{k}_1$ - отсюда и название «процессы переброса».

Теперь выясним вид интеграла столкновений, обусловленного взаимодействием фононов. Рассмотрим вклад от распадного слагаемого $a_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}'}^\dagger a_{-\mathbf{k}''}^\dagger$ в гамильтониане взаимодействия (9.11). У нас задача статфизическая, поэтому интеграл столкновений будет зависеть от чисел заполнения участвующих в процессе состояний, но этим мы займёмся чуть позже. Сначала рассмотрим задачу квантовомеханическую, в которой есть исходный фонон, а оба конечных состояния свободны. Тогда по золотому правилу Ферми можно написать вероятность перехода в единицу времени:

$$w_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f | H_B | i \rangle|^2 \delta(E_f - E_i)$$

В нашем случае эта общая формула даёт

$$w_{\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}', \mathbf{k}''} = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{|B|^2}{N} \delta(\hbar\omega_{\mathbf{k}} - \hbar\omega_{\mathbf{k}'} - \hbar\omega_{\mathbf{k}''}) \delta_{\mathbf{k} + \mathbf{k}' + \mathbf{k}'', \mathbf{b}}$$

- здесь мы ещё учли кроме закона сохранения энергии закон сохранения квазиимпульса (с точностью до любого вектора обратной решётки).

Теперь учтём, что задача у нас статфизическая, поэтому исходное и конечные состояния могут быть заполнены или свободны с вероятностью, определяемой функцией распределения. Интеграл столкновений - это скорость изменения функции распределения. Для интересующего нас состояния (с данной функцией распределения) распадное слагаемое даёт как приходный, так и уходный процессы:

$$\begin{pmatrix} f_{\mathbf{k}} + 1 \\ f_{\mathbf{k}'} - 1 \\ f_{\mathbf{k}''} - 1 \end{pmatrix} \xRightarrow{\text{приход}} \begin{pmatrix} f_{\mathbf{k}} \\ f_{\mathbf{k}'} \\ f_{\mathbf{k}''} \end{pmatrix} \xRightarrow{\text{уход}} \begin{pmatrix} f_{\mathbf{k}} - 1 \\ f_{\mathbf{k}'} + 1 \\ f_{\mathbf{k}''} + 1 \end{pmatrix}.$$

Здесь посередине написана функция распределения, скорость изменения которой нас интересует (точнее, интересует нас скорость изменения функции f_k , а по k и k' мы потом будем суммировать). Для приходящего процесса получаем следующий статистический вес:

$$\langle f | H_{ВЗ} | i \rangle \mapsto \left\langle f_k, f_{k'}, f_{k''} \left| a_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}'}^\dagger a_{-\mathbf{k}''}^\dagger \right| f_k + 1, f_{k'} - 1, f_{k''} - 1 \right\rangle = \sqrt{(f_k + 1) f_{k'} f_{k''}}$$

Для уходящего:

$$\langle f | H_{ВЗ} | i \rangle \mapsto \left\langle f_k - 1, f_{k'} + 1, f_{k''} + 1 \left| a_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}'}^\dagger a_{-\mathbf{k}''}^\dagger \right| f_k, f_{k'}, f_{k''} \right\rangle = \sqrt{f_k (f_{k'} + 1) (f_{k''} + 1)}$$

В результате

$$I_{\text{ст. / расп.}} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{k}''} w_{\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}', \mathbf{k}''} [(f_k + 1) f_{k'} f_{k''} - f_k (f_{k'} + 1) (f_{k''} + 1)].$$

Множитель $1/2$ компенсирует тот факт, что поскольку фононы неразличимы, сумма по конечным состояниям учла все физически различные пары конечных фононов $(\mathbf{k}', \mathbf{k}'')$ дважды.

Общее утверждение: равновесная функция распределения зануляет интеграл столкновений. Проверим это на данном примере - зануление происходит из-за статистического множителя:

$$\begin{aligned} (f_k + 1) f_{k'} f_{k''} - f_k (f_{k'} + 1) (f_{k''} + 1) &= e^{\hbar\omega/T} f_0 \cdot f'_0 \cdot f''_0 - f_0 \cdot e^{\hbar\omega'/T} f'_0 \cdot e^{\hbar\omega''/T} f''_0 = \\ &= f_0 f'_0 f''_0 \left(e^{\hbar\omega/T} - e^{(\hbar\omega' + \hbar\omega'')/T} \right) = 0 \end{aligned}$$

Поэтому нужно отклонение от равновесной функции распределения:

$$f_k = f_0 + \delta f, \quad f_{k'} = f'_0 + \delta f', \quad f_{k''} = f''_0 + \delta f''$$

и интеграл столкновений можно линеаризовать по малым отклонениям от равновесия:

$$(f_k + 1) f_{k'} f_{k''} - f_k (f_{k'} + 1) (f_{k''} + 1) \approx -\delta f (f'_0 + f''_0 + 1) - \delta f' (f_0 - f''_0) - \delta f'' (f_0 - f'_0)$$

Аналогично можно рассмотреть и процессы слияния (рассеяния), для которых будет

$$I_{\text{с/сл.}} = \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{k}''} w_{\mathbf{k}, \mathbf{k}' \rightarrow \mathbf{k}''} [\dots]$$

где [...] - см. задачу Ф4, а

$$w_{\mathbf{k}, \mathbf{k}' \rightarrow \mathbf{k}''} = \frac{2\pi}{\hbar^2} \frac{|B|^2}{N} \delta(\omega_k + \omega_{k'} - \omega_{k''}) \delta_{\mathbf{k} + \mathbf{k}' + \mathbf{k}'', \mathbf{b}}$$

В формуле 9.26 нет множителя $1/2$, такого как в 9.22, поскольку здесь один из пары исходных фононов $(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ задан.

Если в процессах, описываемых формулами 9.11 и (9.12), все три фонона - акустические, то нас интересуют малые $\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{k}''$ и $\mathbf{b} = 0$. В этом случае можно выяснить, как ведёт себя B . Вспоминая определение этой величины [формула (9.12)], видим, что под суммой каждая из скобок с экспонентами в длинноволновом пределе оказывается пропорциональна первой степени соответствующего волнового вектора, т.е. первой

степени соответствующей частоты. Поэтому в целом в случае N-процессов с тремя акустическими фононами имеем

$$B \propto \sqrt{\omega \omega' \omega''}$$

где коэффициент пропорциональности - функция от углов, описывающих направления импульсов.

Учитывая 9.28, пишем

$$\frac{|B|^2}{N} = A \hbar^3 \omega_k \omega_{k'} \omega_{k''}$$

Можно получить оценку

$$A \sim \frac{a_0^3}{mc^2 V}$$

где V - объём всего кристалла. Можно это делать, начиная с выражения для ангармонической энергии: при смещении атомов на величину порядка межатомного расстояния a_0 ангармоническая энергия в расчёте на один атом - порядка атомной (а та - порядка mc^2 , где m - средняя масса атома решётки 20, поэтому в формуле 9.2 получаем $K_1(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \mathbf{R}_3) \sim mc^2/a_0^3$ и т.д. Но можно это сообразить и по размерности. Из формул (9.18) и 9.29) следует, что размерность A есть обратная энергия. При этом эта буква может складываться из микроскопических параметров a_0, m, c и полного объёма V (фурье-преобразования и т.д.). Можно сначала проверить, что зависимость от V имеет

²⁰ Считаем, что в атоме решётки порядка 100 нуклонов и $c \sim 1$ км/с. Тогда

$$mc^2 \sim (10^{-27} \cdot 2 \cdot 10^3 \cdot 10^2) \cdot (10^5)^2 \text{ эрг} \sim 2 \cdot 10^{-12} \text{ эрг} \sim 1 \text{ эВ}$$

т.к. $1 \text{ эВ} \approx 1.6 \cdot 10^{-12} \text{ эрг}$. вид $A \propto 1/V$ [это следует из N в знаменателе формулы 9.29]. Тогда нужную размерность мы получим, обезразмерив объём с помощью a_0^3 и сделав энергию mc^2 . Это и даёт оценку 9.30).

В. Время свободного пробега от взаимодействия фононов.

Для того, чтобы свести интеграл столкновений к форме, соответствующей τ -приближению и таким образом определить время τ и получить для него оценку, мы рассмотрим только часть линеаризованного интеграла столкновений, содержащую отклонение только в $f_k = f_0 + \delta f$ (т.е. в этом вычислении $f_{k'}$ и $f_{k''}$ будем считать равновесными).

Для распадов тогда из 9.25 получаем

$$(f_k + 1) f_{k'} f_{k''} - f_k (f_{k'} + 1) (f_{k''} + 1) \approx -\delta f (f'_0 + f''_0 + 1)$$

В скобке комбинация $(f'_0 + f''_0)$ приводит к индуцированному распаду, а 1 - к спонтанному распаду.

Время релаксации τ определяем так:

$$I_{cT} = -\frac{\delta f_k}{\tau}$$

От чего зависит: $\tau = \tau(T, \omega)$. Важно, что при этом τ не зависит от функции распределения f_k . Это и означает τ -приближение - формула 9.32 соответствует именно такому виду.

Рассмотрим сначала N-процессы.

Учитывая

$$\sum_{\mathbf{k}'} = V \int \frac{d^3 k'}{(2\pi)^3},$$

имеем (k задано, по $\mathbf{k}'$ интегрируем; при каждом $\mathbf{k}'$ третий волновой вектор $\mathbf{k}''$ определён однозначно законом сохранения импульса, поэтому только одно интегрирование)

$$\begin{aligned} \left(\frac{1}{\tau_N} \right)_{\text{расп.}} &= \pi \hbar V \int \frac{d^3 k'}{(2\pi)^3} A \omega \omega' \omega'' (f_{k'} + f_{k''} + 1) \delta(\omega - \omega' - \omega''), \\ \left(\frac{1}{\tau_N} \right)_{\text{сл.}} &= 2\pi \hbar V \int \frac{d^3 k'}{(2\pi)^3} A \omega \omega' \omega'' (f_{k'} - f_{k''}) \delta(\omega + \omega' - \omega''). \end{aligned}$$

Учтём ещё, что

$$d^3 k' = \frac{\omega'^2 d\omega' d\Omega_{k'}}{c^3}$$

Получим оценки $1/\tau$ для нескольких случаев:

1. Спонтанный распад.

Основной вклад даёт область $\omega \sim \omega' \sim \omega''^{21}$ в результате (учитывая, что $\omega_D = ck_D = c/a_0$ и в подынтегральное выражение входит ω^5)

$$\left(\frac{1}{\tau_N} \right)_{\text{сп.расп.}} \sim \frac{\hbar a_0^3 \omega^5}{mc^5} = \frac{\hbar a_0^3 \omega_D^5}{mc^5} \left(\frac{\omega}{\omega_D} \right)^5 = \omega_D \left(\frac{\hbar \omega_D}{mc^2} \right) \left(\frac{\hbar \omega}{\hbar \omega_D} \right)^5.$$

Оценим численно параметр, который здесь возник (считаем $c \sim 1 \text{ km/s}$):

$$\gamma = \frac{\hbar \omega_D}{mc^2} = \frac{\hbar}{a_0 mc} \sim \frac{10^{-27}}{5 \cdot 10^{-8} \cdot (10^{-27} \cdot 2 \cdot 10^3 \cdot 10^2) \cdot 10^5} \sim 10^{-3}.$$

Важное качественное обстоятельство: спонтанный распад не зависит от температуры (т.к. в формулу для τ не вошли функции распределения).

2. Индуцированный распад холодного фонона.

Для индуцированных распадов помимо частоты фонона возникает второй важный энергетический масштаб - температура. Поэтому нужно рассматривать разные возможные соотношения между $\hbar\omega$ и T .

Холодный фонон означает фонон с $\hbar\omega \ll T$. Из-за закона сохранения энергии из холодного фонона могут родиться только два холодных. Основной вклад даёт область $\hbar\omega \sim \hbar\omega' \sim \hbar\omega'' \ll T$, при этом $f(\omega) \approx T/\hbar\omega$. Получается комбинация вида

$$\omega^5 (f_{\omega'} + f_{\omega''})$$

В результате

$$\left(\frac{1}{\tau_N} \right)_{\text{инд.расп.}} \sim \omega_D \left(\frac{\hbar \omega_D}{mc^2} \right) \frac{(\hbar \omega)^4 T}{(\hbar \omega_D)^5}.$$

3. Слияние для холодного фонона.

В этом случае $\hbar\omega \ll T$, при этом фонон, с которым сливаемся, может быть тепловым с $\hbar\omega' \sim T$, тогда и получающийся фонон будет тепловым. Именно этот случай даёт основной вклад: $\hbar\omega' \sim \hbar\omega'' \sim T$. При этом в разности $(f_{\omega'} - f_{\omega''})$, входящей в формулу 9.35), каждое слагаемое порядка единицы, а разность мала

21 Дело в том, что в подынтегральной функции в формуле (9.34) есть произведение частот $\omega\omega'^3\omega''$. А в силу дельта-функции должен выполняться закон сохранения $\omega = \omega' + \omega''$, поэтому по крайней мере одна из частот рождающихся фононов (ω' или ω'') должна быть порядка ω . А вторая - либо тоже $\sim \omega$, либо $\ll \omega$. Но если она много меньше, то мы сильно уменьшаем значение произведения под интегралом, поэтому этой случай даст малый вклад. по параметру $\hbar\omega/T$. Но это ещё не всё. В этом случае есть хитрость, связанная с дельта-функцией $\delta(\omega + \omega' - \omega'')$, обеспечивающей закон сохранения энергии. Дело в том, что если все три фонона принадлежат одной акустической ветви с одинаковой скоростью звука, то законы сохранения энергии и импульса дают соотношения

$$\begin{aligned}\mathbf{k} + \mathbf{k}' + \mathbf{k}'' &= 0, \\ k + k' - k'' &= 0,\end{aligned}$$

и единственный вариант (при заданном $\mathbf{k}$ исходного фонона) этим соотношениям удовлетворить - это направить $\mathbf{k}'$ и $\mathbf{k}''$ вдоль той же прямой (иначе по неравенству треугольника $k + k' > k''$). Тогда угловое интегрирование по d^3k' вырождается (даёт одну точку вместо интегрирования по поверхности, как могло бы быть). Значит, необходимо участие фононов двух разных ветвей (при этом тепловые фононы $\mathbf{k}'$ и $\mathbf{k}''$ должны относиться к одной ветви - переключить ветвь при столь малой разнице и между импульсами, и между энергиями, не получится; а вот исходный холодный фонон должен быть с другой ветви). Тогда

$$\omega'' - \omega' \equiv \omega_{-\mathbf{k}''} - \omega_{\mathbf{k}'} = \frac{\partial \omega_{\mathbf{k}'}}{\partial \mathbf{k}'} \mathbf{k} = c' k \cos \theta = \omega \frac{c'}{c} \cos \theta$$

где θ - угол между $\mathbf{k}$ и $\mathbf{k}' \approx -\mathbf{k}''$. Подставляя это в дельта-функцию, получаем

$$\delta(\omega + \omega' - \omega'') = \delta\left(\omega - \omega \frac{c'}{c} \cos \theta\right) = \frac{1}{\omega} \delta\left(1 - \frac{c'}{c} \cos \theta\right).$$

Таким образом, получилась дополнительная степень ω в знаменателе, а дельтафункция снимется угловым интегрированием в d^3k' , поэтому в целом из комбинации $d\omega' \delta(\omega + \omega' - \omega'')$ мы зарабатываем безразмерный параметр ω'/ω (а раньше получали единицу, т.к. говорили, что дельта-функция снимается интегрированием по частоте). Необходимо уточнить, что такое возможно только если $c'/c > 1$, т.е. исходный фонон должен быть с ветви с не самой большой скоростью, т.е. он является поперечным.

[Надо ли с точки зрения этого рассуждения пересмотреть предыдущие случаи? На самом деле, достаточно уточнить, что в рассмотренных выше случаях распада исходный фонон из-за неравенства треугольника $k < k' + k''$ не может быть с ветви с наименьшей скоростью звука. А при интегрировании больших или малых параметров в этом случае не возникает, т.к. нет разделения масштабов частот.] В результате получается комбинация вида

$$\omega\omega'^3\omega''(f_{\omega'} - f_{\omega''}) \frac{\omega'}{\omega} \sim \omega T^4$$

В итоге

$$\left(\frac{1}{\tau_N}\right)_{\text{сл.}} \sim \omega_D \left(\frac{\hbar\omega_D}{mc^2}\right) \frac{\hbar\omega_D T^4}{(\hbar\omega_D)^5}.$$

4. Распад (спонтанный и индуцированный) и слияние тепловых фононов.

Оценку для случая $\hbar\omega \sim T$ можно получить из вышеприведённых формул (они все стыкуются в этом случае):

$$\frac{1}{\tau_N} \sim \omega_D \left(\frac{\hbar\omega_D}{mc^2}\right) \left(\frac{T}{T_D}\right)^5.$$

5. Процессы переброса для тепловых фононов (при $T \ll T_D$).

При $T \ll T_D$ исходный импульс теплового фонона мал по сравнению с дебаевским:

$$k = \frac{\omega}{c} \sim \frac{T/\hbar}{c} \ll \frac{T_D}{\hbar c} \sim k_D$$

Распады с перебросом (как спонтанные, так и индуцированные) оказываются невозможны по следующей причине. В силу закона сохранения энергии при распаде имеем $k = k' + k''$, поэтому раз $k \ll k_D$, то и $k', k'' \ll k_D$. Закон сохранения импульса, который для процесса переброса имеет вид $\mathbf{k} + \mathbf{k}' + \mathbf{k}'' = \mathbf{b}$ с ненулевой правой частью, не может быть выполнен. Иными словами, исходный импульс недостаточен для процесса переброса.

Слияния при $T \ll T_D$ возможны, мы можем рассмотреть слияние с любым фононом, не обязательно тепловым - этот процесс может содержать малость из-за функции распределения, но он возможен. Основной вклад будет от $\omega' \sim \omega'' \sim \omega_D$ (нам нужны большие частоты, чтобы был переброс). Получается комбинация вида

$$\omega\omega'^3\omega''(f_{\omega'} - f_{\omega''}) \sim T\omega_D^4 e^{-T_D/T}$$

[Проблем с неравенством треугольника здесь нет, т.к. это процесс переброса. А разность $\omega'' - \omega' = \omega$ имеет порядок $T/\hbar$, в результате чего разность функций распределения оказывается порядка каждой из этих функций распределения.] В результате

$$\frac{1}{\tau_U} \sim \omega_D \left(\frac{\hbar\omega_D}{mc^2}\right) \frac{T}{T_D} e^{-T_D/T}$$

17.6.9 Temperature Dependence of Lattice Thermal Conductivity at $T < T_D$

Отталкиваясь от формулы 8.14 и используя понятие удельной теплоёмкости фононов с импульсом k , $c_{\text{ph}}(k) = \partial(\hbar\omega(k)f_0)/\partial T$, мы можем вместо 8.15 записать ту же самую оценку в немного другом виде:

$$\kappa \sim \int d^3k \cdot c_{\text{ph}}(k) l c, \quad l = c\tau.$$

Если же τ не зависит от k (а мы ниже будем рассматривать тепловые фононы, для которых это можно считать справедливым, т.к. их частота задана температурой), то интегрирование относится только к теплоёмкости на импульсе и даёт в результате удельную теплоёмкость с учётом всего спектра (полную в этом смысле):

$$\kappa \sim c_{\text{ph}} l c$$

Мы считаем, что есть образец с некоторым поперечным размером d , а теплопроводность мы измеряем вдоль образца. При самых низких температурах длина свободного пробега определяется рассеянием на стенках, поэтому $l \sim d$, что с учётом

$$c_{\text{ph}} \sim \left(\frac{T}{\hbar c} \right)^3 \sim k_D^3 \left(\frac{T}{T_D} \right)^3$$

даёт

$$\kappa \sim \frac{\omega_D^3}{c^2} \left(\frac{T}{T_D} \right)^3 d.$$

Это - закон Казимира T^3 , который мы уже получали [см. 8.15 - теперь мы уточнили, что за τ там возникает]. Соответствует баллистическому (кнудсеновскому на гидродинамическом языке) режиму - фононы рассеиваются на стенках, между рассеяниями летят по прямой.

При самых низких T

$$d \ll l_N \ll l_U,$$

где $l_N = c\tau_N$, $l_U = c\tau_U$.

Закон T^3 работает, пока $d < l_N$, где l_N обусловлена нормальными процессами. Граница этого режима - некоторая температура T_1 , определяемая условием

$$\frac{1}{d} = \frac{1}{\tau_N c} = \frac{\omega_D}{c} \gamma \left(\frac{T_1}{T_D} \right)^5$$

откуда

$$T_1 = T_D \left(\frac{1}{dk_D \gamma} \right)^{1/5}$$

Если взять $d \sim 1$ см, то получаем оценку

$$T_1 = T_D \left(\frac{5 \cdot 10^{-8}}{1 \cdot 10^{-3}} \right)^{1/5} \approx \frac{T_D}{10}.$$

С повышением T длины свободного пробега l_N и l_U убывают, поэтому мы можем попасть в режим

$$l_N \ll d \ll l_U.$$

В этом режиме мы оказываемся при $T > T_1$ (что означает $l_N < d$). Казалось бы, тогда в формуле 10.2 просто нужно в качестве l взять l_N . Однако, всё несколько хитрее. Дело в том, что при вычислении теплопроводности важны процессы рассеяния, меняющие импульс фононной системы в целом. Рассеяние на стенках относилось именно к таким процессам. А вот N-процессы полный импульс фононной системы не меняют:

$$\frac{d\mathbf{P}}{dt} = \sum_{\mathbf{k}} \hbar \mathbf{k} \frac{df_{\mathbf{k}}}{dt} = \sum_{\mathbf{k}} \hbar \mathbf{k} I_{\text{cr/N}} = 0$$

Поэтому режим движения фононов изменился, но изменение полного импульса попрежнему будет определяться рассеянием на стенках.

Движение между стенками раньше было баллистическим, а теперь стало диффузным с шагом l_N . Чтобы сместиться на расстояние d , нужно сделать $(d/l_N)^2$ шагов, поэтому полный путь, который надо пролететь до столкновения со стенкой, есть

$$l_{\text{eff}} \sim l_N \left(\frac{d}{l_N} \right)^2.$$

В результате

$$\kappa \sim c_{\text{ph}} \frac{d^2}{\tau_N c} \sim \frac{\omega_D^4}{c^3} \gamma \left(\frac{T}{T_D} \right)^8 d^2.$$

Это называется область Гуржи: пуазейлево течение фононов (как при ламинарном течении вязкой жидкости по трубе), фононы рассеиваются на стенках, но до них летят не по прямой.

При дальнейшем росте T включатся U-процессы, и мы можем попасть в режим

$$l_U \ll \frac{d^2}{l_N}$$

Это происходит при T_2 , таком что

$$l_{\text{eff}} = l_U, \quad d^2 = l_N l_U = c^2 \tau_N \tau_U$$

U-процессы приводят к уходу импульса из фононной системы, поэтому они вполне эффективны для установления конечного значения теплопроводности (так же, как и рассеяния на стенках). Поэтому в этом режиме в качестве длины свободного пробега в формулу 10.2 войдёт просто l_U , и мы получим

$$\kappa \sim c_{\text{ph}} l_U c \sim \frac{\omega_D^2}{\gamma c} \left(\frac{T}{T_D} \right)^2 e^{T_D/T}.$$

Такой закон был получен Пайерлсом. Эта функция убывает с ростом температуры при $T < T_D/2$ [мы сейчас и не выходим за границы этого диапазона, т.к. и теплоёмкость (10.3), и время свободного пробега 9.50 были получены при температурах, малых по сравнению с дебаевской].

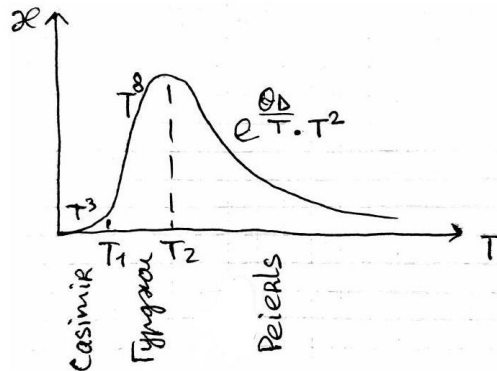


Рис. 8. Три режима $\kappa(T)$. Это один из возможных сценариев для температурной зависимости теплопроводности в трубке диаметра d (при не слишком малых d).

В образцах достаточно малых размеров d может оказаться, что с ростом температуры $l_U \sim l_N$ [из наших результатов для τ следует, что это происходит при $T/T_D \sim 0.1$] стало раньше, чем l_N стало меньше d , т.е. имеет место ситуация

$$d \ll l_N \sim l_U$$

Тогда области Гуржи не будет, а закон Казимира сменится законом Пайерлса при $d \sim l_U$

17.6.10 Scattering of Phonons on Impurities

А. Время свободного пробега и теплопроводность.

Время свободного пробега при рассеянии на примесях можно записать через сечение рассеяния:²²

$$\frac{1}{\tau_i} = N_i c \sigma$$

Ранее [см. (7.7)] мы уже получали закон Рэля для частотной зависимости сечения рассеяния при рассеянии на примесях: $\sigma \propto \omega^4$. Префактор можно восстановить по размерности: $\sigma \propto (R^6/c^4)\omega^4$, где R - размер примеси. Учтём, что $R \sim a$ и выразим скорость звука через дебаевскую частоту: $c \sim \omega_D a$. Ещё должен быть безразмерный множитель, описывающий силу примеси. Например, для изотопических примесей получается малость $(\delta m/m)^2$. В результате

$$\frac{1}{\tau_i} \sim \left(\frac{\delta m}{m}\right)^2 N_i a^3 \omega_D \left(\frac{\omega}{\omega_D}\right)^4.$$

Вспоминая вывод коэффициента теплопроводности 8.15 при низких температурах ($T \ll T_D$), мы можем приспособить его к случаю, когда рассеяние определяется примесями. При выводе закона Казимира 8.15 из формулы 8.14 предполагалось, что τ не зависит от частоты, что в жизни может быть обусловлено рассеянием на стенках. Если же речь идёт о примесях, то зависимость от частоты есть, поэтому подставим 11.2 в 8.15:

$$\kappa \sim \int dk \cdot k^2 \tau_i \hbar \omega c^2 \cdot \frac{\hbar \omega}{T^2} \frac{1}{\text{sh}^2 \frac{\hbar \omega}{2T}}.$$

Переходя к интегрированию по ω и анализируя поведение подынтегрального выражения на малых ω , находим поведение интеграла вблизи нижней границы:

$$\kappa \propto \int_0^\omega d\omega \cdot \omega^2 \frac{1}{\omega^4} \omega \cdot \frac{\omega}{\omega^2} \propto \int_0^\omega \frac{d\omega}{\omega^2},$$

²² В цилиндр длины l_i и сечения σ попадает ровно одна примесь, т.е. $l_i \sigma N_i = 1$. т.е. интеграл расходится. Но это просто означает, что рассеяния на примесях сами по себе не могут дать конечного теплового сопротивления, для этого необходимо вспомнить об остальных механизмах рассеяния. В то же время, рассеяние на примесях похоже на процессы переброса в том смысле, что в этих процессах не сохраняется импульс. Поэтому при $\tau_i < \tau_U$ роль процессов переброса переходит к примесному рассеянию.

В. Двухступенчатая релаксация.

Полезно ещё иметь в виду следующую картину релаксации функции распределения за счёт различных процессов. Вот есть $\tau_i \propto 1/\omega^4$, а есть на малых частотах рассеяние холодных фононов $\tau_N \propto 1/\omega^2$ ²³ Поэтому при малых ω имеем $\tau_N < \tau_i$ и рассеяние определяется τ_N . Но N-процессы не приводят к релаксации импульса всей фононной системы в целом. Поэтому будет происходить следующая двухступенчатая релаксация. Сначала неравновесная функция распределения $f_{\mathbf{k}}$ за времена порядка τ_N будет релаксировать к равновесной (релаксация по числу частиц), но с ненулевой средней скоростью (определяемой исходным распределением):

$$f_{\mathbf{k}} \mapsto f_0 \left(\frac{\hbar\omega - \hbar\mathbf{k}\mathbf{u}}{T} \right), \quad \mathbf{u} = \frac{\sum_{\mathbf{k}} \mathbf{v}_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}}}{\sum_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}}}$$

А уже затем за время τ_i отрелаксирует импульс:

$$f_0 \left(\frac{\hbar\omega - \mathbf{k}\mathbf{u}}{T} \right) \mapsto f_0 \left(\frac{\hbar\omega}{T} \right)$$

Если же, наоборот, $\tau_i < \tau_N$, то сначала произойдёт изотропизация, т.е. распределение за время τ_i отрелаксирует по импульсу к некоторому изотропному, но нетепловому (примеси упругие, поэтому направления импульсов они перемешивают, но модули импульсов не меняют):

$$f_{\mathbf{k}} \mapsto \overline{f_{\mathbf{k}}} = f_k$$

а затем за время τ_N произойдёт релаксация к равновесной функции распределения:

$$f_k \mapsto f_0 \left(\frac{\hbar\omega}{T} \right)$$

²³ Вспоминаем, что для спонтанного распада $\tau_N^{-1} \propto \omega^5$, для индуцированного распада холодного фонона $\tau_N^{-1} \propto \omega^4$, для слияния холодного фонона $\tau_N^{-1} \propto \omega$.

17.6.11 Second Sound

А. Гидродинамические уравнения.

Фононный газ похож на газ обычных частиц, особенно при низких температурах, когда рассеяния обусловлены N-процессами (а процессами переброса можно пренебречь), т.е. при $\tau_N \ll \tau_U$. В этом случае законы сохранения энергии и импульса - обычные. В обычном газе может распространяться звук (колебания плотности). Оказывается, что в газе фононов тоже могут распространяться колебания плотности. Колебания плотности фононного газа (т.е. колебания температуры) называются вторым звуком (первый звук - это сами фононы).

Мы будем предполагать, что при рассматриваемых нами процессах температура успевает установиться локально. Если ω и λ - частота и длина волны второго звука, то для этого требуется выполнение условий

$$\omega\tau_N \ll 1, \quad l_N \ll \lambda.$$

Кин.уравнение:

$$\frac{\partial f_{\mathbf{k}}}{\partial t} + \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \frac{\partial f_{\mathbf{k}}}{\partial \mathbf{r}} = I_{\text{cr/N}}$$

Плотность энергии и импульса фононного газа:

$$E(\mathbf{r}, t) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \hbar\omega_k f_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t),$$

$$\mathbf{P}(\mathbf{r}, t) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \hbar\mathbf{k} f_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t).$$

Домножим 12.2 либо на $\hbar\omega_k$, либо на $\hbar\mathbf{k}$ и проинтегрируем по импульсам (индекс k опускаем, чтобы не было путаницы с пространственными индексами):

$$\begin{aligned}\frac{\partial E}{\partial t} + \sum_j \frac{\partial}{\partial r_j} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \hbar \omega v_j f &= \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \hbar \omega I_{\text{cr/N}}, \\ \frac{\partial P_i}{\partial t} + \sum_j \frac{\partial}{\partial r_j} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \hbar k_i v_j f &= \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \hbar k_i I_{\text{cr/N}}.\end{aligned}$$

В правых частях получаются нули в силу закона сохранения энергии и импульса при нормальных столкновениях:

$$\begin{aligned}\frac{dE}{dt} &= \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \hbar \omega I_{\text{c/N}} = 0, \\ \frac{d\mathbf{P}}{dt} &= \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \hbar \mathbf{k} I_{\text{c/N}} = 0.\end{aligned}$$

Определяя

$$\begin{aligned}\mathbf{Q} &= \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \hbar \omega \mathbf{v} f, \\ \Pi_{ij} &= \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \hbar k_i v_j f\end{aligned}$$

получаем из кин.уравнения общий вид так называемых гидродинамических уравнений (как и в гидродинамике, они написаны на макроскопические плотности и потоки):

$$\begin{aligned}\frac{\partial E}{\partial t} + \text{div } \mathbf{Q} &= 0, \\ \frac{\partial P_i}{\partial t} + \sum_j \nabla_j \Pi_{ij} &= 0.\end{aligned}$$

Наглядный смысл $\mathbf{Q}$ - поток тепла, Π_{ij} - поток i -той компоненты импульса в направлении j .

Если есть только одна ветвь спектра. ²⁴ в изотропном случае пишем $\omega = ck$, $\mathbf{v} = c\mathbf{k}/k$, и получаем

$$\mathbf{Q} = c^2 \mathbf{P}, \quad \Pi_{ij} = c \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{\hbar k_i k_j}{k} f$$

В. Второй звук и его скорость.

Переходя теперь непосредственно к задаче о втором звуке, учтём, что второй звук является слабым возмущением и в главном порядке не нарушает изотропию функции распределения по $\mathbf{k}$ (анизотропию можно учесть, но это будут малые поправки). Тогда (при наличии только одной ветви спектра) мы можем преобразовать тензор потока импульса Π_{ij} следующим образом:

$$\Pi_{ij} = c \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{\hbar \delta_{ij}}{3} \frac{k^2}{k} f = \frac{\delta_{ij}}{3} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \hbar \omega f = \frac{\delta_{ij}}{3} E.$$

В результате уравнения 12.11 – 12.12 принимают вид

$$\begin{aligned}\frac{\partial E}{\partial t} + c^2 \text{div } \mathbf{P} &= 0 \\ \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial t} + \frac{1}{3} \text{grad } E &= 0\end{aligned}$$

²⁴ Наличие только одной ветви спектра, на самом деле, было заложено в наших формулах сразу, т.к. законы сохранения энергии и импульса были написаны для одной ветви. А при наличии нескольких ветвей энергия и импульс могли бы передаваться между ними. откуда следует

$$\frac{\partial^2 E}{\partial t^2} - \frac{c^2}{3} \Delta E = 0$$

Это волновое уравнение для второго звука (т.е. для колебаний температуры), его скорость есть $c_2 = c/\sqrt{3}$.

Про распространение температуры мы обычно думаем как про диссипативный процесс. Почему же здесь незатухающие волны? Иными словами, если локально вкачать энергию, почему будет не диффузия (уравнение теплопроводности), а распространение волн (волновое уравнение)? Дело в том, что мы учли только N-процессы, при которых полный импульс фононной системы сохраняется. Если же учесть U-процессы или рассеяние на примесях, то возникает возможность сбросить импульс (решётке или примесям соответственно), и это приведёт к диффузии.

Экспериментально наблюдать второй звук можно, например, запуская импульс тепла с одной стороны и детектируя его при помощи сверхпроводящего болометра с другой стороны (например, см. V. Narayanamurti, R. Dynes, "Observation of Second Sound in Bismuth", Phys. Rev. Lett. 28, 1461 (1972)).

17.6.12 Scattering Methods

А. Изучение структурных свойств твёрдых тел методами упругого рассеяния.

Запускаем в кристаллический образец волну, слабо взаимодействующую с кристаллом (например, медленные нейтроны, рентген). На входе - волна с волновым вектором $\mathbf{k}$, на выходе - с волновым вектором $\mathbf{k}'$. Вероятность рассеяния $w_{fi} \propto |M|^2$ (она же пропорциональна сечению рассеяния). При этом

$$M = \left\langle f \left| \int e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{r}} V(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} d^3\mathbf{r} \right| i \right\rangle$$

где $|i\rangle$ и $|f\rangle$ - начальное и конечное состояние образца, а потенциал взаимодействия волны и образца можно записать в виде суммы по атомам:

$$V(\mathbf{r}) = \sum_l V_l(\mathbf{r} - \mathbf{r}_l)$$

Определив вектор рассеяния $\mathbf{K} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$, можем записать интеграл в формуле (13.1) в виде

$$\sum_l \int e^{-i\mathbf{K}(\mathbf{r}-\mathbf{r}_l)} e^{-i\mathbf{K}\mathbf{r}_l} V_l(\mathbf{r} - \mathbf{r}_l) d^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}_l) = \sum_l V_l(\mathbf{K}) e^{-i\mathbf{K}\mathbf{r}_l}$$

Таким образом,

$$|M|^2 \propto \left| \sum_l V_l(\mathbf{K}) e^{-i\mathbf{K}\mathbf{r}_l} \right|^2 = \sum_{l,m} V_l(\mathbf{K}) V_m^*(\mathbf{K}) e^{-i\mathbf{K}(\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_m)}.$$

В потенциале (13.2) есть когерентная часть (одинаковая для всех атомов) и добавка, разная для разных атомов (обусловлена локальными дефектами кристаллической решётки, например, изотопическими примесями, либо различными ориентациями спинов ядер относительно спинов падающих частиц):

$$V_l = V + \delta V_l$$

Если между величинами δV_l и δV_m нет корреляции, то статистическое среднее (по ансамблю) имеет вид

$$\overline{V_l V_m^*} = |V|^2 + \delta_{lm} \overline{|\delta V|^2},$$

поэтому

$$\overline{|M|^2} \propto \left| V(\mathbf{K}) \sum_l e^{-i\mathbf{K}\mathbf{r}_l} \right|^2 + N \overline{|\delta V|^2}.$$

Первое слагаемое - когерентное брэгговское рассеяние (результат интерференции волн, рассеявшихся на разных атомах), второе - диффузное рассеяние (знает про один атом, не знает про интерференцию).

Рассмотрим когерентное рассеяние, учтя, что есть равновесные положения атомов и малые смещения относительно них, $\mathbf{r}_l = \mathbf{R}_l + \mathbf{u}_l$. Тогда от равновесных положений получится:

$$M \propto V(\mathbf{K}) \sum_l e^{-i\mathbf{K}\mathbf{r}_l} = V(\mathbf{K}) N \sum_{\mathbf{b}} \delta_{\mathbf{K},\mathbf{b}}$$

где $\mathbf{b}$ - векторы обратной решётки. Таким образом, получаются брэгговские пики рассеяния: амплитуда и интенсивность рассеянных волн максимальна в таких направлениях, для которых волновой вектор рассеяния совпадает с одним из векторов обратной решётки.

Векторы смещения можно разложить на фурье-гармоники. Рассмотрим одну из них:

$$\mathbf{r}_l = \mathbf{R}_l + \mathbf{a} \sin \mathbf{Q}\mathbf{R}_l$$

Тогда

$$\begin{aligned} M &\propto V(\mathbf{K}) \sum_l e^{-i\mathbf{K}(\mathbf{R}_l + \mathbf{a} \sin \mathbf{Q}\mathbf{R}_l)} = V(\mathbf{K}) \sum_l e^{-i\mathbf{K}\mathbf{R}_l} \left(1 - i\mathbf{K}\mathbf{a} \frac{e^{i\mathbf{Q}\mathbf{R}_l} - e^{-i\mathbf{Q}\mathbf{R}_l}}{2i} \right) = \\ &= V(\mathbf{K}) \sum_l \left[e^{-i\mathbf{K}\mathbf{R}_l} - \frac{\mathbf{K}\mathbf{a}}{2} \left(e^{-i(\mathbf{K}-\mathbf{Q})\mathbf{R}_l} - e^{-i(\mathbf{K}+\mathbf{Q})\mathbf{R}_l} \right) \right] \end{aligned}$$

Поэтому в дополнение к основным брэгговским пикам ($\delta_{\mathbf{K},\mathbf{b}}$) появляются ещё и сателлиты ($\delta_{\mathbf{K},\mathbf{b}+\mathbf{Q}}$ и $\delta_{\mathbf{K},\mathbf{b}-\mathbf{Q}}$). Так в эксперименте можно «увидеть» смещения атомов относительно положений равновесия.

Таким образом, с помощью упругого рассеяния можно исследовать структуру кристалла (положения атомов решётки).

В. Неупругое рассеяние нейтронов.

Идея метода неупругого рассеяния состоит в том, что рассеивая на кристалле нейтроны неупругим образом, с возбуждением фононов, мы можем, детектируя вылетающие нейтроны, получить информацию о фононах в кристалле.

Рассмотрим вероятность рассеяния (пропорциональную сечению рассеяния):

$$w_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} |M|^2 \delta(\varepsilon_f - \hbar\omega - \varepsilon_i),$$

$$M = \left\langle f \left| \sum_l e^{-i\mathbf{K}\mathbf{r}_l} \right| i \right\rangle V(\mathbf{K}), \quad \mathbf{K} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$$

Здесь $|i\rangle$ и $|f\rangle$ - начальное и конечное состояние кристалла, $\hbar\omega$ - переданная кристаллу энергия, и мы рассматриваем только когерентную часть рассеяния.

Если нас интересует полная вероятность перехода, то надо просуммировать по конечным состояниям. Тогда вместо $|M|^2$ получается выражение, которое можно записать как произведение двух матриц: $\sum_f |M_{fi}|^2 = \sum_f M_{if}^\dagger M_{fi}$. Кроме того, нужно учесть, что образец находится в исходном состоянии $|i\rangle$ с некоторой вероятностью p_i (в тепловом равновесии это гиббсовское распределение). В результате получаем

$$w = \frac{2\pi}{\hbar} |V(\mathbf{K})|^2 \sum_{l,m;i,f} p_i \langle i | e^{i\mathbf{K}\mathbf{r}_l} | f \rangle \langle f | e^{-i\mathbf{K}\mathbf{r}_m} | i \rangle \delta(\varepsilon_f - \hbar\omega - \varepsilon_i)$$

Используя интегральное представление дельта-функции и гейзенберговское представление операторов,

$$2\pi\delta(\varepsilon_f - \hbar\omega - \varepsilon_i) = \frac{1}{\hbar} \int dt e^{i(\varepsilon_f/\hbar - \omega - \varepsilon_i/\hbar)t},$$

$$e^{iH_0 t/\hbar} \mathbf{r}_m e^{-iH_0 t/\hbar} = \mathbf{r}_m(t)$$

можем написать

$$w = \frac{1}{\hbar^2} |V(\mathbf{K})|^2 \int dt e^{-i\omega t} \sum_{l,m;i,f} p_i \langle i | e^{i\mathbf{K}\mathbf{r}_l(0)} | f \rangle \langle f | e^{-i\mathbf{K}\mathbf{r}_m(t)} | i \rangle =$$

$$= \frac{1}{\hbar^2} |V(\mathbf{K})|^2 \int dt e^{-i\omega t} \sum_{l,m} \langle e^{i\mathbf{K}\mathbf{r}_l(0)} e^{-i\mathbf{K}\mathbf{r}_m(t)} \rangle_T,$$

где $\langle \dots \rangle_T$ означает квантово-механическое среднее и статистическое среднее (гиббсовское) при температуре T .

Этот результат полезно связать с величиной, называемой динамическим структурным фактором (и являющейся фурье-образом корреляционной функции плотностей):

$$S(\mathbf{K}, \omega) = \int dt e^{-i\omega t} \sum_{l,m} \langle e^{i\mathbf{K}\mathbf{r}_l(0)} e^{-i\mathbf{K}\mathbf{r}_m(t)} \rangle_T =$$

$$= \int dt d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{r}' e^{-i\omega t + i\mathbf{K}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} \langle \rho(\mathbf{r}, 0) \rho(\mathbf{r}', t) \rangle_T,$$

где оператор плотности (точнее, концентрации) есть

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \sum_l \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_l(t))$$

Таким образом,

$$w = \frac{1}{\hbar^2} |V(\mathbf{K})|^2 S(\mathbf{K}, \omega)$$

Нам нужно разобраться с выражением

$$S(\mathbf{K}, t) = \sum_{l,m} \langle e^{i\mathbf{K}\mathbf{r}_l(0)} e^{-i\mathbf{K}\mathbf{r}_m(t)} \rangle_T$$

Запишем операторы координаты через равновесные положения атомов и операторы смещения:

$$\begin{aligned}\mathbf{r}_l(0) &= \mathbf{R}_l + \mathbf{u}_l(0), \\ \mathbf{r}_m(t) &= \mathbf{R}_m + \mathbf{u}_m(t),\end{aligned}$$

тогда

$$S(\mathbf{K}, t) = \sum_{l,m} e^{i\mathbf{K}(\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_m)} \left\langle e^{i\mathbf{K}\mathbf{u}_l(0)} e^{-i\mathbf{K}\mathbf{u}_m(t)} \right\rangle_T$$

Проблема с экспонентами, содержащими операторы смещения, состоит в том, что операторы $\mathbf{u}(t)$ в разные моменты времени, вообще говоря, не коммутируют. Чтобы в этом убедиться, запишем их во вторично квантованном виде:

$$\mathbf{u}_m(t) = \sqrt{\frac{\hbar}{2MN}} \sum_{\mathbf{q},s} \frac{\mathbf{e}_{\mathbf{q}s}}{\sqrt{\omega_{\mathbf{q}s}}} (a_{\mathbf{q}s} e^{i\varphi_m} + a_{\mathbf{q}s}^\dagger e^{-i\varphi_m}), \quad \varphi_m = \mathbf{q}\mathbf{R}_m - \omega_{\mathbf{q},s}t.$$

Тогда

$$\begin{aligned}[\mathbf{u}_l(0), \mathbf{u}_m(t)] &= \frac{\hbar}{2MN} \sum_{\mathbf{q},\mathbf{q}',s,s'} \frac{\mathbf{e}_{\mathbf{q}s}\mathbf{e}_{\mathbf{q}'s'}}{\sqrt{\omega_{\mathbf{q}s}\omega_{\mathbf{q}'s'}}} \left(\delta_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} \delta_{ss'} e^{i\mathbf{q}_l - i\mathbf{q}'\mathbf{R}_m + i\omega_{\mathbf{q}'s'}t} - \delta_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} \delta_{ss'} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}_l + i\mathbf{q}'\mathbf{R}_m - i\omega_{\mathbf{q}'s'}t} \right) = \\ &= \frac{i\hbar}{MN} \sum_{\mathbf{q},s} \frac{\sin \varphi_{lm}}{\omega_{\mathbf{q}s}}, \quad \varphi_{lm} = \varphi_l(0) - \varphi_m(t).\end{aligned}$$

Таким образом, коммутатор действительно не ноль, однако является числом.

Вспомним полезный факт из жизни операторов. Если есть операторы A и B такие, что

$$[A, [A, B]] = [B, [A, B]] = 0$$

(у нас это так, поскольку коммутатор - число), то из общей формулы Бейкера-Кэмпбелла-Хаусдорфа получается

$$e^A e^B = e^{A+B} e^{\frac{1}{2}[A,B]}$$

Таким образом,

$$S(\mathbf{K}, t) = \sum_{l,m} e^{i\mathbf{K}(\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_m)} \left\langle e^{i\mathbf{K}(\mathbf{u}_l(0) - \mathbf{u}_m(t))} \right\rangle_T e^{\frac{1}{2}[\mathbf{K}\mathbf{u}_l(0), \mathbf{K}\mathbf{u}_m(t)]}$$

Для упрощения будем рассматривать изотропную среду, предполагая, что все фононные колебания с заданным волновым вектором $\mathbf{q}$ вырождены. Тогда мы можем выбрать одно из трёх направлений поляризации параллельным $\mathbf{K}$. В этом случае получаем

$$S(\mathbf{K}, t) = \sum_{l,m} e^{i\mathbf{K}(\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_m)} \left\langle e^{iK(u_l(0) - u_m(t))} \right\rangle_T e^{\frac{K^2}{2}[u_l(0), u_m(t)]}$$

где u - амплитуда колебания вдоль $\mathbf{K}$. Для гармонического осциллятора

$$\left\langle e^{iK(u_l(0) - u_m(t))} \right\rangle_T = e^{-\frac{K^2}{2} \langle (u_l(0) - u_m(t))^2 \rangle_T}$$

Расписывая среднее в экспоненте, получаем:

$$\begin{aligned}
\langle (u_l(0) - u_m(t))^2 \rangle_T &= \frac{\hbar}{2MN} \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{\omega_{\mathbf{q}}} \left\langle \left(a_{\mathbf{q}} \left(e^{i\varphi_l(0)} - e^{i\varphi_m(t)} \right) + a_{\mathbf{q}}^\dagger \left(e^{-i\varphi_l(0)} - e^{-i\varphi_m(t)} \right) \right)^2 \right\rangle_T = \\
&= \frac{\hbar}{2MN} \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{\omega_{\mathbf{q}}} \langle a_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{q}}^\dagger + a_{\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{q}} \rangle_T (2 - 2 \cos \varphi_{lm}) = \\
&= \frac{\hbar}{MN} \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{\omega_{\mathbf{q}}} (2n_{\mathbf{q}} + 1) (1 - \cos \varphi_{lm}).
\end{aligned}$$

Здесь суммирование по (трём) ветвям спектра пропало, т.к. для каждого $\mathbf{q}$ мы оставили одну ветвь, у которой поляризация параллельна $\mathbf{K}$.

С. Фактор Дебая-Уоллера.

Собирая всё вместе, получаем

$$\begin{aligned}
S(\mathbf{K}, t) &= \sum_{l,m} e^{i\mathbf{K}(\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_m)} \exp \left[\frac{\hbar K^2}{2MN} \sum_{\mathbf{q}} \frac{i \sin \varphi_{lm} - (1 - \cos \varphi_{lm}) (2n_{\mathbf{q}} + 1)}{\omega_{\mathbf{q}}} \right] = \\
&= e^{-2W} \sum_{l,m} e^{i\mathbf{K}(\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_m)} \exp \left[\frac{\hbar K^2}{2MN} \sum_{\mathbf{q}} \frac{i \sin \varphi_{lm} + (2n_{\mathbf{q}} + 1) \cos \varphi_{lm}}{\omega_{\mathbf{q}}} \right]
\end{aligned}$$

где в последней записи мы отделили независящий от времени множитель

$$e^{-2W} = \exp \left[-\frac{\hbar K^2}{2MN} \sum_{\mathbf{q}} \frac{2n_{\mathbf{q}} + 1}{\omega_{\mathbf{q}}} \right],$$

называемый фактором Дебая-Уоллера.

В общем случае, не выбирая направления поляризации специальным образом, можно записать фактор Дебая-Уоллера в виде

$$e^{-2W} = \exp \left(-\langle (\mathbf{K}\mathbf{u})^2 \rangle_T \right)$$

Преобразуем зависящий от времени множитель в (13.32), учитывая, что аргумент экспоненты мал в силу большого N (оставляем первый порядок, т.е. пренебрегаем многофоновыми процессами):

$$\begin{aligned}
S(\mathbf{K}, t) &= e^{-2W} \sum_{l,m} e^{i\mathbf{K}(\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_m)} \left\{ 1 + \frac{\hbar K^2}{2MN} \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{\omega_{\mathbf{q}}} \left[(n_{\mathbf{q}} + 1) e^{i\varphi_{lm}} + n_{\mathbf{q}} e^{-i\varphi_{lm}} \right] \right\} = \\
&= e^{-2W} \sum_{l,m} \left\{ e^{i\mathbf{K}(\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_m)} + \frac{\hbar K^2}{2MN} \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{\omega_{\mathbf{q}}} \left[(n_{\mathbf{q}} + 1) e^{i(\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_m)(\mathbf{K} + \mathbf{q})} e^{i\omega_{\mathbf{q}} t} + \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + n_{\mathbf{q}} e^{i(\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_m)(\mathbf{K} - \mathbf{q})} e^{-i\omega_{\mathbf{q}} t} \right] \right\}.
\end{aligned}$$

17.6.13 Electron–Phonon Interaction [see Kamenev!!!]

(тут пока по Глазкову, потому что я слишком тупой, чтобы по нормальной теории это учить)

(тут дофига всего, пока очень плохо это понимаю.)

обзор электрон-электронного рассеяния

Вклад электрон-электронного рассеяния в проводимость также связан с процессами переброса.

Его температурная зависимость существенно зависит от геометрии ферми поверхности.

Электрон-электронный механизм рассеяния становится важен при низких температурах для очень чистых металлов.

Обычно электрон-фононный вклад оказывается более важным.

Так как электрон-электронные процессы ограничивают проводимость за счёт процессов переброса, то каждый акт рассеяния эффективен, и аналогично обсуждению для теплопроводности.

В реальном металле одновременно действует несколько механизмов рассеяния.

Если эти механизмы независимы, то их вероятности суммируются.

Вероятность обратно пропорциональна времени рассеяния, следовательно, суммируются обратные времена рассеяния или обратные проводимости - то есть суммируются вклады различных механизмов в удельное сопротивление:

$$\rho_{\text{поли}} = \rho_{\text{деф}} + \rho_{\text{эл-фон}} + \rho_{\text{эл-мл}} + \dots$$

Это правило называется правилом Матиссена.

(!!!!)

Температурная зависимость сопротивления обычного металла выходит на постоянную величину при низких температурах.

электрон-фононный вклад в проводимость (???!!)

линеаризация интеграла столкновений

??? в задании сказано, что это нужно сделать.

общая интегральная формула???

эффекты Иоффе-Регеля

их обсудить нужно.

оценка низкотемпературной проводимости

Низкотемпературная проводимость может быть легко оценена по порядку величины.

Сечение рассеяния электрона на примеси порядка атомного,

$$\tau \sim \frac{L}{v_F} \sim \frac{1}{n_{\text{деф}} a^2 v_F} \sim \frac{a}{v v_F},$$

где v - относительная тогда для времени пробега концентрация дефектов, $a \sim 2\text{\AA}$ -межатомное расстояние.

Для чистоты металла $v = 10^{-3}$ и типичного для металла значения фермиевской скорости $v_F \sim 10^8 \frac{\text{см}}{\text{сек}}$, получаем для времени пробега $\tau \sim 10^{-13}$ сек и для длины пробега $L \simeq \tau v_F \sim 10^{-5} \text{ см} \sim 100 \text{ нм}$.

А для проводимости получаем оценку

$$\sigma \simeq \frac{n_e e^2 a}{v \tau v_F} = \frac{n_e e^2 a}{v \hbar k_F} = \frac{n_e e^2 a^2}{v \hbar} = \frac{e^2}{v a \hbar} \sim 10^9 \frac{1}{\text{Ом} \cdot \text{м}} = 10^7 \frac{1}{\text{Ом} \cdot \text{см}}$$

пользуемся тем, что в хорошем металле $n_e \sim \frac{1}{a^3}$ и $k_F \sim \frac{1}{a}$.

При высоких температурах проводимость линейна по температуре при $T \gg \Theta$.

При низких температурах в чистых металлах электрон-фононное взаимодействие даёт вклад в сопротивление $\propto T^5$

(рисунок 9).

Эта температурная зависимость называется законом Блоха-Грюнайзера.

Промежуточный режим (ориентировочно, от 10K до дебаевской)

оценка высокотемпературной проводимости

Порядок величины высокотемпературной проводимости в хорошем металле также можно оценить.

Как мы обсудили, рассеяние связано с взаимодействием с вызванной фононами поляризацией среды.

Поляризация пропорциональна смещению, взаимодействие электрона с поляризационным зарядом линейно по поляризации, вероятность рассеяния по золотому правилу Ферми квадратична по взаимодействию.

Таким образом, вероятность рассеяния пропорциональна квадрату амплитуды тепловых колебаний.

Строгое вычисление [2] требует рассмотрения электростатического взаимодействия.

Однако для грубой оценки мы можем заметить, что средний квадрат амплитуды тепловых колебаний уже имеет размерность сечения, и предположить (что подтверждается точным расчётом, что сечение рассеяния электрона на каждом атоме будет по порядку величины равно этому среднему квадрату).

Как было показано ранее (лекция 2) квадрат амплитуды тепловых колебаний атомов в решётке при высоких температурах $\langle A^2 \rangle \sim \frac{3T}{M\omega_D^2} = \frac{3\hbar^2 T}{M\Theta^2}$, где M - масса атома, а температура выражена в энергетических единицах.

Дополнительно отметим, что в типичном металле для скорости звука и скорости Ферми есть соотношение [2] $s\sqrt{M} \sim v_F\sqrt{m}$, связанное с тем, что порядок энергии Ферми (электронвольт) оказывается порядка кулоновской энергии взаимодействия соседних ионов, ответственной за упругость кристалла.

Также воспользуемся тем, что в типичном металле $k_D \simeq k_F \simeq \frac{1}{a}$.

Поэтому с точностью нашей оценки

$$\tau = \frac{1}{n_{am}\sigma v_F} \sim \frac{a^3 M \omega_D^2}{v_F T} = \frac{M m s^2 k_D^2 a^3}{\hbar k_F T} \sim \frac{m^2 v_F^2 k_D^2 a^3}{\hbar k_F T} = \frac{\hbar k_F k_D^2 a^3}{T} \sim \frac{\hbar}{T}$$

и для проводимости, возвращая в запись постоянную Больцмана для использования привычной Шкалы температур, имеем

$$\sigma \simeq \frac{n_e e^2 \hbar}{m k_B} \frac{1}{T} \sim \frac{1}{T} 10^{10} \frac{K}{O_M \cdot M} = \frac{1}{T} 10^8 \frac{K}{O_M \cdot c_M}$$

Время пробега электрона в хорошем металле при комнатной температуре составляет порядка 10^{-14} сек, а длина пробега - около 10^{-6} см, то есть всё ещё много больше межатомного расстояния.

(???)

Видно, что отношение RRR действительно служит мерой концентрации дефектов

$$RRR = \frac{R(300 \text{ K})}{R(0 \text{ K})} = \frac{\sigma(0 \text{ K})}{\sigma(300 \text{ K})} \simeq \frac{m a^2 k_B \cdot 300 \text{ K}}{\hbar^2 v} \sim \frac{10^{-2}}{v}$$

и для технически чистых ($w \sim 10^{-3}$) металлов оно будет измеряться десятками.

(мб вставлю, все-таки давно пора бы Глазкова перечитать)

Пример зависимости сопротивления от температуры от комнатной до гелиевой (4.2K) температуры приведён на рисунке 10.

Видно, что при низких температурах сопротивление выходит на постоянную величину, а при высоких растёт линейно.

Связь высокотемпературных процессов рассеяния, ограничивающих проводимость, с колебаниями решётки наглядно демонстрируется рисунком 10: после нормировки температуры на дебаевскую и сопротивлений на сопротивления при дебаевской температуре данные для различных соединений попадают на универсальную кривую.

(?)

Обратим внимание, что линейная часть на температурной зависимости сопротивления (рисунок 10) продолжается до температур заметно ниже дебаевской.

Это связано с тем, что, строго говоря, эта линейная зависимость не является найденной нами высокотемпературной асимптотикой.

Действительно, даже если исключить из рассмотрения вклад о рассеяния на дефектах, для того чтобы перейти от низкотемпературного закона T^5 к линейному закону при высоких температурах кривая $R(T)$ должна пройти через точку перегиба (см. также формулу Блоха-Грюнрайзена в сноске на странице 25).

Этот переход через точку перегиба имеет место как раз при температурах порядка дебаевской и даёт наблюдаемую нами линейную зависимость.

Курьёзным свойством этой линейной зависимости является то, что линейная экстраполяция высокотемпературной части пересекает ось температур при некоторой положительной температуре, «указывая» на «сверхпроводимость» металла при этой температуре, что конечно же не имеет места.

процессы переброса

потом про них подумаю, пока что не до них.

Кинетическое уравнение для фононов

Теплопроводность диэлектрика в тау-приближении

Рассеяние фононов на дефектах решетки

Рассеяние фононов на границах диэлектрика

Правило Матиссена

Вероятность обратно пропорциональна времени рассеяния, следовательно, суммируются обратные времена рассеяния или обратные проводимости - то есть суммируются вклады различных механизмов в удельное сопротивление:

$$\rho_{\text{поли}} = \rho_{\text{деф}} + \rho_{\text{эл-фон}} + \rho_{\text{эл-мл}} + \dots$$

Это правило называется правилом Матиссена.

закон Блоха-Грюнрайзена в двух словах

закон Видемана-Франца об отношении коэффициента теплопроводности и подвижности, помноженной на температуру

Закон Видемана-Франца утверждает, что отношение коэффициента теплопроводности к помноженной на температуру проводимости постоянно:

...

Полученные нами результаты для теплопроводности и проводимости в модели почти свободных электронов:

$$\kappa = \frac{\pi^2}{3} \frac{n_e \tau}{m} k_B^2 T$$

$$\sigma = \frac{n_e e^2 \tau}{m}.$$

Выражения очень похожи и, разделив одно на другое и возвращая постоянную Больцмана в запись для совместимости с литературой, получаем $\frac{\kappa}{\sigma T} = \frac{\pi^2}{3} \frac{k_B^2}{e^2} = 2.44 \cdot 10^{-8} \frac{Bm \cdot OM}{K^2}$.

Это отношение не зависит от свойств материала, его также называют постоянной Лоренца

$$L = \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{k_B}{e} \right)^2 = 2.44 \cdot 10^{-8} \frac{Bm \cdot OM}{K^2}.$$

Иногда в литературе используется эквивалентная форма записи размерности этой постоянной $\frac{B^2}{K^2}$.

Закон Видемана-Франца верен лишь тогда, когда времена пробега, ограничивающие процессы электропроводности и теплопроводности совпадают.

Из нашего анализа процессов рассеяния мы знаем, что это имеет место для рассеяния на дефектах (низкотемпературный предел) и при высоких температурах (порядка температуры Дебая и выше).

При промежуточных температурах ($T \ll \Theta$) времена электрон-фононной релаксации принципиально отличаются для электро- и теплопроводности и закон Видемана-Франца перестаёт выполняться.

То, что при выводе закона Видемана-Франца сокращаются модельные параметры времени свободного пробега и массы электрона позволяет надеяться, что этот результат более общий, чем модель почти свободных электронов.

Действительно, закон Видемана-Франца получается и при более строгом рассмотрении.

Напомним, что при рассмотрении явления электропроводности вместо смещения всей ферми-сферы в k -пространстве под действием электрического поля можно говорить только о перераспределении приповерхностных электронов: в силу неразличимости электронов мы можем считать, что состояние электронов, попадающих в пересечение несмещённой и смещённой ферми-сфер, просто не изменилось.

Это означает, что мы можем на самом деле отойти от модели почти свободных электронов, ибо в закон Друде-Лоренца $\sigma = \frac{n_e e^2 \tau}{m^*}$ входят эффективная масса и время пробега для электронов на ферии-поверхности.

В такой трактовке в переносе заряда участвуют не все электроны, а только перераспределённые электроны вблизи поверхности Ферми, их концентрация $n \simeq n_e \frac{eEL}{\varepsilon_F} = n_e \frac{eEv_F \tau}{\varepsilon_F}$, но и движутся они не с дрейфовой скоростью, а со скоростью Ферми.

Аналогично для теплопроводности полученное нами выражение $\kappa = \frac{\pi^2}{3} \frac{n_e \tau}{m^*} k_B^2 T$ оказывается более общим.

В процессах рассеяния участвуют только электроны на поверхности Ферми.

Поэтому время пробега в этой формуле также берётся на поверхности Ферми.

Масса электрона здесь появилась из формулы для теплоёмкости, а при замене массы частицы ферми-газа на эффективную массу на поверхности Ферми эта формула остаётся верной для любой изотропной ферми-системы.

То есть в формуле для теплопроводности оказываются те же величины, что и в формуле для проводимости даже за пределами модели почти идеального ферми-газа.

о постоянной Лоренца

там есть табличка, ее мб добавлю.

типичные значению приведу, хотя мб это в твердом теле сделаю, а не в кинетике.

также есть инфа про измерение ее, пока не до этого.

геометрия ферми-поверхности и проводимость

Обсудим их связь. Говорят, она большая.

17.6.14 Кинетика других электромагнитных явлений**Другое (???)****Вычисление остаточного сопротивления**

пока упустил

Термо-электрические явления в металле и полупроводнике

на самом деле это уже в ЭСС начато, да и в твердом теле, чисто добить осталось.

диссипативная функция Рэлея

пока упустил

Законы сохранения и потоки энергии, энтропии

Тензор плотности потока импульса.

Равновесное и локально-равновесное распределение.

Условие применимости гидродинамики.

Теплопроводность и вязкость.

Поглощение звука.

Температурное поведение теплопроводности в диэлектрике.

Кинетические коэффициенты металла, Высокие температуры**Процессы переброса в металле****Кинетические коэффициенты металла. Низкие температуры****Аномальный скин-эффект****17.7 Kinetics of Dielectrics**

(!!! add from Landau)

17.8 Kinetics of Semiconductors

(??? I don't know what to write here now. maybe I'll write something from Arovas)

17.9 Quantum Transport: Basics

(see special note about it for now)

17.9.1 Theory of Kinetics by Arovas [I'll add later]

(see his notes on condensed matter, I'll think ones about them and will add them)

17.9.2 Quantum Transport: Basics

Мезоскопический микроконтакт

Обсудим мезоскопический контакт, то есть контакт, который имеет как квантовые свойства, так и классические.

мотивация и обзор применений?

это простейший пример перехода между двумя проводниками.

????

обзор итоговых свойств мезоскопической системы

???

квант проводимости

$$\frac{e^2}{h}$$

..????

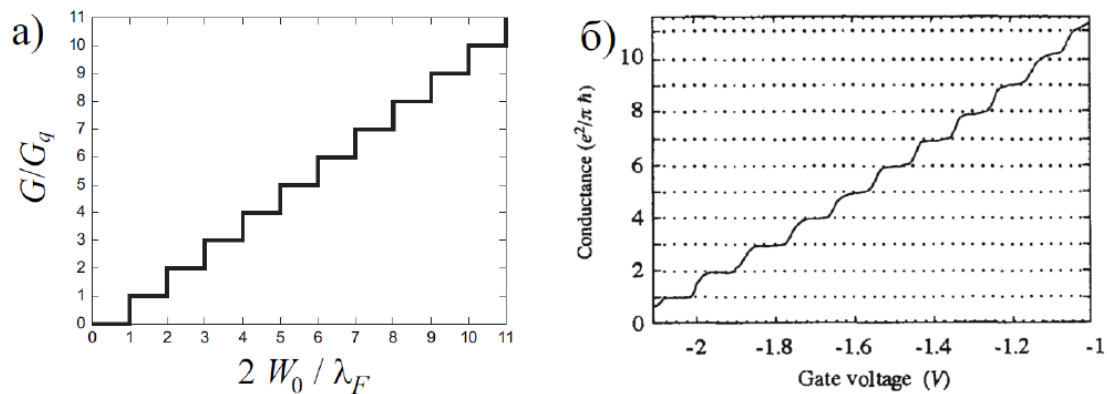
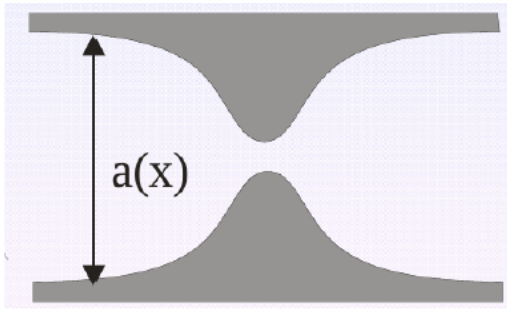


Рис. 4.4. Квантование кондактанса точечного контакта при изменении ширины сужения W_0 напряжением на затворе, (см. рис. 4.1). (а) Кондактанс как функция W_0 . (б) Экспериментальные зависимости кондактанса сужения как функции напряжения на затворе V_g . С хорошей степенью точности можно считать, что W_0 — линейная функция V_g . (График (б) взят из первой экспериментальной работы на эту тему [12]. Практически одновременно аналогичные результаты были представлены в работе [13]).

проводимость микроконтакта между двумя резервуарами

Пусть имеется потенциал вида:



W_0 - значение толщины в нуле.

Движение происходит за счет того, что разные химпотенциалы, разные температуры, или что-нибудь еще, поэтому начинается движение через контакт.

Принимаем, что скорость изменение ширины на длине волны де бройля намного меньше ширины ямы

УШ, соответствующее такому двумерному потенциалу начнем с общего вида:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \phi(x, y) + u(x, y)\phi(x, y) = E\phi(x, y)$$

Будем искать решение УШ как

$$\phi = \varphi_n(x)\xi_n(y)$$

где $\xi_n(y)$ - решение одномерной задачи в яме с бесконечными стенками

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

Тогда на $\xi_n(y)$ имеется уравнение:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \xi_n}{\partial y^2} + u(x, y)\xi_n = u_n \xi_n,$$

где $U_n(x) = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2mW^2(x)}$ - фиктивный потенциальный барьер из-за того, что часть энергии уходит на движение вдоль y , то электрон не с любой энергией пройдет.

(тут можно нарисовать горбы $U_n(x)$ для разных n и сравнивать при нуле)

сколько горбов при нуле для $U_n(x=0)$ ниже энергии ферми - только так называемых каналов.

Остальными уровнями пренебрегаем.

То есть на сколько мод хватит расстояния и энергии электрона - столько у нас и каналов.

кстати, по каналам частицы распределены равномерно, потому что их распределение определяется функцией Ферми, которая одинакова.

ПОТОК

Теперь поищем поток. Ищется он по формуле: ??????

будем считать, что функция распределения в резервуарах фермиевская.

$$f_i = \frac{1}{e^{\frac{E_i - \mu}{T}} + 1}$$

для первого канала:

$$I_1 = \sum_n ev_{1,n}f_1 - \sum_{n,m} ev_{1,m}f_1 R_{n,m}$$

где учтены налетающий, отражающий поток.

для второго:

$$I_2 = - \sum_n ev_{2,n}f_2 + \sum_{n,m} ev_{1,m}f_1 T_{n,m}$$

для одномерного тока имеем:

n, m - разные каналы, из которого и в который происходит переход.

$$I = 2 \int_0^{+\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar} \left(\sum_n ev_{1,n}f - \sum_{m,n} ev_{1,m}f_1 R_{n,m} - \sum_{n,m} ev_{2,m}f_2 T'_{n,m} \right)$$

перепишем первый фактор $\frac{dp}{2\pi\hbar}$

$$\frac{dp}{2\pi\hbar} = \dots \frac{dE}{2\pi\hbar v_x}$$

скорости сокращаются, еще какие-то преобразования и:

формула Ландау для тока через контакт:

$$I = \frac{1}{\pi\hbar} \int_0^{\infty} dE (f_1 - f_2) \sum_{n,m} T_{n,m}$$

в ней преобразуем для разных случаев разницу функций распределений и находим ток. (примеры разобрать нужно бы!)

зависимость от V в функциях ферми, в которых $\mu_2 = \mu_1 - eV$. и от T тоже в той же функции.

проводимость - обратное удельное сопротивление, кондактанс - полное сопротивление.

кондактанс почитаем, делая какие-то приближения:

$$\left. \frac{dI}{dV} \right|_{V \rightarrow 0} = \sum_{n,m} \frac{e}{\pi\hbar} \int_0^{\infty} dE \left(- \left. \frac{df_2}{dV} \right|_{V \rightarrow 0} \right) T_{n,m} = \frac{e^2}{\pi\hbar} \sum_{n,m} T_{n,m}(E_F)$$

$$T_{n,m} = \delta_{n,m} \theta(E - E_F)$$

по итогу получаем ступеньку в зависимости от числа контактов

$$\left. \frac{dI}{dV} \right|_{V \rightarrow 0} = \frac{e^2}{\pi\hbar} \sum_{n,m} T_{n,m}(E_F)$$

проводимость при наличии одного открытого канала (??!!)

проводимость микроконтакта между двумя резервуарами при наличии рассеивающего центра с матрицы рассеяния

поток тепла и его квант между двумя резервуарами

Можно посчитать с помощью энтропии неравновесного Ферми газа.

(?)

тепловой кондактанс??

Он такой:

Известна связь между потоком энтропии и тепла: (????)

подход Ландауэра??

дополнение: суть использованных методов

суть вторичного квантования:??

суть подхода Ландауэра??

суть адиабатики??

Неравновесные дырки и электроны

Щелкачев посчитал важным нам про это рассказать

обзор

запишем выражения для вклада электронов валентной зоны в электрический ток $\vec{J} = e \sum_{\sigma, \vec{p}} \vec{v} f\left(\frac{\varepsilon_v - \zeta}{k_B T}\right) = -|e| \sum_{\sigma, \vec{p}} \vec{v} f\left(\frac{\varepsilon_v - \zeta}{k_B T}\right) = |e| \sum_{\sigma, \vec{p}} \vec{v} \left\{1 - f\left(\frac{\varepsilon_v - \zeta}{k_B T}\right)\right\}$

Дырочный ток

$$\begin{aligned} \left\{1 - f\left(\frac{\varepsilon_v - \zeta}{k_B T}\right)\right\} &= f\left(\frac{\varepsilon_p - \zeta_p}{k_B T}\right) \\ \varepsilon_p &= \frac{p^2}{2m_v}, \quad \zeta_p = -E_g - \zeta \\ \vec{J}_p &= |e| \sum_{\sigma, \vec{p}} \vec{v} f\left(\frac{\varepsilon_p - \zeta_p}{k_B T}\right) \end{aligned}$$

17.9.3 Examples of Semiconductors

(??? I'll add later)

17.9.4 Quantum electron transport

Quantum electron transport through scattering matrix

(статья Лесовика по который я и учусь)

We consider the scattering matrix approach to quantum electron transport in meso- and nanoconductors. This approach is an alternative to the more conventional kinetic equation and Green's function approaches, and often is more efficient for coherent conductors (especially for proving general relations) and typically more transparent. We provide a description of both time-averaged quantities (for example, current-voltage characteristics) and current fluctuations in time — noise, as well as full counting statistics of charge transport in a finite time. In addition to normal conductors, we consider contacts with superconductors and Josephson junctions.

Основные формулы

(пойму - выпишу самую суть)

Введение

Over the past 30 years, research of electrical conductors has evolved from considering macroscopic objects to the study of mesoscopic objects¹ and, finally, to nanophysics objects. While in macroscopic objects the quantum nature is mainly manifested at the level of band structure formation, the mesoscopic objects are larger than the atomic objects but smaller than the characteristic length of quantum correlations. Lastly, nanophysics operates on an even smaller scale, down to the atomic one, and incorporates quantum contacts and quantum dots, molecular and atomic contacts, carbon nanotubes, graphene, etc. Electronic transport in conductors of a size comparable to inelastic scattering length, such as the energy relaxation length or dephasing length, or even the Fermi wavelength, exhibits a number of specific features, the most important of which is a considerable nonlocality of the transport phenomena. For such conductors, there is no reason in considering such quantities as local conductivity, while the problem to be addressed is the transportation of electrons from point A (left reservoir) to point B (right reservoir). In this case, the electron transfer through a conductor is a purely quantum mechanical process. This process can be best described by means of a well known approach used in the scattering theory of particles and atoms, where given are an initial state (in our case, an electronic state), a scatterer, and a final state (in the reservoir where the electron arrives) and where the transition from one state to another is described by the scattering matrix.

Presently, the scattering matrix approach is widely and successfully applied in the quantum transport study. The main difference between this approach and more conventional methods based, for example, on the kinetic equation, the Kubo formula, Green's functions, or diagram techniques, can be put in this way. The total conductivity (or the total current) of a system is expressed in terms of the conductor's quantum mechanical transparency, generally expressed in terms of the scattering matrix, and the occupation numbers of the exact electronic scattering states, which are determined by the parameters at the boundaries (reservoirs). At first glance, such a method for describing the electronic transport just replaces the problem of finding the local or nonlocal conductivity with the calculation of transmission, which is equally complicated. But in fact the situation is somewhat different. First, in many cases involving a simple sample geometry and simple scattering potential, transmissions can be calculated analytically, which is easier and more instructive than, e.g., calculating a Green's function. Second, it is often possible to make a reasonable assumption regarding the scattering matrix and facilitate an acceptable description of the experiment. For disordered (dirty) conductors with a complex scattering potential, the transmission probabilities can be efficiently described statistically, for example, by methods developed for random matrices.

In addition, due to the development of mesoscopics and nanophysics, new problems emerged, which either had not attracted proper attention earlier or seemed unrealistic for systems under study. One of these problems is the description of the current beyond its average value, namely, calculation of the current fluctuations and presentation of the full counting statistics in quantum mesoand nanoconductors. It was found that these particular problems could be efficiently solved by the scattering matrix method. It is important that even if the scattering matrix is unknown, i.e., has not been calculated for a particular scattering potential, the full counting statistics for large time intervals can be formally obtained, including the average current. Thus, if the scattering matrix is given then not only the conductance $G = 1/\mathcal{R}$, where $\mathcal{R}$ is the resistance, can be calculated but also the spectral density of current fluctuations $S(\omega)$ at low frequencies, and the distribution function $P(Q)$ of the charge transferred within a certain fixed time interval can be found. Besides, it proves possible to derive general relations like, for example, the fluctuation-dissipation theorem, relating the average current and nonequilibrium fluctuations. The conventional approach would require repeated calculation of S and P and other quantities different from the average current.

2 SCATTERING MATRIX APPROACH TO THE DESCRIPTION OF TRANSPORT: LANDAUER FORMULA

The scattering matrix that transforms asymptotically free incoming states into the asymptotically free outgoing states thus describing interactions with an obstacle and between particles plays an outstanding role in quantum physics. This matrix was first introduced by Born [1] and then by Wheeler [2] and independently by Heisenberg [3, 4] to describe the scattering of particles and atoms and has been extensively used since the late 20 th century in the theory of electron transport in quantum conductors. The best known result in the theory of quantum transport obtained using the scattering matrix approach is the famous Landauer formula,² which is also called the Landauer-Büttiker formula. In fact, this formula in its conventional form first appeared in Refs. [6-8]. The conductance of a quasi-one-dimensional (one-channel) conductor is given by the conductance quantum $G_0 = 2e^2/h$ (where e is the electron charge, h is Planck's constant, and the factor 2 appears due to the spin degeneracy), known from the quantum Hall effect [9], times the transparency T of the conduction channel. In the case of several channels, the expression for the conductance

$$G = \frac{2e^2}{h} \sum_{n,m} T_{nm}$$

contains the sum of transmission probabilities T_{nm} from one mode (channel) to another (see details in Sec. 3). The Landauer approach was better understood in subsequent papers, for example, Imry [10] pointed out the role of a voltage drop at the input to the conductor. Later it was extended to more complicated systems with many reservoirs [11], the quantum Hall effect regime [12 - 15], hybrid superconducting systems [16-21], and was also used to describe current fluctuations in time [2225]. Currently, this method has become very clear and functional. As a whole, this approach can be applied to the description of coherent mesoscopic conductors in which the characteristic size L of the voltage drop region is much smaller than all inelastic lengths.

2.1. Conductance of one-dimensional contact

To describe a quasi-one-dimensional coherent conductor, we first consider a purely one-dimensional problem for a system in which electron reservoirs are located to the left and to the right, far away from an obstacle (scatterer) located at the center, and emit electrons in the direction of this obstacle.

Let us assume that electrons with energies up to μ move from the left reservoir to the scatterer (we forget about spin for a while). Experimentally, this may correspond to the presence of the bias voltage $V = \mu/e$. Such states are called the Lippmann-Schwinger scattering states [26].

One of the problems for such states in the continuous spectrum is to count their density. It can be solved by using the so-called "box normalization" method. This normalization method imposes the periodic boundary conditions by closing the conductor into a circle with length L to make the spectrum discrete. Thereafter, in the limit $L \rightarrow \infty$ we are back to the continuous spectrum.⁴ But it is difficult to rigorously perform this procedure for scattering states, and here we solve this problem in a different manner, by forming normalized wave packets from continuous-spectrum states.

By dividing the energy interval $[0, \mu]$ into N segments with size $\Delta = \mu/N$, we form the wave

packets

$$\Psi_n(x, t) = c_n \int_{(n-1)\Delta}^{n\Delta} dE \Psi_{L,E}(x) e^{-iEt/\hbar}$$

where $n = 1, \dots, N$ and $\Psi_{L,E}(x)$ is the left Lippmann-Schwinger scattering state with energy E , having the asymptotic form

$$\Psi_{L,E}(x) = \begin{cases} e^{ikx} + r(E)e^{-ikx}, & x \rightarrow -\infty \\ t(E)e^{ikx}, & x \rightarrow \infty \end{cases}$$

The normalization constant can be found from the relation

$$\int dx \Psi_{L,E'}^*(x) \Psi_{L,E}(x) = 2\pi\delta(k' - k)$$

where $k = \sqrt{2mE}/\hbar$. From correct normalization of wave packets $\int dx |\Psi_n(x, t)|^2 = 1$, we obtain

$$c_n = \frac{1}{\sqrt{h\Delta v_n}}$$

where $v_n = \sqrt{2n\Delta/m}$ is the velocity of the n th packet and Δ is assumed to be small.

The wave packets described by expressions (2) are localized in the vicinity of $x = 0$ at $t = 0$ and have the characteristic size $h v_n / \Delta$. These packets move with the velocity v_n . As $\Delta \rightarrow 0$ (i.e., $N \rightarrow \infty$), the wave packets

become broader, their shape approaching the shape of scattering states (3).

We now calculate the current I carried by a given orthonormalized set of wave packets. The current for them is additive since, according to Pauli's principle, only one electron can occupy each state. Thus, we can first calculate the contribution

$$I_n = -i \frac{e\hbar}{2m} [\Psi_n(x)^* \Psi_n'(x) - \Psi_n'(x)^* \Psi_n(x)]$$

to the current from each n th packet and then sum up the contributions. Due to the charge conservation law, for scattering states (as for any stationary states), the current is independent of the point at which we calculate it. Hence in the limit $\Delta \rightarrow 0$, the contribution to the current from each packet at $t = 0$, can be calculated, for example, to the right of the barrier, where the wave function has the known form $\Psi_L(x) = t(E)e^{ikx}$. This gives

$$I_n = c_n^2 \Delta^2 e v_n T(n\Delta) = \frac{e}{h} \Delta T(n\Delta)$$

where $T(E) = |t(E)|^2$ is the transparency at the energy E . Summing the contributions of all packets, we find

$$I = \sum_{n=1}^N I_n = \frac{e}{h} \Delta \sum_{n=1}^N T(n\Delta) \xrightarrow{(\Delta \rightarrow 0)} \frac{e}{h} \int_0^\mu dE T(E)$$

where the sum over n transforms to the integral over μ in the limit $\Delta \rightarrow 0$. The conductance, defined as the ratio of the current I to the voltage $V = \mu/e$, can be written in the form

$$G = \frac{I}{V} = \frac{e^2}{h} \int_0^\mu \frac{dE}{\mu} T(E)$$

Expression (9) is a simple variant of the Landauer formula for the conductance [7, 27].

Since the continuous spectrum states cannot be normalized in the usual way, like the discrete spectrum states, it is not clear in advance what current is carried by each many-particle state constructed from the arbitrary states of the continuous spectrum. This problem can be solved by considering the wave packets and passing to the limit as we did above. Such a procedure can be used in an explicit form to analyze intricate problems, for example, to describe the full transport statistics, as was done in Ref. [28]. The current can be calculated using the rule (which can also be derived by the method outlined above) allowing the summation of the contributions to the current from continuous-spectrum states: if $\psi_\xi(x)$ satisfies a normalization condition generalizing (4),

$$\int dx \psi_\xi^*(x) \psi_{\xi'}(x) = c(\xi) \delta(\xi - \xi')$$

then the mean of the current operator is given by

$$I = \int \frac{d\xi}{c(\xi)} n(\xi) I_\xi$$

where I_ξ is the current from the particle in the state $\psi_\xi(x)$ and $n(\xi)$ is the occupation number, equal to 1 if the state with the subscript ξ is present in the many-particle wave function (Slater determinant) and to 0 otherwise (at finite temperatures $\Theta > 0$, the number $n(\xi)$ can take values between 0 and 1). In our case, we can choose $\xi = k$, $I_k = -e\hbar k T(E)/m$, $c(k) = 2\pi$, and

$$n(k) = \begin{cases} 1, & \hbar^2 k^2 / 2m < \mu \\ 0, & \hbar^2 k^2 / 2m > \mu \end{cases}$$

Substituting these expressions in Eq. (11), we obtain

$$I = \frac{e\hbar}{m} \int_0^{k(\mu)} \frac{dk}{2\pi} k T(E) = \frac{e}{h} \int_0^\mu dE T(E),$$

which coincides with Eq. (8). At the last calculation step, we switched from integration over the wave vector k to integration over energy E , using the one-dimensional density of states

$$\nu(E) = \frac{dk}{dE} = \frac{m}{\hbar^2 k}$$

This leads to the cancellation of the factor k in the integrand in Eq. (12). This implies that in the absence of scattering each energy interval carries the same current (per spin)

$$i_0 = \frac{\delta I}{\delta E} = \frac{e}{h}$$

which is a characteristic feature of the one-dimensional ballistic transport.

2.2. Two reservoirs

In Sec. 2.1 we discussed the case of spinless electrons emitted by one reservoir. We now consider the more realistic case where spin-1/2 electrons are emitted by both reservoirs. We assume that the left reservoir with the electrochemical potential μ_L emits the "left" scattering states $\Psi_L(x)$ and the right reservoir with the electrochemical potential μ_R emits the "right" scattering states

$\Psi_R(x)$, see Fig. 1. Then the total current is determined by contributions from both reservoirs:

$$I_L = \frac{2e}{h} \int_0^{\mu_L} dE T(E)$$

and where the factor 2 appears due to the spin degeneracy, and in contrast to I_L , the current I_R determined by the right states acquires a minus sign because the wave vector and velocity for $\Psi_R(x)$ are opposite to those for $\Psi_L(x)$. Here, we used the important property of the scattering matrix following from its unitarity and symmetry under time reversal, namely, that the transmission probabilities for mutually inverse processes are equal.⁶ In our case, the transmission probability from left to right, $T = |t|^2$, is equal to the transmission probability from right to left, $T = T' = |t'|^2$. In the total current

$$I = I_L + I_R = \frac{2e}{h} \int_{\mu_R}^{\mu_L} dE T(E)$$

the contributions from energy intervals filled both on the left and on the right cancel while the states filled only in one reservoir make a contribution to the total current.

2.3. Landauer voltage drop

Having discussed the current caused by the difference in electrochemical potentials, we now address the question about the voltage drop on a scatterer. First, we

determine the electron density produced in a nonequilibrium state, assuming that $\mu_L > \mu_R$, see Fig. 2. The left reservoir emits states (3) and the right reservoir emits the states $\Psi_{R,E}$. The total density to the right of the scatterer,

$$\begin{aligned} \rho_R &= 2 \int_0^{k(\mu_L)} \frac{dk}{2\pi} |\Psi_{L,E}(x)|^2 + 2 \int_0^{k(\mu_R)} \frac{dk}{2\pi} |\Psi_{R,E}(x)|^2 \\ &\approx 2 \int_0^{k(\mu_L)} \frac{dk}{2\pi} T(E) + 2 \int_0^{k(\mu_R)} \frac{dk}{2\pi} [1 + R(E)] \end{aligned}$$

is the sum of contributions from the left and right states, the factor 2 is due to spin degeneracy. Here we do not consider the details of Friedel oscillations with the period $\pi/k(\mu)$ (see below) and perform averaging over several wavelengths $\propto \hbar/\sqrt{2m\mu}$. Calculating the density on the left gives

$$\rho_L \approx 2 \int_0^{k(\mu_L)} \frac{dk}{2\pi} [1 + R(E)] + 2 \int_0^{k(\mu_R)} \frac{dk}{2\pi} T(E)$$

In the case of nonequilibrium situation, $\mu_L \neq \mu_R$, and nonideal transparency, $T < 1$, the density on the right of the scatterer does not coincide with that on the left, see Fig. 1.

The difference in densities is given by

$$\rho_L - \rho_R = 4 \int_{k(\mu_R)}^{k(\mu_L)} \frac{dk}{2\pi} R(E)$$

where we use the relation $R(E) + T(E) = 1$. If the quantum conductor is electrically neutral, then this density difference should be compensated by the voltage drop across the scatterer,

which bends the conduction band bottom. This voltage drop is called the Landauer voltage drop V_L and in the stationary case it can be found from the condition of electrical neutrality, which is assumed to take place in the equilibrium. In particular, the density should be the same on both sides of the barrier as shown in Fig. 2.

In the presence of a voltage drop V_L , the left states with the energy E (measured from the conduction band bottom in the right reservoir) have the form

$$\Psi_{L,E}(x) = \begin{cases} e^{ikx} + r(E)e^{-ikx}, & x \rightarrow -\infty \\ \sqrt{\frac{\tilde{k}}{k}}t(E)e^{i\tilde{k}x}, & x \rightarrow \infty \end{cases}$$

where $k(E) = \sqrt{2m(E - eV_L)/\hbar}$ and $\tilde{k}(E) = \sqrt{2mE/\hbar}$ are the wave vectors in the left and right asymptotic regions respectively. Similarly, the right scattering states are the wave vectors in the left and right asymptotic regions respectively. Similarly, the right scattering states are

$$\Psi_{R,E}(x) = \begin{cases} e^{-i\tilde{k}x} + r'(E)e^{i\tilde{k}x}, & x \rightarrow \infty \\ \sqrt{\frac{\tilde{k}}{k}}t'(E)e^{-ikx}, & x \rightarrow -\infty \end{cases}$$

The factor $\sqrt{k/\tilde{k}}$ appears due to the unitarity of the scattering matrix. We also note that the scattering problem must be solved taking the bending of the conduction band bottom due to the Landauer voltage V_L into account. For example, due to the appearance of this voltage, the right scattering states with energies $E < eV_L$ are completely reflected, $R(E) = 1$. The averaged density on the left, caused by the left scattering states, is given by

$$\rho_{LL} = 2 \int_0^{k(\mu_L)} \frac{dk}{2\pi} [1 + R(E)]$$

where the factor 2 is due to spin degeneracy. The density on the left, caused by the right states, takes the form

$$\rho_{LR} = 2 \int_{\tilde{k}(eV_L)}^{\tilde{k}(\mu_R)} \frac{d\tilde{k}}{2\pi} \frac{\tilde{k}}{k} T(E)$$

Similarly, calculating the density on the right, we find

$$\begin{aligned} \rho_{RL} &= 2 \int_0^{k(\mu_L)} \frac{dk}{2\pi} \frac{k}{\tilde{k}} T(E), \\ \rho_{RR} &= 2 \int_{\tilde{k}(eV_L)}^{\tilde{k}(\mu_R)} \frac{d\tilde{k}}{2\pi} [1 + R(E)] + 2 \int_0^{\tilde{k}(eV_L)} \frac{d\tilde{k}}{2\pi} [1 + 1], \end{aligned}$$

where the last term appears due to the right states completely reflected at the bottom of the conduction band. To simplify further calculations, we switch to integrals over energies. For ρ_{LL} , we then obtain $[dk = (m/\hbar^2 k) dE]$

$$\rho_{LL} = \frac{2}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{2}} \int_{eV_L}^{\mu_L} \frac{dE}{2\pi} \frac{1 + R(E)}{\sqrt{E - eV_L}}$$

Similarly, for ρ_{LR} we have $[d\tilde{k} = (m/\hbar^2 \tilde{k}) dE]$

$$\rho_{\text{LR}} = \frac{2}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{2}} \int_{eV_{\text{L}}}^{\mu_{\text{R}}} \frac{dE}{2\pi} \frac{T(E)}{\sqrt{E - eV_{\text{L}}}}$$

Calculations for ρ_{RL} and ρ_{RR} give

$$\begin{aligned} \rho_{\text{RL}} &= \frac{2}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{2}} \int_{eV_{\text{L}}}^{\mu_{\text{L}}} \frac{dE}{2\pi} \frac{T(E)}{\sqrt{E}} \\ \rho_{\text{RR}} &= \frac{2}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{2}} \int_{eV_{\text{L}}}^{\mu_{\text{R}}} \frac{dE}{2\pi} \frac{1 + R(E)}{\sqrt{E}} + \frac{2}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{2}} \int_0^{eV_{\text{L}}} \frac{dE}{2\pi} \frac{2}{\sqrt{E}} \end{aligned}$$

Summing the densities on the left, $\rho_{\text{L}} = \rho_{\text{LL}} + \rho_{\text{LR}}$, and using the relation $T(E) + R(E) = 1$, we obtain

$$\begin{aligned} \rho_{\text{L}} &= \frac{2}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{2}} \int_{eV_{\text{L}}}^{\mu_{\text{R}}} \frac{dE}{2\pi} \frac{2}{\sqrt{E - eV_{\text{L}}}} \\ &\quad + \frac{2}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{2}} \int_{\mu_{\text{R}}}^{\mu_{\text{L}}} \frac{dE}{2\pi} \frac{1 + R(E)}{\sqrt{E - eV_{\text{L}}}} \end{aligned}$$

while the total density on the right $\rho_{\text{R}} = \rho_{\text{RL}} + \rho_{\text{RR}}$ is given by

$$\rho_{\text{R}} = \frac{2}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{2}} \int_0^{\mu_{\text{R}}} \frac{dE}{2\pi} \frac{2}{\sqrt{E}} + \frac{2}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{2}} \int_{\mu_{\text{R}}}^{\mu_{\text{L}}} \frac{dE}{2\pi} \frac{T(E)}{\sqrt{E}}$$

Assuming the electric neutrality, we should equate the densities: ⁷

$$\int_{\mu_{\text{R}}}^{\mu_{\text{L}}} \frac{dE}{2\pi} \frac{1 + R(E)}{\sqrt{E - eV_{\text{L}}}} = \int_{\mu_{\text{R}} + eV_{\text{L}}}^{\mu_{\text{R}}} \frac{dE}{2\pi} \frac{2}{\sqrt{E}} + \int_{\mu_{\text{R}}}^{\mu_{\text{L}}} \frac{dE}{2\pi} \frac{T(E)}{\sqrt{E}}$$

Equation (33) allows one to calculate the voltage V_{L} for an arbitrary dependence transparency on energy and an arbitrary difference of electrochemical potentials.

We consider a simple linear case and find V_{L} for a small difference $\Delta\mu \equiv \mu_{\text{L}} - \mu_{\text{R}} \ll \mu_{\text{R}}$. Under such conditions, the voltage drop is also small, $|eV_{\text{L}}| \ll \mu_{\text{L}}$. We assume that $T(E)$ is constant on the interval $[\mu_{\text{R}}, \mu_{\text{L}}]$. Then replacing $\sqrt{E - eV_{\text{L}}}$ by $\sqrt{E}$ in Eq. (33) and taking T and R out of the integrand, we express the Landauer voltage as

The voltage V_{L} is zero for an ideally transparent conductor and reaches the maximum $eV_{\text{L}} = \Delta\mu$ when all the electrons are reflected. The current is [see expression(17)]

$$I = \frac{2e}{h} T \Delta\mu$$

which gives the Landauer resistance

$$\mathcal{R}_{\text{L}} = \frac{V_{\text{L}}}{I} = \frac{h}{2e^2} \frac{R}{T}$$

The absence of the voltage drop in an ideal conductor was the object of intensive discussions for a long time. It finally became clear that the voltage drop occurs even in this case, but in joints with reservoirs rather than in the conductor itself (see the discussion in Sec. 2.4).

2.4. Contact resistance

Equating $\Delta\mu$ in Eq. (35) to the value specified by the bias voltage eV , we obtain the conductance $G = I/V$ in the form ⁸

$$G = \frac{2e^2}{h}T$$

Resistance (36) is different from the inverse of G in "Landauer formula" (37). We can assume that (37) is the conductance measured by the two-contact method, whereas resistance (36) is the resistance measured by the four-contact method. ⁹ The Landauer resistance takes only the voltage drop directly across the barrier into account. ¹⁰ However, in a one-dimensional conductor, the voltage drop also appears in contacts with reservoirs, which is the reason for the discrepancy between the two Landauer formulas. Subtracting V_L from the bias voltage $\Delta\mu = eV$, we obtain the voltage drop V_A at the conductor entrances:

$$V_A = \Delta\mu - eV_L = \Delta\mu T.$$

The total voltage drop can be written as the sum

$$\begin{aligned} V &= V_L + V_A = I\mathcal{R}_L + I\mathcal{R}_A \\ &= I \frac{h}{2e^2} \frac{1-T}{T} + I \frac{h}{2e^2} = I \frac{h}{2e^2 T} = \frac{I}{G} \end{aligned}$$

In the symmetric case, the voltage drop is distributed equally between contacts. The voltage drop $V_A/2$ at each boundary (contact) corresponds to the resistance

$$\mathcal{R}_S = \frac{h}{4e^2},$$

which is the quantum analogue of the known Sharvin resistance [30]. We can assume that this resistance is caused by the reflection of higher modes at the wire entrance (see Sec. 4 for the details).

Figure 3 shows the example of a ballistic conductor ($T = 1$). Applying a voltage, we obtain the nonzero current $I = 2e^2/hV$, although no voltage drop occurs in the one-dimensional conductor itself due to the absence of backward reflection. The distribution of the voltage equally between contacts has been studied in detail theoretically [31, 32] and verified experimentally [33, 34]. As a whole, the described situation is quite unusual from the standpoint of the classical local conductivity: the electric field inside the conductor is absent, although the total current is nonzero, see Fig. 4. It is also unusual that the

Joule heat dissipates far from the reservoirs due to slow energy relaxation, whereas the electromagnetic energy, from the standpoint of classical electrodynamics, enters the electron system at much smaller scales, in voltage drop regions in contacts and at the barrier.

Finally, we note that the oscillating part of the electron density (and its slowly changing part at a finite voltage), which we did not consider above, can lead to an additional scattering of electrons. Density oscillations (Friedel oscillations) are not completely screened and produce a spatially dependent electrostatic potential. The oscillating part of the potential is especially important because the oscillation period is equal to π/k_F and backscattering from it (by $2k_F$ in the momentum space) is strong [35]. Therefore, the transmission probability $T(E)$ taking the total scattering potential into account can strongly differ from the bare probability (determined on a local scatterer); in addition, this probability in general case depends on the voltage V . Assuming that the reflection amplitude is independent of energy, we can obtain the oscillating part of the density in equilibrium in the form

$$\delta n(x) = \frac{1}{|x|} \{ \text{Im}(r) [\cos(2k_F x) - 1] + \text{Re}(r) \sin(2k_F |x|) \}$$

The case of energy-independent r is realistic, for example, for almost complete reflection ($r \approx -1$), but similar oscillating dependences also appear for an arbitrary scatterer.

We emphasize once again the difference between our approach and more traditional methods: instead of calculating the nonlocal conductivity $\sigma(r, r')$ and using it in the expression

$$j_\alpha(r) = \int \sigma(r, r')_{\alpha\beta} E_\beta(r') dr'$$

we calculate the total conductance determining the total current $I = GV$ as a function of voltage. The convenience of such approach is obvious, because instead of calculating the self-consistent field E for use in Eq. (40), only the total voltage drop V must be known. In this case, the conductance can be expressed in terms of the probability of transmission through the conductor. (Yet, to exactly solve the scattering problem in the nonlinear case, the electrostatic potential inside the conductor must also be known.)

In Sec. 3 we consider a multichannel conductor as a waveguide for electrons to solve a broader class of problems.

3. WAVEGUIDES: THE MULTICHANNEL CASE

Let us describe a quantum conductor as a wire smoothly connected to reservoirs. More formally, we consider the geometry convenient for the description of such a system.

A quasi-one-dimensional system is formed as a constriction with infinitely high walls (or with a potential increasing at infinity) in transverse directions (y, z) and transport is possible along the x axis only, see Fig. 5. Plane waves belonging to different modes can propagate along this x axis. In mesoscopic physics such modes are called channels. In transverse directions each channel has a spatial structure of the bound states. The waveguide can transfer many modes. At low temperatures in a narrow waveguide only the first mode is significant and the transport becomes effectively one-dimensional (we actually discussed this situation in Sec. 2). In the general case the number of conducting channels involved in transport is finite.

3.1. Mode quantization

Let us consider now the simple case of translational invariance along the x axis. We want to show how modes appear due to the transverse motion quantization. We solve the Schrödinger equation

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(x, y, z) \right] \Psi(x, y, z) = E \Psi(x, y, z)$$

Other approaches for quantum electron transport

17.10 IX Metals by Landau

17.10.1 §78. Residual resistance

THE transport properties of metals are considerably more complex than those of insulators, if only because they contain quasi-particles of different kinds (conduction electrons and phonons).

The electric charge is, of course, transported by the conduction electrons. Heat transfer, on the other hand, is by both electrons and phonons. In practice, however, the electrons are also predominant in thermal conduction in metals of sufficiently high purity, mainly because their speeds (v_F on the Fermi surface) are much greater than those of the phonons (the speed

of sound). Moreover, at low temperatures the electron specific heat considerably exceeds the phonon specific heat.

The conduction electrons undergo collisions of various types: with one another, with phonons and with impurity atoms (and other lattice defects). The collision frequency for the first two types decreases with the temperature. At sufficiently low temperatures, therefore, the scattering of electrons by impurities is the determining factor in transport phenomena. This range is called the residual resistance range, and we shall consider it as the first topic in the kinetics of metals.

The relations between the electric current $\mathbf{j}$ and the dissipative energy flux q' in a metal, and the electric field $\mathbf{E}$ and the temperature gradient, have the form (44.12), (44.13):

$$\mathbf{E} + \Gamma(\mu/e) = \mathbf{j}/\sigma + \alpha \nabla T, \quad (78.1)$$

$$q' = q - (\varphi - \mu/e)\mathbf{j} = \alpha T \mathbf{j} - \kappa \nabla T. \quad (78.2)$$

In this form they apply to crystals with cubic symmetry, and for simplicity this symmetry will everywhere be assumed. For crystals that do not have cubic symmetry, the coefficients σ, κ and α are replaced by tensors of rank two. The relation (78.2) is more convenient to use if $\mathbf{j}$ in it is expressed in terms of $\mathbf{E}$ by means of (78.1):

$$q' = \sigma \alpha T [E + \nabla(\mu/e)] - (\kappa + T \sigma \alpha^2) \nabla T. \quad (78.3)$$

The discussion in §74 about the transport equation for a Fermi liquid remains largely valid for an electron liquid in a metal. The momentum of the quasi-particles is here replaced by their quasi-momentum, and the form of the Fermi surface is in general complex and different for each individual metal.

The transport coefficients for a metal are in principle calculated by means of the linearized transport equation

$$-e\mathbf{E} \cdot \mathbf{v} \partial n_0 / \partial \epsilon + \mathbf{v} \cdot \partial n_0 / \partial \mathbf{r} = I(\delta \bar{u}),$$

where $\mathbf{v} = \partial \epsilon / \partial \mathbf{p}$, and the collision integral is linearized with respect to the required small function $\delta \tilde{n}$ defined by (74.13). Differentiation of n_0 with respect to $\mathbf{r}$ can be arbitrarily carried out with $\mu = \text{constant}$, since the gradient of μ would still enter in the combination $e\mathbf{E} + \nabla \mu$, as it should by (78.1). Then

$$\frac{\partial n_0}{\partial T} = -\frac{\epsilon - \mu}{T} \frac{\partial n_0}{\partial \epsilon}$$

and the transport equation takes the form

$$-\left(e\mathbf{E} + \frac{\epsilon - \mu}{T} \nabla T\right) \cdot \mathbf{v} \frac{\partial n_0}{\partial \epsilon} = I(\delta \tilde{n}) \quad (78.4)$$

The current density and the dissipative energy flux are given by the integrals

$$\mathbf{j} = -e \int \mathbf{v} \delta \tilde{n} \cdot 2d^3p / (2\pi\hbar)^3, \quad q' = \int (\epsilon - \mu) \mathbf{v} \delta \tilde{n} \cdot 2d^3p / (2\pi\hbar)^3 \quad (78.5)$$

when q' is calculated as the flux of the kinetic energy $\epsilon - \mu$, there is no need to subtract the convective transport of potential energy, $\varphi \mathbf{j}$

A characteristic of conduction electron scattering by impurity atoms is that it is elastic. Because the atoms have a large mass and are "bound" in the lattice, the electron energy may be regarded as unchanged in a collision. We shall show that the assumption of elastic scattering

is by itself sufficient to give a simple relation between the electrical and thermal conductivities of the metal.

To obtain this, we note that the elastic collision operator does not affect the dependence of the function $\delta\tilde{n}$ on the energy ϵ ; the collisions simply move the particles on the constant-energy surface. This means that any factor in $\delta\tilde{n}$ which depends only on ϵ can be taken outside the operator I . We can therefore seek the solution of the transport equation in the form

$$\delta\tilde{n} = \frac{\partial n_0}{\partial \epsilon} \left(e\mathbf{E} + \frac{\epsilon - \mu}{T} \nabla T \right) \cdot \mathbf{l}(\mathbf{p}) \quad (78.6)$$

where $l(p)$ satisfies the equation

$$I(1) = -v. \quad (78.7)$$

The current density calculated from the distribution (78.6) is

$$\mathbf{j} = -e \int \left\{ e(\mathbf{E} \cdot \mathbf{l})\mathbf{v} + \frac{\epsilon - \mu}{T} (\mathbf{l} \cdot \nabla T)\mathbf{v} \right\} \frac{\partial n_0}{\partial \epsilon} \frac{2d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \quad (78.8)$$

The first term gives the conductivity tensor

$$\sigma_{\alpha\beta} = -e^2 \int v_\alpha l_\beta \frac{\partial n_0}{\partial \epsilon} \frac{2d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \quad (78.9)$$

In a crystal with cubic symmetry, $\sigma_{\alpha\beta} = \sigma\delta_{\alpha\beta}$, and the conductivity is

$$\sigma = -\frac{1}{3}e^2 \int \mathbf{l} \cdot \mathbf{v} \frac{\partial n_0}{\partial \epsilon} \frac{2d^3p}{(2\pi\hbar)^3}$$

or, transforming the integral as in (74.18)-(74.20),

$$\sigma = \frac{2}{3}e^2 J_F, \quad J = \int \mathbf{l} \cdot \mathbf{v} dS / v (2\pi\hbar)^3 \quad (78.10)$$

The integration in J_F is taken over all sheets of the Fermi surface within one unit cell of the reciprocal lattice.

Similarly, the second term in (78.8) gives on comparison with (78.1)

$$\alpha\sigma = \frac{2e}{3T} \int \eta(v \cdot \mathbf{l}) \frac{\partial n_0}{\partial \epsilon} \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}$$

where $\eta \equiv \epsilon - \mu$. The integration over d^3p is replaced by integration over the constant-energy surfaces $\eta = \text{constant}$ and over η . Again with J as in (78.10), we find

$$\alpha\sigma = \frac{2e}{3T} \int J \eta \frac{\partial n_0}{\partial \eta} d\eta \quad (78.11)$$

The function

$$\frac{\partial n_0}{\partial \epsilon} = -\frac{1}{T(e^{\eta/T} + 1)(e^{-\eta/T} + 1)}$$

decreases exponentially as $\eta \rightarrow \pm\infty$; the integration with respect to η can therefore be extended from $-\infty$ to $+\infty$. The integral is governed mainly by the range $|\eta| \sim T$; $J(\eta)$, on the other hand, varies significantly only in the range $\eta \sim \mu \gg T$. It is therefore sufficient to write

$$J \approx J_F + \eta dJ/d\epsilon_F$$

On substitution in (78.11), the integral of the first term is zero, because the integrand is an odd function of η ; the second term gives

$$\begin{aligned}\alpha\sigma &= \frac{2e}{3T} \frac{dJ}{d\epsilon_F} 2 \int_0^\infty \eta^2 \frac{\partial n_0}{\partial \eta} d\eta \\ &= -\frac{8e}{3T} \frac{dJ}{d\epsilon_F} \int_0^\infty \eta n_0 d\eta\end{aligned}$$

The integral

$$\int_0^x \frac{\eta d\eta}{e^{\eta/T} + 1} = \frac{\pi^2}{12} T^2$$

using also (78.10), we find

$$\alpha = -\frac{\pi^2 T}{3e} \frac{d \log J}{d\epsilon_F}. \quad (78.12)$$

In order of magnitude, $|\alpha| \sim T/e\epsilon_F$:

Let us now put $E = 0$ and calculate the energy flux. Again using the cubic symmetry, we find

$$q' = \frac{2\nabla T}{3T} \int_{-x}^\infty J \eta^2 \frac{\partial n_0}{\partial \eta} d\eta$$

Here it is sufficient to put $\mathbf{J} = \mathbf{J}_F$, which gives

$$q' = -\frac{2\pi^2}{9} T J_F \nabla T.$$

Comparison with (78.3) and (78.10) shows that

$$\kappa + T\sigma\alpha^2 = \pi^2\sigma T/3e^2.$$

From the estimate of α given above, the term $T\sigma\alpha^2$ on the left is small compared with the right-hand side, in the ratio $(T/\epsilon_F)^2$. Neglecting this term, we have finally the following relation between the thermal and electrical conductivities:

$$\kappa = (\pi^2 T/3e^2) \sigma, \quad (78.13)$$

the Wiedemann-Franz law: [†]

We must again emphasize that the proof of this relation uses only the fact that the scattering of conduction electrons is elastic. An examination of the proof also readily shows that the assumption of cubic symmetry merely simplifies the formulae. In the general case where the crystal has any symmetry, a similar relation (78.13) exists between the tensors $\kappa_{\alpha\beta}$ and $\sigma_{\alpha\beta}$.

To find the temperature dependence of the coefficients κ and σ separately, the collision integral is needed. For collisions with impurity atoms, its form is exactly analogous to the integral (70.3) for phonon scattering by impurities:

$$C(n) = N_{\text{imp}} \int w(\mathbf{p}, \mathbf{p}') [n'(1-n) - n(1-n')] \delta(\epsilon - \epsilon') \cdot 2d^3p'/(2\pi\hbar)^3 \quad (78.14)$$

The factors $1-n$ and $1-n'$ take account of the Pauli principle (a transition can take place only to an unoccupied state); the factors n' and n signify that scattering can occur only from an occupied state. As in (70.3), it is assumed in the integral (78.14) that the impurity

[†] A formula of the type (78.13) was derived qualitatively by P. Drude (1900), who first formulated the concept of conduction electrons participating in the thermal equilibrium of the metal. The quantitative result in classical statistics was given by H. A. Lorentz (1905), and in Fermi statistics by A. Sommerfeld (1928).

atoms are randomly distributed and that the mean distance between them is much greater than the scattering amplitude; the various atoms then scatter independently. The equation $w(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = w(\mathbf{p}', \mathbf{p})$ has already been used in (78.14). The Born approximation is in general not applicable to the scattering of conduction electrons by impurity atoms. The equation as given can be justified by the arguments used in deriving the principle of detailed balancing in the form (2.8). Here, however, it is implied that the positions occupied by the impurity atoms in the metal lattice have a symmetry that allows inversion.

The linearization of the collision integral amounts to replacing the difference $n'(1 - n) - n(1 - n') = n' - n$ by $\delta\bar{n}' - \delta\bar{n}$. Equation (78.7) then becomes

$$N_{\text{imp}} \int w(\mathbf{p}, \mathbf{p}') (I' - 1) \delta(\epsilon - \epsilon') \cdot 2d^3p' (2\pi\hbar)^3 = -\mathbf{v} \quad (78.15)$$

This does not involve the temperature. The solution $g(p)$ is therefore also independent of the temperature, as is the conductivity σ , by (78.10). Thus, at sufficiently low temperatures, when the scattering by impurities is the chief mechanism of electrical resistance, the resistance tends to a constant (residual) value. Accordingly, the thermal conductivity κ in this range is proportional to T ,[†]

For a rough quantitative estimate of the residual resistance, we can use the elementary formula (43.7), putting (for electrons in a metal) $p \sim p_F$:

$$\sigma \sim e^2 N \|p_F, \quad (78.16)$$

where N is the electron density. For scattering by impurities, the mean free path $l \sim 1/N_{\text{imp}} \sigma_1$, where σ_1 is the transport scattering cross-section. Hence the residual resistance $\rho_{\text{res}} = 1/\sigma$ is

$$\rho_{\text{res}} \sim N_{\text{imp}} \sigma_t p_F / e^2 N. \quad (78.17)$$

A further comment should be added to the above discussion. The general condition for the applicability of the transport equation to a Fermi liquid requires that the quantum uncertainty of the electron energy should be small in comparison with the width ($\sim T$) of the thermal blurring of the Fermi distribution. This uncertainty is $\sim \hbar/\tau$, where $\tau \sim l/v_F$ is the mean free time. For scattering by impurities $l \sim 1/N_{\text{imp}} \sigma_1$; the uncertainty $\hbar/\tau$ is independent of the temperature, and therefore blurs the Fermi boundary even when $T = 0$. At first sight, it follows from this that the whole of the above discussion is subject to the very severe condition

$$T \gg \hbar v_F \sigma_t N_{\text{imp}}, \quad (78.18)$$

depending on the impurity concentration. In reality, however, there is no such limitation (L. D. Landau, 1934).

The reason is that, because of the fixed positions of the impurity atoms and the elasticity of electron scattering by them, the whole problem of calculating the electric current can in principle be formulated as the quantum-mechanical problem of the motion of an electron in a given complex external field having a potential. For electron states determined as stationary states in this field, the energy has no uncertainty; at $T = 0$, the electrons occupy a range of states bounded by a sharp Fermi surface, but in the space of quantum numbers for motion in the field, not in momentum space. With this formulation of the problem, conditions of the type (78.18) do not arise.

[†]In this analysis it is assumed that equation (78.15) does not contain quantities that vary rapidly near $\epsilon = \epsilon_F$, and so I can be replaced by I_F in (78.9). This is true for scattering by ordinary impurities, but not for scattering by paramagnetic atoms.

17.10.2 §79. Electron-phonon interaction

In sufficiently pure metals, the chief mechanism for the establishment of equilibrium over a wide temperature range is the interaction between conduction electrons and phonons.

The condition for an electron to be able to emit (or absorb) a phonon requires that the speed of the electron be greater than that of the phonon; compare the analogous result in §68 for the emission of a phonon by a phonon. The speed of electrons at the Fermi surface is, however, usually large in comparison with that of the phonons; the condition is therefore satisfied, and the main contribution to the electron-phonon collision integral comes from just these one-phonon processes.

The collision integral then has the following form, analogous to the phonon-phonon integral (67.6): †

$$\begin{aligned}
 C_{e,\text{ph}^{\text{ph}}}(n_p) = & \int w(\mathbf{p}', \mathbf{k}; \mathbf{p}) \{n_p(1 - n_p) N_k - n_p(1 - n_p)(1 + N_k)\} \times \\
 & \times \delta(\epsilon_p - \epsilon_{p'} - \omega_k) d^3k / (2\pi)^3 \\
 & + \int w(\mathbf{p}'; \mathbf{p}, \mathbf{k}) \{n_p(1 - n_p)(1 + N_k) - n_p(1 - n_p) N_k\} \times \\
 & \times \delta(\epsilon_p + \omega_k - \epsilon_{p'}) d^3k / (2\pi)^3
 \end{aligned} \tag{79.1}$$

The first term corresponds to processes with emission of a phonon having quasimomentum k by an electron having a given quasi-momentum p , and the reverse processes with absorption of a phonon k by electrons p' with return to the quasi-momentum $\mathbf{p}$:

$$\mathbf{p} = \mathbf{p}' + \mathbf{k} + \mathbf{b}; \tag{79.2a}$$

in these processes, the transitions take place between an electron state with given energy ϵ_p and states of lower energy. The second term corresponds to processes

† In §79 – 83 the units used are such that $\hbar = 1$.

with absorption of a phonon by an electron p and the reverse processes of its emission by electrons $\mathbf{p}'$:

$$p + k = p' + b; \tag{79.2b}$$

in these processes, the transitions take place between a specified electron state and ones of higher energy. For the same reasons as in the case of phonon emission by phonons (§66), the value of $\mathbf{b}$ in the equations (79.2) is uniquely determined by specifying the values of $\mathbf{k}$ and $\mathbf{p}$ with the requirement that $\mathbf{p}'$ should be in the same selected cell of the reciprocal lattice. The delta-function factors in (79.1) express the law of conservation of energy; ϵ_p is the electron energy and ω_k the phonon energy. As in Chapter VII, the phonon distribution function (numbers of occupied states) is denoted by N_k ; the electron distribution function is denoted by n_p . The subscripts marking the branch of the phonon spectrum, and the signs of summation with respect to these, will be omitted, for brevity. It is assumed that the transition probabilities are independent of the electron spin, which is unchanged in the transition.

There is a similar expression for the phonon-electron collision integral which is to be added to the phonon-phonon integral on the right-hand side of the transport equation for the phonon distribution function:

$$\begin{aligned}
 C_{\text{ph},e}(N_k) = & \int w(\mathbf{p}; \mathbf{p}', \mathbf{k}) \{n_p(1 - n_{p'}) (1 + N_k) - n_p(1 - n_p) N_k\} \times \\
 & \times \delta(\epsilon_{p'} + \omega_k - \epsilon_p) \cdot 2d^3p / (2\pi)^3
 \end{aligned} \tag{79.3}$$

with $\mathbf{p} = \mathbf{p}' + \mathbf{k} + \mathbf{b}$. This is the difference between the number of phonons $\mathbf{k}$ emitted by electrons with any quasi-momenta p and the number absorbed by electrons with any $\mathbf{p}'$. The factor 2 allows for the two possible spin directions of the emitting or absorbing electron.

In first-order perturbation theory, the probabilities of phonon emission or absorption by an electron which occur in these integrals are determined by the electron-phonon interaction operator linear in the phonon operators $\hat{U}_s(n)$ (66.2): the linearity corresponds to the fact that these operators are responsible for transitions in which only one of the phonon state occupation numbers changes by unity. Without repeating the discussion in §66, we may note that, in the limit as the phonon quasi-momentum $\mathbf{k}$ tends to zero, the phonon emission or absorption probability is proportional to k :

$$w \propto k \quad (79,4)$$

According to a general property of transition probabilities in the Born approximation, the probabilities of the direct and reverse transitions are equal, and so [†]

$$w(\mathbf{p}', \mathbf{k}; \mathbf{p}) = w(\mathbf{p}; \mathbf{p}', \mathbf{k}) \quad (79,5)$$

This property has already been made use of in the integrals (79.1) and (79.3).

A further simplification is achieved by taking into account the symmetry (expressed by the fact that the operators $\hat{U}_s$ are real) with which the phonon creation and annihilation operators appear in the electron-phonon interaction operator. Because of this, the emission of a phonon with quasi-momentum $\mathbf{k}$ is equivalent to the absorption of one with quasi-momentum $-\mathbf{k}$. We shall also use the fact that the electron energies ϵ_p and $\epsilon_{p'}$ are close to the Fermi energy ϵ_F . Let $\mathbf{p}_F$ and $\mathbf{p}'_F$ be vectors in the directions of p and p' , ending on the Fermi surface, and let the functions w be expressed in terms of the directions of $\mathbf{p}_F$ and $\mathbf{p}'_F$ and the differences $\eta_p = \epsilon_p - \epsilon_F$, $\eta_{p'} = \epsilon_{p'} - \epsilon_F$ which represent the closeness of the electron energy to ϵ_F . As regards these variables, w is a slowly varying function, which changes appreciably only in ranges $\sim \epsilon_F \gg T$. Neglecting quantities $\sim \eta \sim T$, we can put $\eta_p = \eta_{p'} = 0$ in these functions. The equivalence mentioned above is then expressed by the equation

$$w(\mathbf{p}'_F, \mathbf{k}; \mathbf{p}_F) = w(\mathbf{p}'_F; \mathbf{p}_F, -\mathbf{k}), \quad (79,6)$$

the w being functions only of the directions of $\mathbf{p}_F$ and $\mathbf{p}'_F$. If now we change the variable of integration k to $-k$ in the second term in (79.1), the coefficients w in the two integrals become equal; since $\omega_{-k} = \omega_k$, the change simply replaces N_k by N_{-k} .

The integrals (79.1) and (79.3) are, of course, zero when the equilibrium electron and phonon distribution functions are substituted. The linearization of these integrals for small deviations from equilibrium is carried out simultaneously with respect to both distribution functions, which we write as

$$\left. \begin{aligned} n &= n_0(\epsilon) + \delta\tilde{n}, & N &= N_0(\omega) + \delta N, \\ \delta\tilde{n} &= -\frac{\partial n_0}{\partial \epsilon} \varphi = \frac{n_0(1-n_0)}{T} \varphi, \\ \delta N &= -\frac{\partial N_0}{\partial \omega} \chi = \frac{N_0(1+N_0)}{T} \chi. \end{aligned} \right\} \quad (79,7)$$

The transformation is exactly similar to those in §§67 and 74. For example, the expression in the braces in the first term in (79.1), rewritten as

$$(1-n)(1-n')(1+N) \left[\frac{n'}{1-n'} \frac{N}{1+N} - \frac{n}{1-n} \right]$$

[†] The quantum numbers i and f of the initial and final states are always written in the order fi in the notation for the probability.

is put into the form

$$n_0 (1 - n'_0) (1 + N_0) \frac{1}{T} (\varphi' - \varphi + \chi)$$

This is conveniently transformed further by means of the equation

$$n_0(\epsilon) [1 - n_0(\epsilon')] = [n_0(\epsilon) - n_0(\epsilon')] N_0 (\epsilon - \epsilon') \quad (79.8)$$

which is easily verified by direct calculation. We then find

$$(n_0 - n'_0) \frac{N_0 (1 + N_0)}{T} (\varphi' - \varphi + \chi) = -\frac{\partial N_0}{\partial \omega} (n_0 - n'_0) (\varphi' - \varphi + \chi).$$

The other terms are transformed similarly, leading to the following linearized collision integrals:

$$\begin{aligned} C_{e,\text{ph}}(n) = I_{e,\text{ph}}(\varphi, \chi) = & - \int \frac{\partial N_0}{\partial \omega} w^2 (n'_0 - n_0) \{ (\varphi_{p'} - \varphi_p + \chi_k) \delta(\epsilon_p - \epsilon_{p'} - \omega_k) \\ & - (\varphi_p - \varphi_{p'} - \chi_k) \delta(\epsilon_p - \epsilon_{p'} + \omega_k) \} d^3k / (2\pi)^3 \end{aligned} \quad (79.9)$$

$$C_{\text{ph},e}(N) = I_{\text{ph},e}(\chi, \varphi) = \frac{\partial N_0}{\partial \omega} \int w (n'_0 - n_0) (\varphi_p - \varphi_{p'} + \chi_k) \delta(\epsilon_p - \epsilon_{p'} - \omega_k) \cdot 2d^3p / (2\pi)^3 \quad (79.10)$$

in both integrals, $p = p' + k + b$.

These integrals fall naturally into two parts, the linear integral operators acting on φ and χ respectively. For instance,

$$I_{e-\text{ph}}(\varphi, \chi) = I_{e-\text{ph}}^1(\varphi) + I_{e-\text{ph}}^{[2]}(\chi). \quad (79.11)$$

An important property of the operator $I_{e,\text{ph}}^{10}$ is that it does not change the parity of the function $\varphi(\eta, \mathbf{p}_F)$ with respect to the variable η , i.e., it leaves even and odd functions the same: as regards its effect on a function of η ,

$$I_{e,\text{ph}}^{\text{I h}}(\varphi(\eta)) \sim \int K(\eta, \eta') [\varphi(\eta') - \varphi(\eta)] d\eta,$$

where

$$K(\eta, \eta') = [n_0(\eta') - n_0(\eta)] [\delta(\eta - \eta' - \omega) - \delta(\eta' - \eta - \omega)]$$

Since

$$n_0(\eta) = \frac{1}{2} [1 - \tanh(\eta/2T)] \quad (79.12)$$

and so

$$n_0(\eta') - n_0(\eta) = \frac{1}{2} [\tanh(\eta/2T) - \tanh(\eta'/2T)]$$

we see that

$$K(\eta, \eta') = K(-\eta, -\eta'),$$

and this immediately yields the above-mentioned property of the operator, which will be used in §§ 80 and 82.

The collision integrals (79.9) and (79.10) are identically zero for the functions

$$\varphi = \text{constant} \times \epsilon, \quad \chi = \text{constant} \times \omega, \quad (79.13)$$

with the same constant. This "spurious" solution of the transport equation corresponds, like the solution (67.18) in the phonon-phonon equation, to a change in the temperature of the system by a small constant amount. The integrals (79.9) and (79.10) are, however, also zero when

$$\varphi = \text{constant} \quad (79.14)$$

and $\chi = 0$. This solution is due to the constancy of the total number of electrons (unlike the total number of phonons); formally, it corresponds to a change in the chemical potential of the electrons by a small constant amount.

To proceed to quantitative estimates, we note that the orders of magnitude of the parameters of the electron spectrum in a metal can be expressed in terms of the lattice constant d and the electron effective mass m^* only; for example, the Fermi momentum (in ordinary units) is $p_F \sim \hbar/d$, the speed $v_F \sim p_F/m^* \sim \hbar/m^*d$, and the energy $\epsilon_F \sim v_F p_F \sim \hbar^2/m^*d^2$. The parameters of the phonon spectrum and the electron-phonon interaction also contain the mass M of the atoms. The density of the substance $\rho \propto M$, and the speed of sound $u \propto \rho^{-1/2} \propto M^{-1/2}$: making the dimensions right by means of $\hbar, d$ and m^* (which can be done in only one way), we obtain the estimate

$$u \sim v_F(m^*/M)^{1/2} \quad (79.15)$$

Hence the Debye temperature is

$$\Theta \sim \hbar\omega_{\max} \sim \hbar u/d \sim \epsilon_F (m^*/M)^{1/2} \quad (79.16)$$

The mass M appears in the electron-phonon interaction operator only through the displacement operators $\hat{U}_s$ (66.2) of the atoms; this interaction involves no other small terms in $1/M$, its energy being $\sim \epsilon_F$ when $U_s \sim d$. The matrix elements of the operators $\hat{U}_s$, and therefore those of the electron-phonon interaction operator, are $\propto (M\omega)^{1/2} \propto M^{-1/4}$; for a given quasi-momentum k , the frequency $\omega \sim uk \propto M^{-1/2}$. The scattering probability is given by the square of the matrix element. Hence the function w in the collision integral is proportional to $M^{-1/2}$, or, making the dimensions right,

$$w \sim \Theta v_F d^2 \quad (79.17)$$

This estimate needs modification in relation to the emission or absorption of a long-wavelength acoustic phonon. The fact that w is then proportional to k means that the estimate must include an extra factor $k/k_{\max} \sim kd$:

$$w \sim \Theta v_F k d^3 \quad (79.18)$$

17.10.3 §80. Transport coefficients in metals. High temperatures

At high temperatures $T \gg \Theta$, phonons with all possible quasi-momenta are excited in the crystal, up to the maximum value, which has the same order of magnitude as the electron Fermi momentum: $k_{\max} \sim p_F \sim 1/d$. By the definition of the Debye temperature, the maximum phonon energy $\omega_{\max} \sim \Theta$, and so $\omega \ll T$ for all phonons.

Under these conditions, therefore, the phonon energies are small compared with the width of the blurred region in the Fermi distribution of electrons. This enables us to treat phonon

emission or absorption approximately as elastic scattering of an electron. The scattering angles are not small, since the electron and phonon quasi-momenta under these conditions are of the same order of magnitude.

At high temperatures, when the phonon state occupation numbers are large, the establishment of equilibrium in each volume element of the phonon gas (phonon-phonon relaxation) takes place very quickly. We can therefore regard the phonon distribution function as being the equilibrium one when considering the electrical and thermal conductivities, i.e. take $\chi = 0$ in the collision integrals (a quantitative estimate of χ will be made at the end of this section). That is, it is sufficient to deal with the transport equation for electrons only.

It may be noted at once that, in an approximation which assumes the electron scattering elastic, the results of §78 remain valid that were based only on this approximation, including the Wiedemann-Franz law (78.13) which gives the ratio σ/κ . To determine the temperature dependence of σ and κ separately, however, it is necessary to examine in more detail the electron-phonon collision integral (79.9).

Under the conditions in question, this integral is greatly simplified. Because the phonon energy $\omega = \pm(\epsilon' - \epsilon)$ is small, we can expand the difference $n'_0 - n_0$ in powers of ω :[†]

$$n'_0 - n_0 \approx \pm\omega \partial n_0 / \partial \epsilon$$

We can then put $\omega = 0$ in the arguments of the delta functions, obtaining

$$I_{e,ph}(\varphi) = 2 \int w \frac{\partial N_0}{\partial \omega} \frac{\partial n_0}{\partial \epsilon} \delta(\epsilon' - \epsilon) (\varphi' - \varphi) \omega \frac{d^3 k}{(2\pi)^3}$$

When $\omega \ll T$ the phonon distribution function $N_0 \approx T/\omega$, so that $\partial N_0 / \partial \omega \approx -T/\omega^2$. The derivative $\partial n_0 / \partial \epsilon \sim -1/T$. The integral is governed by the range $k \sim k_{\max}$ in which $\omega \sim \Theta$. When the delta functions are taken into account, the integration over $d^3 k$ adds a factor $k_{\max}^2 / v_F$ to the estimate of the integral:

$$I_{e,ph}(\varphi) \sim -w(T/\Theta) (k_{\max}^2 / v_F) \varphi / T$$

With (79.17) this gives

$$I_{e,ph}(\varphi) \sim -\varphi \sim -T\delta\tilde{n}. \quad (80.1)$$

This means that the electron-phonon collision frequency $\nu_{e,ph} \sim T$ (T/h in ordinary units), the mean free path $l \sim v_F/T$, and (78.16) gives for the electrical conductivity (in ordinary units)[†]

$$\sigma \sim Ne^2 \hbar / m^* T \quad (80.2)$$

The electrical conductivity of the metal is thus inversely proportional to the temperature when $T \gg \Theta$. The Wiedemann-Franz law then shows that the thermal conductivity is constant:

$$\kappa \sim Nh / m^* \quad (80.3)$$

Let us now estimate the correction functions φ and χ in the electron and phonon distributions in order to justify neglecting χ in the collision integral. We can do this, for instance, in the case where there is an electric field but no temperature gradient.

^{††} The presence of ω in this difference is consistent with the approximation that the electron scattering is elastic. It is necessary because, in bringing the collision integral to the form (79.9), we used equation (79.8), the right-hand side of which becomes indeterminate when $\epsilon = \epsilon'$.

Since the electric field does not affect the motion of the phonons, the left-hand side of the transport equation for phonons is zero. The equation therefore reduces to the vanishing of the sum of the collision integrals for phonons with electrons and phonons with phonons:

$$I_{\text{ph,e}}^{(\text{b})}(\varphi) + I_{\text{ph,e}}^{(\text{h})}(\chi) + I_{\text{ph,ph}}(\chi) = 0 \quad (80.4)$$

the superscripts (1) and (2) distinguish the two parts of the integral (79.10) in the same way as was done in (79.11).

The integral $I_{\text{ph,e}}$ is estimated similarly to $I_{\text{e,ph}}$ above. Here, however, we must take into account that the integration over the electron quasi-momenta $\mathbf{p}$ is in practice taken only near the Fermi surface, over the volume of a layer with thickness $\sim T/v_F$ and area $\sim p_F^2$. The delta function adds a factor $1/\epsilon_F$ to the estimate of the integral. The result is

$$I_{\text{ph,e}}^{(2)}(\chi) \sim -w \frac{\chi}{T} \frac{T}{\Theta} \frac{T p_F^2}{v_F \epsilon_F} \sim -\chi T / \epsilon_F, \quad I_{\text{ph,e}}^{(1)}(\varphi) \sim -\varphi T / \epsilon_F \quad (80.5)$$

The phonon-phonon collision integral is estimated as

$$I_{\text{ph,ph}}(\chi) \sim -\nu_{\text{ph,ph}} \delta N \sim -\nu_{\text{ph,ph}} (T/\Theta^2) \chi$$

with the effective collision frequency from (68.3);

$$\nu_{\text{ph,ph}} \sim T/Mud \sim T\sqrt{(m^*/M)}$$

† Note that the quantum uncertainty of the electron energy, $\sim h\nu_{\text{e,ph}} \sim T$, is of the order of the width of the blurred region in the electron distribution. This fact, however, does not make the results inapplicable, for a reason similar to that given at the end of §78 in connection with scattering by impurities. Because of the relative slowness of the vibrations of atoms in the lattice, and the elasticity of electron scattering, the problem can in principle be formulated as that of electrons moving in the given potential field of the deformed lattice.

Thus

$$I_{\text{ph,ph}}(\chi) \sim -(T^2/\Theta^2) \sqrt{(m^*/M)} \chi \sim T^2 \chi / \Theta \epsilon_F \quad (80.6)$$

Comparison of (80.5) and (80.6) shows, first of all, that

$$I_{\text{ph,e}}^{(2)}(\chi)/I_{\text{ph,ph}}(\chi) \sim \Theta/T \ll 1 :$$

the effective frequency of phonon-electron collisions (for equilibrium electrons, i.e. with $\varphi = 0$) is small relative to the phonon-phonon collision frequency. We can therefore neglect the second term in (80.4). Comparison of the two remaining terms gives

$$\chi/\varphi \sim \Theta/T \ll 1, \quad (80.7)$$

and this justifies neglecting χ in the electron-phonon collision integral. It is easily seen that the same result (80.7) is obtained when a temperature gradient is present.

The neglect of the function χ in the electron transport equation may, however, be impermissible in the treatment of thermoelectric phenomena.

According to (78.12), the derivation of which was based only on the assumption of elastic scattering of electrons, the thermoelectric coefficient is

$$\alpha^1 \sim T/e\epsilon_F; \quad (80.8)$$

the meaning of the superscript 1 will be explained later. This quantity is "anomalously" small in the sense that the order of magnitude of the integral in (78.8) (the second term) was reduced in the ratio T/ϵ_F because

$$\varphi' = -(\eta/T)l \cdot \nabla T \quad (80.9)$$

is an odd function of $\eta = \epsilon - \mu$. This property is in a sense accidental, and may have the result that a comparatively small addition to φ due to the non-equilibrium of the phonons yields a contribution to α that is comparable with (80.8).

We shall seek the solution of the electron transport equation

$$\frac{\partial n_0}{\partial T} \mathbf{v} \cdot \nabla T = -\frac{\partial n_0}{\partial \epsilon} \frac{\eta}{T} \mathbf{v} \cdot \nabla T = I_{e,\text{ph}}^{(1)}(\varphi) + I_{e,\text{ph}}^{(2)}(\chi) \quad (80.10)$$

as a sum $\varphi = \varphi^1 + \varphi^{11}$, where φ^1 is the solution of the equation without the second term on the right, and φ^{11} is the solution of the equation

$$I_{e,\text{ph}}^{(1)}(\varphi) + I_{e,\text{ph}}^{(2)}(\chi) = 0 \quad (80.11)$$

Here φ^1 is the "major" part of φ ; because the operator $I_{e,\text{ph}}^{(1)}$ is even with respect to the variable η (§79), this part has the form (80.9) and is an odd function of η . Equation (80.11) shows that $\varphi^{11} \sim \chi$, and therefore

$$\varphi^{11}/\varphi^1 \sim \chi/\varphi^1 \sim \Theta/T \ll 1.$$

Unlike φ^1 , however, φ^{11} is not zero when $\epsilon = \mu$. In the calculation of the corresponding contribution to the current density, therefore, the leading term is not cancelled, and the result is small only in the sense that φ^{11} is relatively small. This means that the latter's contribution to the thermoelectric coefficient is

$$\alpha^H \sim \alpha^1 (\epsilon_F/T) (\Theta/T) \sim \Theta/eT. \quad (80.12)$$

At the lower end of the temperature range considered, where $T \sim \Theta$, we have $e\alpha^{11} \sim 1$ in place of the small quantity $e\alpha^1 \sim \Theta/\epsilon_F$.

The thermoelectric coefficient is thus composed of two additive parts. These may be of the same order of magnitude, but they vary differently with the temperature. The physical origin of the second term in α is that heat transfer in the crystal causes a flux of phonons (a "phonon wind"), which carries the electrons with it. †

17.10.4 §81. Umklapp processes in metals

The nature of electron-phonon scattering at low temperatures is quite different from that when $T \gg \Theta$. When $T \ll \Theta$, phonons are excited with energies $\omega \sim T$ in the crystal (and belong in general to the acoustic branches of the spectrum). When such a phonon is emitted or absorbed, the electron energy changes by an amount $\sim T$, i.e. by an amount of the order of the total width of the blurred region in the Fermi distribution. The change in the electron quasi-momentum is equal to the phonon quasi-momentum. Since $k \sim T/u \ll k_{\text{max}}$, and $k_{\text{max}} \sim p_F$, it follows that the electron quasi-momentum changes only by a relatively small amount. At low temperatures, therefore, there is a limiting case which is the opposite of elastic scattering: the electron relaxation in energy takes place considerably more rapidly than as regards the quasi-momentum direction.

The energy relaxation is a rapid "mixing" in the blurred region of the Fermi distribution. The relaxation as regards direction is an equalization of the distribution over this surface; it takes place in small amounts ($\sim T/u$), i.e. it is a slow diffusion over the surface.

Before going on to a detailed consideration of the transport phenomena under these conditions, we shall make some general comments about the role of Umklapp processes. As in

insulator crystals, the finiteness of the transport coefficients in an ideal metal crystal (without impurities or defects) is due to the occurrence of these processes. With only the normal processes that conserve the total quasi-momentum of electrons and phonons, the transport equations would have spurious solutions corresponding to the movement of the electron and phonon systems as a whole relative to the lattice. These are solutions of the type

$$\varphi = \mathbf{p} \cdot \delta \mathbf{V}, \quad \chi = \mathbf{k} \cdot \delta \mathbf{V} \quad (81.1)$$

with a constant vector $\delta \mathbf{V}$; cf. (67.19). They reduce to zero the collision integrals (79.9), (79.10) if the emission or absorption of phonons by electrons takes place with conservation of quasi-momentum ($\mathbf{p} = \mathbf{p}' + \mathbf{k}$).

At high temperatures, when the quasi-momenta of both electrons and phonons are large ($\sim 1/d$), Umklapp processes take place, in general, with the same frequency as normal processes. The need to take account of them therefore does not give rise to any specific features of the transport phenomena.

The electron quasi-momenta lie near the Fermi surface, and in this sense are almost independent of the temperature. At low temperatures, however, the phonon quasi-momenta become small, and Umklapp processes may therefore be impeded. In this respect the situation is substantially different for closed and open Fermi surfaces.

An open Fermi surface, for any choice of the unit cell in p space (the reciprocal lattice), crosses the cell boundaries. In this case, clearly, Umklapp processes are always possible with emission or absorption of a phonon with arbitrarily low energy: even a small change in the electron quasi-momentum near the cell boundary can transfer the electron to an adjacent cell. In the course of their diffusion over the Fermi surface, all the electrons will ultimately reach the cell boundaries and may thus take part in Umklapp processes. Consequently, in this case also the probability of such processes contains no additional small factor in comparison with normal processes. Indeed, the classification into normal and Umklapp processes depends on the choice of the reciprocal lattice cell, and is to that extent arbitrary. With an open Fermi surface, the property that there is no additional small factor in the frequency of Umklapp processes exists for any choice of cell. It is then desirable to avoid any distinction of two types of scattering event, and to regard all of them as normal (i.e. conserving quasi-momentum) but allow electron quasi-momentum values anywhere in the reciprocal lattice. For the phonons, the unit cell is chosen so that the point $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ is at its centre; then all the longwavelength phonons (the only ones that need be considered when $T \ll \Theta$) are in a small part of the volume of one cell, near its centre. In this treatment, the spurious solution (81.1) is excluded by applying to the electron distribution function the condition of periodicity in the reciprocal lattice:

$$n(\mathbf{p} + \mathbf{b}) = n(\mathbf{p}). \quad (81.2)$$

The equilibrium distribution, depending only on the electron energy $\epsilon(\mathbf{p})$, necessarily satisfies this condition, since $\epsilon(\mathbf{p})$ is periodic. As well as $n_0(\mathbf{p})$, the derivative $\partial n_0 / \partial \epsilon$ is periodic, and so therefore is the factor $\varphi(p)$ in $\delta \tilde{n}$; this requirement eliminates the solution (81.1), which does not satisfy it.

Let us now consider a closed Fermi surface. In this case, we can choose the basic reciprocal lattice cell in such a way that the Fermi surface nowhere crosses its boundaries. [†] Then Umklapp processes correspond to electron transitions between any points on the Fermi surface in the basic cell and its replica in the

^{1†} The role of phonon drag on electrons as regards transport effects in metals was elucidated by L. É. Gurevich (1946).

^{1†} If, however, the Fermi surface consists of a number of closed cavities, it may be necessary to define the basic cell otherwise than as a parallelepiped with plane faces. This is illustrated schematically in Fig. 28 for

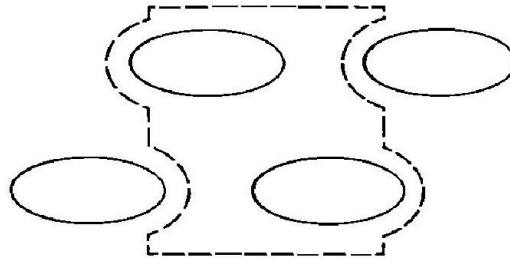


Fig. 28.

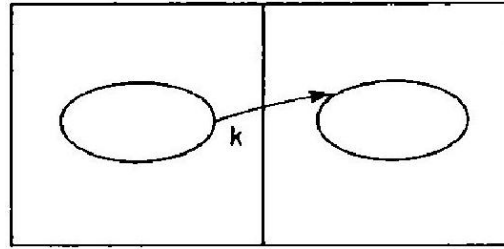


Fig. 29.

adjacent cell, as shown schematically in Fig. 29. The vector $\mathbf{k}$ joining these points is the quasi-momentum of the emitted or absorbed phonon. The distance k is in general large ($\sim 1/d$), and at low temperatures the number of phonons with energy $\omega(\mathbf{k})$ is exponentially small, being proportional to $\exp[-\omega(\mathbf{k})/T]$. The effective frequency of Umklapp scattering events then depends on the temperature according to

$$\nu_U \propto \exp[-\omega(k_{\min})/T], \quad (81.3)$$

where $k_{\min}$ is the value of the phonon quasi-momentum (among all vectors of the type concerned) for which the energy $\omega(k)$ has its minimum value. Here it is important, of course, that the electron speed is much greater than the phonon speed ($v_F \gg u$). It is for this reason that we cannot reduce the exponential in (81.3) by changing the length of the vector k by moving away from the Fermi surface. Although the phonon energy may decrease by an amount $\sim u\delta k$, the energy of the electron involved in the process would simultaneously increase by a much larger amount $\sim v_F\delta k$, thus reducing ν_U instead of increasing it. To find $k_{\min}$, it is sufficient therefore to consider the Fermi surface as such, without taking into account the blurring of the distribution near it. The points important in practice are usually those near the closest approach of the Fermi surface to its replica in the adjacent cell.

The solution (81.1) implies that there is a macroscopic flux of electrons in the absence of an electric field, i.e. an infinite electrical conductivity. The exponentially small frequency of Umklapp processes causes an exponentially large electrical conductivity (R. E. Peierls).

The thermal conductivity of a metal having a closed Fermi surface remains finite even when Umklapp processes are neglected. This is because, by (78.2), the thermal conductivity κ defines the heat flux in the absence of an electric current, and the condition $\mathbf{j} = 0$ necessarily excludes the spurious solution (81.1). The inclusion of Umklapp processes can alter the value of κ only if it is small. The same applies to the thermoelectric coefficient α , which, by the definition (78.1), relates the temperature gradient and the electric field, again

the case of a plane lattice with two non-equivalent closed cavities forming the "Fermi surface". The broken line shows the basic cell, which does not intersect these cavities. Intersections could not be avoided by any choice of a rectangular cell.

with the condition $\mathbf{j} = 0$: see §82, Problem.

The above remarks, however, do not apply to compensated metals having closed electron and hole Fermi surfaces, i.e to metals with equal numbers of electrons and holes, $N_e = N_h$ (see SP 2, §61). The reason is that in this case the solution (81.1) is not dependent on the presence of an electric current. The current density corresponding to this solution is

$$\begin{aligned}\mathbf{j} &= e \int \mathbf{v} \frac{\partial n_0}{\partial \epsilon} \mathbf{p} \cdot \delta \mathbf{V} \frac{2d^3p}{(2\pi)^3} \\ &= e \int \frac{\partial n_0}{\partial \mathbf{p}} \mathbf{p} \cdot \delta \mathbf{V} \frac{2d^2p}{(2\pi)^3} \\ &= e \int \frac{\partial n_0^{(e)}}{\partial \mathbf{p}} \mathbf{p} \cdot \delta \mathbf{V} \frac{2d^3p}{(2\pi)^3} - e \int \frac{\partial n_0^{(h)}}{\partial \mathbf{p}} \mathbf{p} \cdot \delta \mathbf{V} \frac{2d^3p}{(2\pi)^3}.\end{aligned}$$

The two integrals are taken over the electron and hole cavities respectively of the Fermi surface; in the second, the hole distribution used is $n^{(h)} = 1 - n$. We can now integrate by parts; the resulting integrals over the surfaces of the cell faces are zero because of the rapid decrease of $n_0^{(e)}$ and $n_0^{(h)}$ away from the respective Fermi surfaces. The result is

$$\mathbf{j} = e\delta V (N_h - N_e). \quad (81.4)$$

For a compensated metal, $\mathbf{j} = 0$.

This means that the electrical conductivity of a compensated metal is finite even when Umklapp processes are not taken into account. The thermal conductivity and the thermoelectric coefficient, on the other hand, are governed by the Umklapp processes and would be infinite if these were ignored, since the condition $\mathbf{j} = 0$ then does not exclude the spurious solution (81.1).

In the arguments and estimates in §§ 81 and 82, we are essentially implying the simplest assumptions as to the form of the Fermi surface, namely that it is either closed or open, with all its characteristic dimensions of the order of $1/d$. The Fermi surfaces of actual metals, however, in general have a complex form, and may consist of several different sheets; we shall not pause to analyse the resulting complications in the behaviour of the transport coefficients. For example, the sheets of open Fermi surfaces in different cells of the reciprocal lattice may be connected by narrow bridges (of width $\Delta p \ll p_F$). The presence of the small parameter $\Delta p/p_F$ in the problem may create new intermediate temperature ranges with a different temperature dependence of the transport coefficients. The sheets of closed Fermi surfaces may come "anomalously" near together, and this may move the exponential law (81.3) into the range of "anomalously" low temperatures.

17.10.5 §82 . Transport coefficients in metals. Low temperatures

In the quantitative study of transport phenomena at low temperatures, we shall have in mind the case of open Fermi surfaces, and therefore pay no special attention to Umklapp processes.

First of all, we shall show that relaxation in the phonon system takes place (when $T \ll \Theta$) mainly by phonon-electron (not phonon-phonon) collisions.

To estimate the phonon-electron collision integral (79.10), we note that at low temperatures $\omega \sim T$, $\epsilon - \mu \sim T$, and therefore $N_0 \sim n_0 \sim 1$, $\partial N_0 / \partial \omega \sim 1/T$. The integration over d^3p is taken over the volume of a layer with thickness $\sim T/v_F$ along the Fermi surface. Since k/p is small, the argument of the delta function can be expressed as

$$\epsilon(\mathbf{p}) - \epsilon(\mathbf{p} - \mathbf{k}) - \omega(\mathbf{k}) \approx \mathbf{k} \cdot \partial \epsilon / \partial \mathbf{p} - \omega \approx \mathbf{v}_F \cdot \mathbf{k} - \omega. \quad (82.1)$$

The delta function is removed by integration over the directions of $\mathbf{p}$ (or, equivalently, over those of v_F) for a given k , adding a factor $l/v_k k$ to the integrand. Lastly, w is estimated by means of (79.18). The result is

$$I_{\text{ph},e}(\chi) \sim -\chi (m^*/M)^{1/2} \sim -T (m^*/M)^{1/2} \delta n,$$

so that the effective collision frequency is

$$\nu_{\text{phe}} \sim T \sqrt{(m^*/M)} \quad (82.2)$$

The effective frequency of phonon-phonon collisions at low temperatures is, according to the estimate (69.15),

$$\nu_{\text{ph,ph}} \sim T \sqrt{(m^*/M)} (T/\Theta)^4 \ll \nu_{\text{ph},e} \quad (82.3)$$

and this proves the above statement.

We shall henceforward neglect phonon-phonon collisions. The phonon transport equation is then

$$\mathbf{u} \cdot \frac{\partial N_0}{\partial \mathbf{r}} = -\frac{\omega \partial N_0}{T \partial \omega} \mathbf{u} \cdot \nabla T = I_{\text{ph},e}(\chi, \varphi) \quad (82.4)$$

This equation can be solved explicitly for the phonon function χ . Since $\mathbf{k}$ in this equation is given, χ_k can be taken outside the integral, and we find

$$\chi_{\mathbf{k}} = -\frac{\omega}{T \nu_{\text{ph},e}} \mathbf{u} \cdot \nabla T + \frac{1}{\nu_{\text{ph},e}} \int w (n'_0 - n_0) \delta(\epsilon - \epsilon' - \omega) (\varphi - \varphi') \frac{2d^3 p}{(2\pi)^3} \equiv \chi_1 + \chi_2, \quad (82.5)$$

where

$$\nu_{\text{ph},e} = \int w (n'_0 - n_0) \delta(\epsilon - \epsilon' - \omega) \cdot 2d^3 p / (2\pi)^3 \quad (82.6)$$

It is easy to see that $\chi_2 \gg \chi_1$: from the definition of χ_2 , it follows that $\chi_2 \sim \varphi$ (the integrals in the numerator and denominator differ only by the factor $\varphi - \varphi'$ in the integrand), and the order of magnitude of φ is governed by the electron transport equation,

$$v \cdot \nabla T \partial n_0 / \partial T = I_{e,\text{ph}}(\varphi) \sim -\nu_{e,\text{ph}} \delta \tilde{n} \sim -\nu_{e,\text{ph}} \varphi / T,$$

whence

$$\varphi \sim v_F |\nabla T| / \nu_{e,\text{ph}}$$

The effective electron-phonon collision frequency is estimated in the same way as ν_{ph} , above, the only difference being that the integration over $d^3 k$ in I_{eph} is taken over a volume $\sim (T/u)^3$ in momentum space, instead of $\sim p_F^2 T / v_F$ in the integration over $d^3 p$ in $I_{\text{ph},e}$:

$$\nu_{e,\text{ph}} \sim T^3 / \Theta^2 \quad (82.7)$$

Finally, since $\chi_1 \sim |\nabla T| u / \nu_{\text{phe}}$, we have

$$\chi_1 / \chi_2 \sim u \nu_{e,\text{ph}} / v_F \nu_{\text{ph},e} \sim T^2 / \Theta^2 \ll 1, \quad (82.8)$$

as was to be proved.

In calculating the electrical and thermal conductivities (but not the thermoelectric coefficient;

see below) we can neglect the small quantity χ_1 . Substituting therefore $\chi \approx \chi_2$ from (82.5) in the linearized electron-phonon collision integral in the form (79.11), we find

$$I_{e,\text{ph}}(\varphi, \chi) = I_{e,\text{ph}}^{(g)}(\varphi) + I_{e,\text{ph},\ell}(\varphi), \quad (82.9)$$

where $I_{e,\text{ph},\ell}(\varphi)$ denotes the result of substituting χ_2 in the integral $I_{e,\text{ph}}^{(2)}(\chi)$. The first term in (82.9) is the collision integral for electrons and equilibrium phonons; the second term may be called the collision integral between electrons via phonons.

As in §79, we take as independent variables in the function $\varphi(p)$ the quantity $\eta = \epsilon - \mu$ and the vector $\mathbf{p}_F$ which has the direction of $\mathbf{p}$ and ends on the Fermi surface. Both terms in (82.9) have in their integrands the difference

$$\varphi(\eta, \mathbf{p}_F) - \varphi(\eta', \mathbf{p}'_F), \quad (82.10)$$

with

$$\eta - \eta' = \pm\omega, \quad \mathbf{p}_F - \mathbf{p}'_F = \boldsymbol{\kappa}$$

where $\boldsymbol{\kappa}$ is the projection of $\mathbf{k}$ on the tangent plane to the Fermi surface at the point $\mathbf{p}_F$.

With regard to the variable $\mathbf{p}_F$, the function $\varphi(\eta, \mathbf{p}_F)$ varies considerably over ranges $\sim p_F$; the difference $\kappa \sim k \ll p_F$. In this sense, φ varies slowly with $\mathbf{p}_F$, and in a first approximation we can take $\mathbf{p}'_F = \mathbf{p}_F$ in the difference (82.10), i.e. replace it by

$$\varphi(\eta, \mathbf{p}_F) - \varphi(\eta', \mathbf{p}_F) \quad (82.11)$$

The dependence on η , however, is strong, in the sense that $|\eta - \eta'| = \omega \sim T$ is of the same order of magnitude as the range over which φ varies considerably.

Let L_0 be the operator obtained from $I_{e,\text{ph}}$ (82.9) on replacing (82.10) by (82.11); then

$$I_{e,\text{ph}}(\varphi) = L_0(\varphi) + L_1(\varphi)$$

and $L_0 \gg L_1$. The electron transport equation (in the presence of both an electric field and a temperature gradient) is

$$-\left(e\mathbf{E} + \frac{\eta}{T}\nabla T\right) \cdot v \frac{\partial n_0}{\partial \epsilon} = L_0(\varphi) + L_1(\varphi) \quad (82.12)$$

The two terms on the right have quite different physical meanings: the first causes rapid energy relaxation, the second causes slow diffusive relaxation with respect to the direction of the quasi-momentum.

There are two obvious properties of the operator L_0 . First, it is zero for any function of $\mathbf{p}_F$ only, since the difference (82.11) is zero. Second, the integral

$$\int L_0(\varphi) d\eta = 0 \quad (82.13)$$

L_0 describes collisions in which only the energy changes, and (82.13) simply states the conservation of the number of electrons having a given direction of $\mathbf{p}$.

We shall seek the solution of the transport equation in the form

$$\varphi(\eta, \mathbf{p}_F) = a(\mathbf{p}_F) + b(\eta, \mathbf{p}_F) \quad (82.14)$$

where $a(\mathbf{p}_F)$ is a function of $\mathbf{p}_F$ only, and $|a| \gg |b|$. The fact that a (for which the part L_0 of the collision integral is zero) is large expresses the rapidity of the energy relaxation. Substituting (82.14) in (82.12) and neglecting the relatively small term $L_1(b)$, we find

$$-\left(e\mathbf{E} + \frac{\eta}{T}\nabla T\right) \cdot \mathbf{v} \frac{\partial n_0}{\partial \epsilon} = L_0(b) + L_1(a) \quad (82.15)$$

The two terms on the right are in general of the same order of magnitude. However, in the calculation of electrical or thermal conductivity, only one of these terms is important, as can be seen by means of the fact that the linearized electron-phonon operator $I_{\text{e,ph}}$ (and therefore L_0 and L_1) acting on the function $\varphi(\eta, p_F)$ does not change its parity with respect to $\eta^\dagger$. We therefore divide φ into

parts φ_g and φ_u even and odd with respect to η :

$$\varphi_g = a + b_g, \quad \varphi_u = b_u$$

(the function a independent of η is obviously even). Substitution of $\varphi = \varphi_g + \varphi_u$ in (82.15), followed by separation of the terms odd and even in η , gives two equations:

$$-\frac{\eta}{T} \frac{\partial n_0}{\partial \epsilon} \mathbf{v}_F \cdot \nabla T = L_0(b_u) \quad (82.16)$$

$$-\frac{\partial n_0}{\partial \epsilon} e\mathbf{E} \cdot \mathbf{v}_F = L_0(b_g) + L_1(a) \quad (82.17)$$

on the left-hand sides, the velocity $\mathbf{v}$ has been replaced, with sufficient accuracy, by the velocity $\mathbf{v}_F$ on the Fermi surface, which is independent of η . Integration of the second equation with respect to η gives

$$e\mathbf{E} \cdot \mathbf{v}_F = \int L_1(a) d\eta \quad (82.18)$$

since by (82.13) the L_0 term disappears.

The heat flux (for $\mathbf{E} = 0$) is entirely determined by the solution of equation (82.16), which contains only the operator L_0 : as we should expect, it depends on the electron energy relaxation processes. It is calculated from that solution as the integral

$$\mathbf{q}' = \int \mathbf{v} \eta \delta \tilde{n} \cdot 2d^3p / (2\pi)^3 \approx - \int \mathbf{v}_F \eta \frac{\partial n_0}{\partial \eta} b_u \frac{2d^3p}{(2\pi)^3} \quad (82.19)$$

the part of φ that is even in η makes no contribution, because the resulting integrand is an odd function.

The operator L_0 is the principal part of the electron-phonon collision integral. The corresponding effective collision frequency is therefore $\nu_{\text{e,ph}}$ from (82.7); more precisely, this quantity is the effective collision frequency as regards energy exchange. The corresponding electron mean free path is $l \sim v_F / \nu_{\text{e,ph}}$. The thermal conductivity can be estimated from the formula (7.10) in the kinetic theory of gases: $\kappa \sim c \bar{v} I N$. In the present case, N is the number density of electrons, c the electronic part of the specific heat (per conduction electron) and $\bar{v} \sim v_F$. The quantities N and v_F are independent of the temperature; the specific heat of an electron Fermi liquid is proportional to T , and from (82.7) the mean free path $l \propto T^{-3}$. Since the heat flux thus calculated refers to $\mathbf{E} = 0$, the coefficient in it is not the thermal conductivity κ itself but $\kappa' = \kappa + T\sigma\alpha^2$; see (78.3). Thus $\kappa' \propto T^{-2}$. The term $T\sigma\alpha^2$ is small in comparison with κ' (see the next-but-one footnote), and so $\kappa \propto T^{-2}$. Putting, for a rough estimate, $c \sim m^* p_F T / N \hbar^3$ in ordinary units (SP2, (I.15)), we find

$$\kappa \sim (\epsilon_F p_F / \hbar^2) \Theta^2 / T^2 \quad (82.20)$$

^{1†} This has been shown in §79 for $I_{\text{e,ph}}^{(1)}$. We shall not pause to give the exactly similar proof for $I_{\text{e,ph}}$ -

The electrical conductivity is obtained by solving the equation (82.18), which contains only the operator L_1 : as is to be expected, the electric current depends on the processes of relaxation with respect to directions of the electron quasimomentum. It has been noted at the beginning of § 81 that these processes are of the nature of diffusion along the Fermi surface. We shall show in § 83 how the transport equation (82.18) can in fact be put into the form of a diffusion equation. The temperature dependence of the electrical conductivity, however, can be ascertained from the following simple arguments.

The movement along the Fermi surface takes place in small jumps $k \sim T/u$; this acts as the "mean free path" l_p in momentum space, and the frequency of "scattering events" is the same as the electron-phonon collision frequency $\nu_{e,ph}$. The diffusion coefficient along the Fermi surface can be estimated by the formula $D \sim l\bar{v} \sim l^2\nu$ from the kinetic theory of gases, with l and ν replaced by l_p and $\nu_{e,ph}$. We thus have (in ordinary units)

$$D_p \sim (p_F^2 \Theta / \hbar) (T/\Theta)^5. \quad (82.21)$$

From this we can find the relaxation time which is to appear in the estimate of the electrical conductivity according to (78.16): $\sigma \sim e^2 N v_F \tau / p_F$. It is the time in which the electron quasimomentum changes by an amount of the order of itself. That is, in the time τ the electron must diffuse a distance $\sim p_F$ along the Fermi surface. In a diffusional motion, the mean square of the displacement is proportional to the time (and to the diffusion coefficient). We thus find $p_F^2 \sim D_p \tau$, and for the conductivity (in ordinary units)

$$\sigma \sim (he^2 N / m * \Theta) (\Theta/T)^5. \quad (82.22)$$

At low temperatures, therefore, the conductivity is proportional to T^{-5} .†

Let us now consider the thermoelectric coefficient. Here the position is similar to that at high temperatures. If the current j is calculated from the function b_u , the solution of (82.16), then, since this is an odd function of η , the integral is zero in the first approximation, and a non-zero result is obtained only when we include the next term in η/ϵ_F in the expansion of the integrand. As when $T \gg \Theta$, this gives the thermoelectric coefficient (in ordinary units)

$$\alpha^1 \sim T / \epsilon_F \quad (82.23)$$

instead of the "normal" order of magnitude $\alpha \sim 1/e$.‡

Another contribution to the thermoelectric coefficient arises from the term χ_1 , neglected in (82.5), in the phonon function χ : this contribution is due to the phonon drag acting on the electrons. If this term is retained, the collision integral (82.9)

contains a further term

$$I_{eph}^{(2)}(\chi_1) \sim \nu_{eph} \chi_1 \partial N_0 / \partial \omega \sim -\nu_{eph} u |\nabla T| / \nu_{ph,e} T, \quad (82.24)$$

which may then be taken to the left-hand side of the transport equation (82.12), where it is to be compared with the term

$$-\frac{\partial n_0}{\partial T} \frac{\eta}{T} v \cdot \nabla T. \quad (82.25)$$

The term (82.24) is small in comparison with (82.25), in the ratio T^2/Θ^2 ; the estimate is analogous to (82.8). The inclusion of it, however, gives a term proportional to ΓT in the solution φ of the transport equation, and this is not an odd function of η . Hence, in calculating

† This result was first derived by F. Bloch (1929).

‡ From the estimates (82.20) – (82.23) we see that $T\alpha^2\sigma/\kappa \sim (\Theta/\epsilon_F)^2 \ll 1$, and this justifies the approximation used in deriving (82.21).

the relevant contribution to the current, there is no further small factor, and the thermoelectric coefficient contains a term

$$\alpha^{11} \sim T^2/e\Theta^2 \quad (82.26)$$

(L. É. Gurevich, 1946). †

As the temperature decreases, so does the electron-phonon collision frequency, and ultimately the collisions between electrons and impurity atoms become predominant in causing the electrical and thermal resistance. Because of the different temperature dependence, the transition to "residual thermal resistance" takes place later than that to residual electrical resistance.

In very pure metals, there can exist a range of temperatures in which the transport properties of the metal are governed by collisions between electrons. The corresponding mean free path in the electron liquid in a metal, as in any Fermi liquid, varies with the temperature as T^{-2} , and the small expansion parameter is the ratio T/ϵ_F (see §75). When $T \sim \epsilon_F$, this mean free path must become $\sim d$, and so

$$l_{\text{eq}} \sim d(\epsilon_F/T)^2 \quad (82.27)$$

The temperature dependence of the electrical and thermal conductivities is then

$$\sigma \propto T^{-2}, \quad \kappa \propto T^{-1} \quad (82.28)$$

(L. D. Landau and I. Ya. Pomeranchuk 1936). When the temperature falls, the effective electron-electron collision frequency ν_{ee} decreases more slowly than the electron-phonon collision frequency $\nu_{e,ph}$. However, since the small parameter in ν_{ee}

is T/ϵ_F , and not T/Θ as in $\nu_{e,ph}$, electron-electron collisions can play a predominant role only at very low temperatures.

Note also that the laws (82.28) can in principle relate to cases with either open or closed Fermi surfaces. Since the electron quasi-momenta are large, the necessary existence of Umklapp processes does not in general give rise to any additional small factor for closed Fermi surfaces.

PROBLEM

Calculate the thermoelectric coefficient α for a metal with a closed Fermi surface at low temperatures, neglecting Umklapp processes.

SOLUTION. The electron transport equation is

$$-e\mathbf{E} \cdot \frac{\partial n_0}{\partial \mathbf{p}} - \frac{\epsilon - \mu}{T} \frac{\partial n_0}{\partial \epsilon} \mathbf{v} \cdot \nabla T = C_{\epsilon,ph}(n) \quad (1)$$

The phonon transport equation may be written

$$-\frac{\omega}{T} \frac{\partial N_0}{\partial \mathbf{k}} \cdot \nabla T = C_{\text{phe}}(N) \quad (2)$$

since

¹:Here, the following comment is necessary. Since the phonon quasi-momentum is small, the law of conservation of energy gives $\epsilon(\mathbf{p}) - \epsilon(\mathbf{p} - \mathbf{k}) \approx \mathbf{v}_F \cdot \mathbf{k} \approx \pm \omega(\mathbf{k})$, from which we see that the angle θ between $\mathbf{v}_r$ and $\mathbf{k}$ is almost $\frac{1}{2}\pi$: $\cos \theta \sim \omega/v_r k \sim u/v_r \ll 1$. In the isotropic case the quasi-momentum $\mathbf{k}$ and the velocity $\mathbf{u}$ of the phonon are in the same direction, and so the product u, v_i is also small. A similar product occurs in the integral which gives the current in terms of the function φ proportional to u ; this would cause, in the isotropic case, an additional small factor in α'' . In an anisotropic crystal, however, including those with cubic symmetry, there is in general no reason for such a small factor to occur.

$$\mathbf{u} \frac{\partial N_0}{\partial T} = -\frac{\omega}{T} \frac{\partial N_0}{\partial \omega} \mathbf{u} = -\frac{\omega}{T} \frac{\partial N_0}{\partial \mathbf{k}}$$

Multiplying equations (1) and (2) by p and k respectively, and integrating them over $2d^3p/(2\pi)^3$ and $d^3k/(2\pi)^3$ respectively, we add them term by term: the right-hand side is zero, by the conservation of the total quasi-momentum of electrons and phonons in the absence of Umklapp processes. The result is

$$\int e\mathbf{E} \cdot \frac{\partial n_0}{\partial \mathbf{p}} \frac{2d^3\mathbf{p}}{(2\pi)^3} + \frac{1}{3} \nabla T \int \frac{\epsilon - \mu}{T} \frac{\partial n_0}{\partial \epsilon} \mathbf{v} \cdot \mathbf{p} \frac{2d^3p}{(2\pi)^3} + \frac{1}{3} \nabla T \int \frac{\omega}{T} \left(\frac{\partial N_0}{\partial \mathbf{k}} \cdot \mathbf{k} \right) \frac{d^3k}{(2\pi)^3} = 0 \quad (3)$$

the second and third integrals are written on the assumption that the crystal has cubic symmetry.

The first integral in (3) is transformed as in the derivation of (81.4), and gives $-e\mathbf{E}(N_e - N_h)$. The second integral is calculated as in the derivation of (78.12), and is $-AT\nabla T$, where

$$A = \frac{\pi^2}{9} \left[\frac{\partial}{\partial \epsilon} \int v \cdot p \frac{dS}{v(2\pi)^3} \right]_{\epsilon=\epsilon_F};$$

the integral is taken over a surface of constant energy ϵ . The third integral, after integration by parts, becomes

$$-\frac{\nabla T}{3T} \int N_0(3\omega + \mathbf{k} \cdot \mathbf{u}) \frac{d^3k}{(2\pi)^3}$$

the integral over the faces of the reciprocal lattice cell is zero, because of the rapid decrease of N_0 with increasing ω at low temperatures. For long-wavelength acoustic phonons (the only ones that are important at low temperatures), the velocity $\mathbf{u}$ and the ratio $\mathbf{k} = \mathbf{k}/\omega$ depend only on the directions of $\mathbf{k}$, not on ω . Using for the integral with respect to ω the usual expression, we find that the third integral in (3) is $-BT^3\nabla T$, where

$$B = \frac{\pi^4}{15} \sum \int \left(1 + \frac{1}{3} \kappa \cdot \mathbf{u} \right) \kappa^2 \frac{dO_k}{(2\pi)^3}$$

and the summation is over the three acoustic branches of the phonon spectrum. Equation (3) thus becomes

$$-e\mathbf{E}(N_e - N_h) = \nabla T (AT + BT^3).$$

Comparison with (78.1) (for $\mathbf{j} = \mathbf{0}$) gives the thermoelectric coefficient

$$\alpha = (AT + BT^3) / (N_k - N_e) \quad (4)$$

The condition $j = 0$ can be met by means of a suitably chosen term of the form (81.1) in the solution of the transport equation. In accordance with the discussion in §81, the expression (4) is finite for an uncompensated metal, but becomes infinite when $N_r = N_k$.

17.10.6 §83. Electron diffusion on the Fermi surface

In this section we shall show how the transport equation (82.17) for the problem of electrical conduction at low temperatures can be reduced to a diffusion equation. [†] Having only this problem in mind, we shall consider only the part of the function φ that is independent of $\eta = \epsilon - \mu$, and denote it by $\varphi(p_F)$ instead of $a(p_F)$ as in §82. We shall again have in mind the case of open Fermi surfaces.

The function

$$\frac{\delta \tilde{n}}{(2\pi)^3} = -\frac{\partial n_0}{\partial \epsilon} \frac{\varphi}{(2\pi)^3}$$

is the non-equilibrium change in the electron distribution in momentum space. From this we can go to the distribution over the Fermi surface by writing the volume element d^3p as $d\epsilon dS/v$ (74.19), integrating over $d\epsilon = d\eta$, and approximately replacing the area element dS on the constant-energy surface, and the speed v , which depend on ϵ , by their values dS_F and v_F on the Fermi surface. The function φ is, by hypothesis, independent of ϵ , and the integration of the factor $-\partial n_0/\partial \epsilon$ gives unity. The distribution density on the Fermi surface is then

$$\varphi(\mathbf{p}_F)/(2\pi)^3 v_F \quad (83.1)$$

For clarity in the derivation, we first write the transport equation (82.17) with the partial derivative with respect to time on the left-hand side, as if the distribution were not stationary:

$$-\frac{\partial n_0}{\partial \epsilon} \frac{\partial \varphi}{\partial t} - e\mathbf{E} \cdot \mathbf{v}_F \frac{\partial n_0}{\partial \epsilon} = L_1(\varphi).$$

Here the term in L_0 is omitted which in any case disappears when the equation is integrated over $d\eta/v_F$:

$$\frac{\partial}{\partial t} \frac{\varphi}{v_F} - \int L_1(\varphi) \frac{d\eta}{v_F} = -e\mathbf{E} \cdot \mathbf{v}_F/v_F \quad (83.2)$$

The first term on the left is the rate of change of the electron density on the Fermi surface. This equation must have the form of a continuity equation, i.e. the second

term on the left must be the divergence of the electron flux s on the Fermi surface, and the electric field term on the right acts as the source or sink density. Here we are concerned with a two-dimensional divergence on a curved surface, but it may be conveniently written in three-dimensional terms:

$$-\int L_1(\varphi) d\eta/v_F = \{\nabla_{\mathbf{p}} - \mathbf{u}_F (\mathbf{u}_F \cdot \nabla_{\mathbf{p}})\} \cdot \mathbf{s} \quad (83.3)$$

where $\nabla_{\mathbf{p}}$ is the ordinary operator of differentiation with respect to Cartesian coordinates in $\mathbf{p}$ -space, and the operator in the braces is its projection on the tangent plane to the Fermi surface at any specified point ($\mathbf{n}_F$ being a unit vector along the normal).[†] The vector $\mathbf{s}(\mathbf{p}_F)$ is specified on the Fermi surface, but in (83.3) it is formally regarded as being specified in all space (though depending only on the direction of $\mathbf{p}_F$). The transport equation, in which we now omit the time derivative, becomes

$$\{\nabla_{\mathbf{p}} - \mathbf{u}_F (\mathbf{n}_F \cdot \nabla_{\mathbf{p}})\} \cdot \mathbf{s} = -e\mathbf{E} \cdot \mathbf{v}_F/v_F \quad (83.4)$$

The problem is to find the flux s in terms of φ .

We use Cartesian coordinates in $\mathbf{p}$ -space, with the origin on the Fermi surface at the point where $s(\mathbf{p}_F)$ is being calculated, and the z -axis along the normal there. By definition, the flux component s_x is the difference between the numbers of electrons per unit time crossing (as a result of collisions) a strip of unit width in the yz -plane from left to right (i.e. in the positive x -direction) and from right to left.

Let us consider the difference between the number of events in which a phonon with quasi-momentum k in a given range d^3k is emitted by an electron with quasi-momentum in a range

[†] The proof given below is that of R. N. Gurzhi and A. I. Kopeliovich (1971),

d^3p , and the number of inverse events in which such a phonon is absorbed. It is minus the first term in the integrand in (79.9):

$$d^3p \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{\partial N_0}{\partial \omega} w(n'_0 - n_0) \delta(\epsilon - \epsilon' - \omega_k) (\varphi_{\mathbf{p}^*} - \varphi_{\mathbf{p}} + \chi_k) \quad (83.5)$$

with $\mathbf{p} = \mathbf{p}' + \mathbf{k}$.[‡] The phonon function χ_k here is to be expressed in terms of φ by this operator appears in the two-dimensional analogue of Gauss's theorem,

$$\oint \mathbf{e} \cdot \mathbf{s} d\mathbf{l} = \int \{\nabla - n(\mathbf{n} \cdot \nabla)\} \cdot \mathbf{s} dS$$

The integral on the left is taken round a closed contour on the surface in question ($\mathbf{e}$ being a unit vector along the outward normal to the contour in the tangent plane to the surface at the point considered); the integral on the right is taken over the part of the surface that is enclosed by the contour.

[‡] In the foregoing arguments we have omitted a factor $(2\pi)^{-3}$ in the definition of the surface density (83.1). A corresponding factor is accordingly omitted from (83.5) also.

We have agreed, in the case of open Fermi surfaces, to include values of the electron quasimomentum throughout the reciprocal lattice (see §81); the law of conservation of quasi-momentum is therefore written without the $\mathbf{b}$ term.

(82.5):

$$\chi_k = -\frac{1}{\nu_{\text{ph},\ell}} \int w(n'_0 - n_0) \delta(\epsilon - \epsilon' - \omega_k) (\varphi_{\mathbf{p}'} - \varphi_{\mathbf{p}}) \frac{2d^3p}{(2\pi)^3} \quad (83.6)$$

with $\nu_{\text{ph},e}$ from (82.6).

If $k_x < 0$, the emission of the phonon will result in the passage through the strip (from left to right) of those electrons for which the x -component of the original quasi-momentum is in the range

$$k_x < p_x < 0; \quad (83.7a)$$

for such values of p , (83.5) gives a positive contribution to the flux s_x . If $k_x > 0$, the emission of the phonon results in the passage through the strip (from right to left) of electrons with

$$0 < p_x < k_x; \quad (83.7b)$$

the corresponding contribution to s_x is negative.

It is now clear that to find s_x we must (1) integrate the expression (83.5) over a unit range of p_y and over the whole range of p_z (because of the rapid convergence, the latter integration can be extended from $-\infty$ to $+\infty$); (2) integrate over the range (83.7) of p_x (in view of the slow variation of all quantities with p_x on the Fermi surface, this reduces simply to multiplication by the length of the range, i.e. by $-k_x$ when we take account of the sign of the result in s_x); (3) integrate over d^3k .

The flux component s_y differs from s_x only in that k_x is replaced by k_y in the integrand. The flux may therefore be written in the vector form

$$\mathbf{s}(\mathbf{p}_F) = - \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \int_{-x}^{\infty} \kappa \left\{ \frac{\partial N_0}{\partial \omega} w(n'_0 - n_0) \delta(\epsilon - \epsilon' - \omega) (\varphi_{\mathbf{p}'} - \varphi_{\mathbf{p}} + \chi_k) \right\} dp_z \quad (83.8)$$

where κ is the projection of $\mathbf{k}$ on the tangent plane at the point $\mathbf{p}_F$.

First of all, we write $d^3k = dk_z d^2\kappa$ and integrate with respect to k_z . Since $\mathbf{k}$ is small, we can transform the argument of the delta function in (83.8):

$$\delta(\epsilon_{\mathbf{p}} - \epsilon_{\mathbf{p}} - \omega_{\mathbf{k}}) \approx \delta(\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_F - \omega) = \frac{1}{v_F} \delta(k_z - \omega/v_F)$$

$\mathbf{v}_F$ is along the normal to the Fermi surface. The integration with respect to k_z removes the delta function and replaces k_z everywhere by ω/v_F . Since $\omega/v_F \sim ku/v_F \ll k$, we can put simply $k_z = 0$, i.e. make the change

$$k \rightarrow k. \quad (83.9)$$

The integration over $dp_z = d\epsilon/v_z$ can also be carried out in a general form, since the only rapidly varying function of ϵ in the integrand is the difference

$$n_0(\epsilon - \omega) - n_0(\epsilon) \approx -\omega \partial n_0 / \partial \epsilon;$$

the integration with respect to ϵ converts this factor into ω . The expression (83.8) now becomes

$$\mathbf{s}(\mathbf{p}_F) = -\frac{1}{2\pi v_F^2} \int \kappa \omega_\kappa \frac{\partial N_0(\omega_\kappa)}{\partial \omega_\kappa} w(\varphi_{p'} - \varphi_p + \chi_\kappa) \frac{d^2 \kappa}{(2\pi)^2}. \quad (83.10)$$

To transform the integral further, we again use the smallness of $\mathbf{k}$ to write

$$\varphi(\mathbf{p} - \mathbf{k}) - \varphi(\mathbf{p}) \approx -\mathbf{k} \cdot \partial \varphi / \partial \mathbf{p} \approx -\kappa \cdot \partial \varphi / \partial \mathbf{p} = -\kappa \mathbf{t} \cdot \partial \varphi / \partial \mathbf{p},$$

where $\mathbf{t} = \kappa/\kappa$ is a unit vector tangential to the Fermi surface, in the direction of κ . Since a similar difference occurs in the integral (83.6), we can put $\chi(\mathbf{k})$ in the form

$$\chi(\mathbf{k}) = \kappa \cdot \mathbf{a}(\mathbf{t}). \quad (83.11)$$

Lastly, from (79.4),

$$w = \kappa M(\mathbf{p}_F, \mathbf{t}). \quad (83.12)$$

With this notation,

$$\mathbf{s} = -\frac{1}{2\pi v_F^2} \int \mathbf{t} \kappa^3 \omega_\kappa \frac{\partial N_0}{\partial \omega_\kappa} M \left(\mathbf{t} \cdot \mathbf{a} - \mathbf{t} \cdot \frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{p}} \right) \frac{\kappa d\kappa d\phi}{(2\pi)^2} \quad (83.13)$$

where ϕ is the polar angle of directions of κ in the tangent plane.

The integration with respect to κ in (83.13) reduces to the calculation of the integral

$$J = \int_0^\infty \kappa^4 \omega_\kappa \frac{\partial N_0}{\partial \omega_\kappa} d\kappa$$

because of the rapid convergence, the integration may be extended to ∞ . The energy of a phonon with a small quasi-momentum $\kappa = \kappa t$ is $\omega_\kappa = u(t)\kappa$. Hence

$$\begin{aligned} J &= \frac{1}{u^5} \int_0^\infty \omega^5 \frac{\partial N_0}{\partial \omega} d\omega = -\frac{5}{u^5} \int_0^\infty N_0 \omega^4 d\omega = -\frac{5T^5}{u^5} \int_0^\infty \frac{x^4 dx}{e^x - 1} \\ &= -120\zeta(5)T^5/u^5 \end{aligned}$$

the value of the zeta function is $\zeta(5) = 1.037$.

We thus arrive at the following expression for the electron flux along the Fermi surface:

$$\mathbf{s} = -\frac{30\zeta(5)T^5}{\pi^2 v_F^2} \left\langle \frac{M(t)}{u^5(t)} t \left(t \cdot \frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{p}} - \mathbf{t} \cdot \mathbf{a} \right) \right\rangle, \quad (83.14)$$

where the angle brackets denote averaging over the directions of t in the tangent plane at a given point $\mathbf{p}_F$ on the Fermi surface. It remains for us to simplify as far as possible the expression for $\mathbf{a}$.

With the definition (83.11), we have from (83.6)

$$\mathbf{a} = \frac{\int M(n'_0 - n_0) \delta(\epsilon - \epsilon' - \omega) (\partial\varphi/\partial\mathbf{p}) d^3p}{\int M(n'_0 - n_0) \delta(\epsilon - \epsilon' - \omega) d^3p}$$

where common factors in the numerator and the denominator have been cancelled. The integration over d^3p is replaced by one over $dS_F d\epsilon/v_F$ (see the beginning of this section). Only the factor $n_0(\epsilon - \omega) - n_0(\epsilon)$, which is the same in both integrals, depends on ϵ ; the result of the integration over $d\epsilon$ cancels in the numerator and denominator. The argument of the delta function may then be written in the form $\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_F - \omega \approx \boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{v}_F$, quantities of relative order u/v_F being neglected. The final result is

$$\mathbf{a} = \frac{\int v_F^{-2} M \delta(\mathbf{u} \cdot \mathbf{t}) (\partial\varphi/\partial\mathbf{p}) dS_F}{\int v_F^{-2} M \delta(\mathbf{u} \cdot \mathbf{t}) dS_F} \quad (83.15)$$

M being a function of the position $\mathbf{p}_F$ on the Fermi surface and of the direction $\mathbf{t}$, and u being the unit vector along the normal. As a consequence of the presence of the delta functions, the integrals are in fact taken only along a curve on the Fermi surface where the normal is perpendicular to the direction t of the phonon quasi-momentum.

Formulae (83.4), (83.14) and (83.15) solve the problem of bringing the transport equation into the form of a diffusion equation. The result is an integro-differential equation. The flux (83.14) may be written as

$$s_\alpha = -D_{\alpha\beta} (\partial\varphi/\partial p_\beta - a_\beta), \quad (83.16)$$

where

$$D_{\alpha\beta} = T^5 \frac{30\zeta(5)}{\pi^2 v_F^2} \left\langle \frac{M(t)}{u^5(t)} t_\alpha t_\beta \right\rangle \quad (83.17)$$

and α, β are two-dimensional vector suffixes. The first term has the usual differential form with the diffusion coefficient tensor $D_{\alpha\beta}$; it relates to electron scattering by equilibrium phonons. The second, integral, term is due to electron drag by nonequilibrium phonons.

The current density is calculated from the functions φ as the integral

$$\mathbf{j} = -\frac{2e}{(2\pi)^3} \int \varphi \mathbf{u} dS_F$$

It is clear from (83.4), with s from (83.16) and (83.17), that φ (and therefore the conductivity of the metal) varies with temperature as T^{-5} , in accordance with the result in §82. Note that the electron drag by phonons goes not affect this law, though it does affect the form of the transport equation.

17.10.7 §84. Galvanomagnetic phenomena in strong fields. General theory

The characteristic dimensionless parameter governing the effect of a magnetic field on the electrical conductivity of a metal is the ratio $r_B l l$, where r_B is the Larmor electron orbit radius and l the mean free path.

It is known (SP 2, §57) that the motion of a conduction electron in a magnetic field is almost always quasi-classical, because the ratio $\hbar\omega_B/\epsilon_F$ (where ω_B is the Larmor frequency) is

very small. The trajectory in momentum space is then the circumference of a cross-section of a constant-energy surface $\epsilon(\mathbf{p}) = \text{constant}$ by a plane $p_z = \text{constant}$, the z -axis being parallel to the field. Since the energy of the electrons is close to the limiting energy ϵ_F , the constant-energy surfaces in question are close to the Fermi surface. Hence the size of the trajectory in momentum space is given by the linear dimension p_F of the appropriate cross-section of the Fermi surface. The size of the trajectory in ordinary space is

$$r_B \sim cp_F l e B,$$

and is inversely proportional to the magnetic field. In galvanomagnetic phenomena, therefore, fields are to be regarded as weak for which $r_B \gg l$, and as strong for which

$$r_B \leq l. \quad (84.1)$$

For weak magnetic fields, the transport treatment does not (for a general electron dispersion relation) lead to anything beyond the results of the purely phenomenological theory. The nature of the magnetic field dependence of the conductivity tensor components $\sigma_{\alpha\beta}$ in this case corresponds simply to an expansion in powers of B , taking account of the requirements imposed by the principle of symmetry of the kinetic coefficients (see ECM, §21).

In strong magnetic fields, however, the transport treatment is needed in order to find this dependence. The condition (84.1) for a strong field is in practice satisfied only at low temperatures, where the mean free path l is sufficiently long. The metal is then usually in the range of the residual resistance due to electron scattering by impurity atoms, and we shall have this case in mind. The interaction of the conduction electrons with an impurity atom takes place at distances of the order of the lattice constant d . If $r_B \ll l$ but $r_B \gg d$, the presence of the magnetic field does not affect this interaction, nor therefore the collision integral. Under these conditions, the magnetic field dependence of the conductivity tensor is not affected by the specific form of the collision integral. It does depend considerably, however, on the structure of the conduction electron energy spectrum, i.e. on the form of the Fermi surface. [†]

Let us now construct the transport equation describing galvanomagnetic phenomena.

The distribution function is here suitably expressed not in terms of the Cartesian components of the quasi-momentum $\mathbf{p}$ but in terms of other variables related to the electron trajectory: the energy ϵ , the quasi-momentum component p_z along the magnetic field (the z -axis) and the "time for the electron to move along the momentum trajectory" from some fixed point to the point in question. This latter variable, which we denote by τ , is brought in by means of the quasi-classical equation of motion of a conduction electron in a magnetic field,

$$d\mathbf{p}/d\tau = -e\mathbf{v} \times \mathbf{B}/c, \quad \mathbf{v} = \partial\epsilon/\partial\mathbf{p};$$

the x - and y -components of this are

$$dp_x/d\tau = -ev_y B/c, \quad dp_y/d\tau = ev_x B/c \quad (84.2)$$

Taking the sum of the squares of these equations and using the element of length ds on the momentum trajectory in the xy -plane ($ds^2 = dp_x^2 + dp_y^2$), we obtain

$$d\tau = (c/eB)ds/v_{\perp}, \quad v_{\perp}^2 = v_x^2 + v_y^2 \quad (84.3)$$

integration of this equation gives the new variable τ in terms of the old variables p_x, p_y, p_z .

The left-hand side of the transport equation [†] is, in the new variables,

^{††} The theory given below is due to I. M. Lifshitz, M. Ya. Azbel' and M. I. Kaganov (1956).

$$\frac{dn}{dt} = \frac{\partial n}{\partial \epsilon} \dot{\epsilon} + \frac{\partial n}{\partial p_z} \dot{p}_z + \frac{\partial n}{\partial \tau} \dot{\tau}. \quad (84.4)$$

The distribution function will, as usual, be sought in the form

$$n = n_0(\epsilon) + \delta \tilde{n}(\epsilon, p_z, \tau) \quad (84.5)$$

It has been shown at the end of §74 that, in static electric and magnetic fields, the transport equation, linearized with respect to $\delta \tilde{n}$, for quasi-particles in a Fermi liquid has the same form as for particles in a Fermi gas. The derivatives $\dot{\epsilon}$, $\dot{p}_z$ and $\dot{\tau}$ are to be expressed by means of the equation of motion of an individual electron in an electromagnetic field:

$$\dot{\mathbf{p}} = -e\mathbf{E} - e\mathbf{v} \times \mathbf{B}/c. \quad (84.6)$$

Hence we have

$$\dot{\epsilon} = (\partial \epsilon / \partial \mathbf{p}) \cdot \dot{\mathbf{p}} = -e\mathbf{v} \cdot \mathbf{E};$$

the magnetic field does not appear, since it does no work on the charge. For a field $\mathbf{B}$ in the z -direction we have $\dot{p}_z = -eE_z$. Lastly, a comparison of (84.2) and (84.6) shows that the derivative $d\tau/dt$ differs from unity only because of the field $\mathbf{E}$; and this difference need not be taken into account.

Since the equilibrium distribution function n_0 depends only on ϵ , and ϵ, p_z and τ are independent variables, we have $\partial n_0 / \partial p_z = 0, \partial n_0 / \partial \tau = 0$. The electric field is regarded as being extremely weak, and in linearizing the transport equation the terms which contain both the small quantities $\delta \tilde{n}$ and $\mathbf{E}$ are to be omitted. The expression (84.4) then reduces to

$$\frac{dn}{dt} \approx -\frac{\partial n_0}{\partial \epsilon} e\mathbf{v} \cdot \mathbf{E} + \frac{\partial \delta \tilde{n}}{\partial t}.$$

We write

$$\delta \tilde{n} = (\partial n_0 / \partial \epsilon) e\mathbf{E} \cdot \mathbf{g}, \quad \mathbf{g} = \mathbf{g}(\epsilon, p_z, \tau) \quad (84.7)$$

cf. (78.6). The left-hand side of the transport equation then becomes finally

$$\frac{dn}{dt} = \frac{\partial n_0}{\partial \epsilon} e\mathbf{E} \cdot \left(-\mathbf{v} + \frac{\partial \mathbf{g}}{\partial \tau} \right) \quad (84.8)$$

The collision integral on the right of the transport equation, after linearization, is written in the form

$$C(n) = (\partial n_0 / \partial \epsilon) e\mathbf{E} \cdot I(\mathbf{g}); \quad (84.9)$$

in the collision integral for elastic scattering by impurity atoms, any factor in $\delta \tilde{n}$ that depends only on ϵ can be taken outside the integral. The specific form of the linear integral operator $I(\mathbf{g})$ need not be stated.

Equating (84.8) and (84.9), we have finally the transport equation determining the function $\mathbf{g}$:

$$\partial \mathbf{g} / \partial \tau - I(\mathbf{g}) = \mathbf{v} \quad (84.10)$$

The conductivity tensor is given by the integral (78.9):

¹† The use of the quast-classical transport equation implies the neglect of effects due to quantization of energy levels in the magnetic field. These will be discussed in §90.

$$\sigma_{\alpha\beta} = -e^2 \int \frac{\partial n_0}{\partial \epsilon} v_\alpha g_\beta \frac{2d^3p}{(2\pi\hbar)^3}$$

In this integral, the change to the new variables is made by the substitution $d^3p \rightarrow |J|d\epsilon dp_z d\tau$, where

$$J = \partial(p_x, p_y, p_z) / \partial(\tau, \epsilon, p_z)$$

is the Jacobian of the transformation, which is easily found directly from the equations (84.2) which define the variable τ . Writing both sides of the first equation (84.2), for instance, as Jacobians,

$$\frac{\partial(p_{xz}\epsilon, p_z)}{\partial(\tau, \epsilon, p_z)} = -\frac{eB}{c} \frac{\partial(\epsilon, p_x, p_z)}{\partial(p_y, p_x, p_z)}$$

and multiplying both sides by $\partial(p_y, p_x, p_z) / \partial(\epsilon, p_x, p_z)$, we find $|J| = eB/c$. Neglecting the thermal blurring of the distribution n_0 , we put as usual $\partial n_0 / \partial \epsilon = -\delta(\epsilon - \epsilon_F)$, obtaining as the final expression

$$\sigma_{c\beta} = \frac{2e^3 B}{c(2\pi\hbar)^3} \int v_\alpha g_\beta d\tau dp_z \quad (84.11)$$

the integration being taken over the Fermi surface.

According to the definition (84.3), τ is proportional to $1/B$. The term $\partial g / \partial \tau$ in the linear equation (84.10) is therefore proportional to B , and is thus large compared with the other terms. This makes it possible to solve the equation by successive approximation as a series in powers of $1/B$:

$$g = g^{(0)} + g^{(1)} + \dots \quad (84.12)$$

where $\mathbf{g}^{(n)} \propto B^{-n}$.† The terms in this series satisfy the equations

$$\left. \begin{aligned} \partial g^{(0)} / \partial \tau &= 0 \\ \partial g^{(1)} / \partial \tau &= I(g^{(0)}) + v \\ \partial g^{(2)} / \partial \tau &= I(g^{(1)}), \dots \end{aligned} \right\} \quad (84.13)$$

The solution of these equations is

$$\left. \begin{aligned} g^{(0)} &= C^{(0)} \\ g^{(1)} &= \int_0^\tau [I(C^{(0)}) + v(\tau)] d\tau + C^{(1)} \\ g^{(2)} &= \int_0^\tau I(g^{(1)}) d\tau + C^{(2)}, \dots \end{aligned} \right\} \quad (84.14)$$

where $\mathbf{C}^{(0)}, \mathbf{C}^{(1)}, \dots$ are functions of ϵ and p_z only.

The function g must satisfy certain conditions. If the electron momentum trajectories (i.e. the perimeters of cross-sections of the Fermi surface by planes $p_x = \text{constant}$) are closed, the motion of the electrons is periodic; accordingly, the function $g(\epsilon, p_z, \tau)$ must be periodic in τ (the period T depending on p_z). If the trajectory is open, however, the motion in momentum space is infinite and g need only satisfy the condition of being finite.

Let us now average equations (84.13) with respect to τ . If the functions $\mathbf{g}$ are

† As in § 59 when calculating the transport coefficients of a plasma in a strong magnetic field. periodic, the mean value over the period,

$$\frac{\overrightarrow{\partial g}}{\partial \tau} = \frac{1}{T} \int_0^T \frac{\partial g}{\partial \tau} d\tau = \frac{g(T) - g(0)}{T}$$

is zero, since $g(T) = g(0)$. If they are not periodic, the averaging is over an infinite range of τ . and the mean value is zero since g is finite. In all cases, therefore, averaging the equations gives

$$\overline{I(g^{(0)})} \equiv \overline{I(C^{(0)})} = -\bar{v}, \quad \overline{I(g^{(1)})} = 0, \dots; \quad (84.15)$$

these relations determine in principle the functions $\mathbf{C}^{(0)}, \mathbf{C}^{(1)}, \dots$

In going on to calculate the conductivity tensor, let us first recall some general properties of it which follow from the phenomenological theory (ECM, §21).

The principle of the symmetry of the kinetic coefficients gives

$$\sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{B}) = \sigma_{\mathcal{F}\mu}(-\mathbf{B}). \quad (84.16)$$

The tensor $\sigma_{\alpha\beta}$ may be separated into symmetric and antisymmetric parts:

$$\sigma_{\alpha\beta} = \sigma_{\alpha\beta}^{(s)} + \sigma_{\alpha\beta}^{(a)} \quad (84.17)$$

For these we have, with (84.16),

$$\left. \begin{aligned} \sigma_{u\beta}^{(s)}(\mathbf{B}) &= \sigma_{\beta\alpha}^{(s)}(\mathbf{B}) = \sigma_{\alpha\beta}^{(s)}(-\mathbf{B}), \\ \sigma_{u\beta}^{(a)}(\mathbf{B}) &= -\sigma_{\beta\alpha}^{(a)}(\mathbf{B}) = -\sigma_{\alpha\beta}^{(a)}(-\mathbf{B}). \end{aligned} \right\} \quad (84.18)$$

The components $\sigma_{\alpha\beta}^{(s)}$ and $\sigma_{\alpha\beta}^{(a)}$ are therefore even and odd functions of $\mathbf{B}$ respectively. Instead of the antisymmetric tensor $\sigma_{\alpha\beta}^{(a)}$, we can use its dual axial vector $\mathbf{a}$, defined by

$$a_{xy} = a_z, \quad a_{zx} = a_y, \quad a_{yz} = a_x.$$

The components of the current density vector are then

$$\dot{j}_\alpha = \sigma_{\alpha\beta} E_\beta = \sigma_{\alpha\beta}^{(s)} E_\beta + (\mathbf{E} \times \mathbf{a})_\alpha \quad (84.19)$$

The dissipation of energy when the current flows is determined only by the symmetric part of the conductivity tensor: $\mathbf{j} \cdot \mathbf{E} = \sigma_{\alpha\beta}^{(s)} E_\alpha E_\beta$. The inverse tensor $\rho_{\alpha\beta} = \sigma_{\alpha\beta}^{-1}$ can thus also be separated into symmetric and antisymmetric parts, the latter having a dual axial vector $\mathbf{b}$. Then $\mathbf{E}$ is expressed in terms of $\mathbf{j}$ by

$$E_\alpha = \rho_{\alpha\beta}^{(s)} j_\beta + (\mathbf{j} \times \mathbf{b})_\alpha \quad (84.20)$$

The terms $\mathbf{E} \times \mathbf{a}$ in the current and $\mathbf{j} \times \mathbf{b}$ in the field represent the Hall effect.

§85. Galvauomaguetic pheuomeua iu stroug fields. Particular cases

Closed trajectories

Let us begin with cases where all the momentum trajectories of electrons (i.e. for all p_z) with a given direction of $\mathbf{B}$ are closed. This is true for any direction of $\mathbf{B}$ if the Fermi surfaces are closed. With open Fermi surfaces, cases can occur where the trajectories are closed for any direction of $\mathbf{B}$, and where the cross-sections are closed only for certain directions (or certain ranges of directions) of the field.

In movement in a closed trajectory (in the xy -plane), the mean values of the velocities in the plane are zero: $\overline{v_x} = \overline{v_y} = 0$, as is clear from the equations of motion (84.2) with allowance for the fact that p_x and p_y return to their initial values after a traversal of the whole trajectory. The value of $\overline{v_x}$ is always non-zero, because the motion in the direction of the field is infinite. The first equation (84.15) now gives

$$\overline{I(C_x^{(0)})} = \overline{I(C_y^{(0)})} = 0,$$

whence $C_x^{(0)} = C_y^{(0)} = 0$.[†] The solution (84.14) then becomes

$$\left. \begin{aligned} g_x &= (c/eB)p_y + C_x^{(1)} + g_x^{(2)} + \dots \\ g_y &= -(c/eB)p_x + C_y^{(1)} + g_y^{(2)} + \dots \\ g_z &= C_z^{(0)} + g_z^{(1)} + \dots \end{aligned} \right\} \quad (85.1)$$

the integration of $v(\tau)$ is carried out by means of equations (84.2).

The components of the stress tensor are calculated from equation (84.11). For example,

$$\sigma_{xx} = \frac{2e^2}{(2\pi\hbar)^3} \int \oint \frac{dp_y}{d\tau} \left[\frac{c}{eB}p_y + C_x^{(1)} + g_x^{(2)} \right] d\tau dp_z$$

with v_x again given by (84.2). Since $C_x^{(1)}$ is independent of τ , the integration with respect to τ in the first two terms amounts to that of the derivatives $dp_y^2/d\tau$ and $dp_x/d\tau$, and gives zero. Thus the only contribution to the integral comes from the $g_x^{(2)}$ term, so that $\sigma_{xx} \propto B^2$.

Next we calculate

$$\sigma_{xx} = \frac{2e^2}{(2\pi\hbar)^3} \int \oint \frac{dp_y}{d\tau} \left[-\frac{c}{eB}p_x + C_y^{(1)} \right] d\tau dp_x$$

Integration of the second term again gives zero, and in the first term

$$\oint p_x \frac{dp_y}{d\tau} d\tau = \int p_x dp_y = \pm S(p_z)$$

where $S(p_z)$ is the area of the cross-section of the Fermi surface by the plane $p_z = \text{constant}$. The plus and minus signs relate to cases where the perimeter encloses a region of smaller and larger energies respectively, i.e. the closed trajectory is an electron and a hole trajectory respectively (see SP 2, §61); we denote the area S by S_e and S_h in these two cases. The difference in sign is due to a change in the direction of traversal of the trajectory. The integration of S with respect to p_z gives the volume Ω in momentum space within the Fermi surface; if the closed trajectories are on an open Fermi surface, then Ω is the volume between that surface and the faces of the reciprocal lattice cell. Thus

$$\sigma_{xy} = \frac{ec}{B} \frac{2(\Omega_h - \Omega_e)}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{ec}{B} (N_h - N_e), \quad (85.2)$$

where Ω_e and Ω_h are the volumes of the electron and hole cavities of the Fermi surface. The quantities

$$N_e = 2\Omega_e/(2\pi\hbar)^3, \quad N_h = 2\Omega_h/(2\pi\hbar)^3$$

are respectively the numbers of electron-occupied states with energies $\epsilon < \epsilon_F$ and free states with $\epsilon > \epsilon_F$, per unit volume of the crystal. For closed Fermi surfaces these concepts have a quite definite meaning; N_e and N_h are characteristics of the electronic spectrum of the metal and independent of the direction of the field $\mathbf{B}$. For open surfaces, their meaning becomes more conventional, as they may depend on the direction of $\mathbf{B}$.

The expression (85.2) is an odd function of $\mathbf{B}$ and therefore belongs to the antisymmetric part of the tensor $\sigma_{\alpha\beta}$.[†] The component $\sigma_{xy}^{(s)}$ of the symmetric part is given by the next term in the expansion of σ_{xy} , which is proportional to B^{-2} .

[†] There is no reason why the linear homogeneous equation $\overline{I(C)} = 0$ should have any solution other than the trivial $C = 0$.

The dependence on B of the remaining components $\sigma_{\alpha\beta}$ is found similarly. For example,

$$\sigma_{zz} = \frac{2e^3 B}{(2\pi\hbar)^3 c} \int \oint v_z C_z^{(0)} d\tau dp_z$$

The integration with respect to τ brings in a factor B^{-1} , and $C_z^{(0)}$ is independent of B ; hence σ_{zz} also is independent of B .

The result is

$$\sigma_{22}^{(s)} = \text{constant}, \quad \text{other } \sigma_{a\beta}^{(s)} \propto B^{-2}, \quad a \propto B^{-1} \quad (85.3)$$

All components $\sigma_{\alpha\beta}^{(s)}$ and a depend on the form of the collision integral, except

$$a_z = (ec/B) (N_h - N_e)$$

All the $\sigma_{\alpha\beta}$ except σ_{zz} tend to zero as $B \rightarrow \infty$. The physical reason for this behaviour is the localization of electrons on orbits small compared with the mean free path; σ_{zz} is finite because the motion of electrons along the magnetic field always remains infinite.

The small parameter in the expansion is the ratio r_B/l . Hence the components $\sigma_{a\beta}^{(s)}$ that are proportional to B^{-2} may be estimated in order of magnitude as

$$\sigma^{(s)} \sim \sigma_0 (r_B/l)^2, \quad \sigma_0 \sim Ne^2 l / p_F$$

Note that $\sigma^{(s)} \propto 1/l$; this means that, as the mean free path increases, the transverse conductivity in the magnetic field tends to zero, not to infinity as when the field is absent.

The components of the antisymmetric part of the tensor $\sigma_{\alpha\beta}$ are estimated as

$$\sigma^{(a)} \sim \sigma_0 r_B / l \sim ecN / B$$

It must be emphasized, however, that the fact that this estimate is independent of l does not mean that the exact values of the $\sigma_{a\beta}^{(a)}$ (apart from $\sigma_{xy}^{(a)}$) are independent of the specific form of the collision integral; an exact calculation of the tensor $\sigma_{\alpha\beta}$ would require a complete determination of the functions $\mathbf{C}^{(1)}$ and $\mathbf{g}^{(2)}$ by solving the specific transport equation.

From (85.3) we can find also the limiting dependences on B for the components of the inverse tensor $\rho_{\alpha\beta} = \sigma_{\alpha\beta}^{-1} \cdot \dagger$. Retaining only the terms of the lowest order in $1/B$, we find

$$\rho_{\alpha\beta}^{(s)} = \text{constant}, \quad b_x, b_y = \text{constant}, \quad b_z \propto B \quad (85.4)$$

and all these quantities depend on the form of the collision integral, except for

$$b_z \approx -1/a_z = B/ec (N_e - N_h) \quad (85.5)$$

All the components $\rho_{\alpha\beta}^{(s)}$ tend to constant limits as $B \rightarrow \infty$.

Compensated metals, in which $N_e = N_h$, need special treatment. The expression (85.2) is then zero, and the expansion of $\sigma_{xy}^{(a)}$ begins with the term proportional to B^{-3} . In this case, therefore,

$$a_x, \quad a_y \propto B^{-1}, \quad a_z \propto B^{-3} \quad (85.6)$$

$\dagger$ The inverse tensor must, of course, be calculated from $\sigma_{\alpha\beta} = \sigma_{\alpha\beta}^{(s)} + \sigma_{\alpha\beta}^{(a)}$, and only then be separated into symmetric and antisymmetric parts. We thus find

¹It is clear from the derivation of the transport equation that B appears in it not as the magnitude of the vector $\mathbf{B}$ but as the component $\mathbf{B}_z = \mathbf{B}$. The change $\mathbf{B} \rightarrow -\mathbf{B}$ therefore requires also $B \rightarrow -B$ in the formulae given.

$$\rho_{\alpha\beta}^{(s)} = \frac{1}{\sigma} \left\{ \sigma_{\alpha\beta}^{(s)-1} \sigma^{(s)} + a_{\alpha} a_{\beta} \right\}, \quad b_{\sigma} = -\frac{1}{\sigma} \sigma_{\alpha\beta}^{(s)} a_{\beta\gamma}$$

where $\sigma = \sigma^{(s)} + \sigma_{\alpha\beta}^{(s)} a_{\alpha} a_{\beta}$ is the determinant of $\sigma_{\alpha\beta}$ and $\sigma^{(s)}$ is the determinant of its symmetric part; see ECM, §21, Problem.

the dependence of $\sigma_{\alpha\beta}^{(r)}$ on B is as before. For the inverse tensor, we now have

$$\left. \begin{aligned} \rho_{zz}^{(s)} &= \text{constant}, \quad \rho_{yz}^{(s)}, \rho_{xz}^{(s)} = \text{constant}, \\ \rho_{xy}^{(s)}, \rho_{xx}^{(s)}, \rho_{yy}^{(s)} &\propto B^2, b \propto B. \end{aligned} \right\} \quad (85.7)$$

Open trajectories

For metals with open Fermi surfaces, which allow open trajectories, several cases are possible; we shall here consider only one of these, which illustrates the characteristic features of the situation.

Let us take a Fermi surface of the corrugated-cylinder type, passing continuously from one reciprocal lattice cell to the next (Fig. 30). If the magnetic field is not perpendicular to the cylinder axis, all cross-sections are closed, and the asymptotic dependence of $\sigma_{\alpha\beta}$ on $\mathbf{B}$ is again given by (85.3).

If, however, the magnetic field is perpendicular to the cylinder axis, there are open cross-sections. As usual, we take the z -axis parallel to the field and the x -axis here parallel to the cylinder axis; Fig. 31 shows a cut across the part of the Fermi surface in one cell. The trajectories are open when $|p_2| < |p_1|$, and are infinite in the direction of the p_x -axis. The mean velocity values are

$$\overline{v_x} = (c/eB) \overline{dp_y/d\tau} = 0, \quad \overline{v_y} = -(c/eB) \overline{dp_x/d\tau} \neq 0$$

since p_x varies without limit; as always, $\overline{v_z} \neq 0$. The non-zero components of $\mathbf{C}^{(0)}$ in the solution of the transport equation are now $C_y^{(0)}$ and $C_z^{(0)}$; in (85.1), the second line is therefore replaced by

$$g_y = C_y^{(0)} + g_y^{(1)} + \dots$$

In the same manner as above, we now find

$$\sigma_{xx}^{(s)} \propto B^{-1} \quad \text{other } \sigma_{\alpha\beta}^{(s)} \text{ constant}, \quad a_x \propto B^{-3}, \quad a_y, a_z \propto B^{-1}, \quad (85.8)$$

Hence, for the inverse tensor,

$$\rho_{\Lambda x}^{(s)} \propto B^2, \quad \text{other } \rho_{\alpha\beta}^{(s)} \text{ constant}, \quad b_x \propto B^{-1}, \quad b_y, b_z \propto B. \quad (85.9)$$

Thus there is a sharp anisotropy of the resistance in the plane perpendicular to the magnetic field: the resistance ρ_{yy} along the y -axis tends to a constant, whereas that along the x -axis increases as the square of the field. †

Another feature of the galvanomagnetic properties of metals with an open Fermi surface is their considerable dependence on the direction of a strong magnetic field. Here the change takes place as the direction of $\mathbf{B}$ approaches the plane perpendicular to the cylinder axis, and the relations (85.3) and (85.4) are replaced by (85.8) and (85.9). When $\mathbf{B}$ is at a small angle θ to that plane (Fig. 30), the momentum trajectory of the electron becomes large, with dimensions of the order of p_i/θ , where p_F is the transverse dimension of the cylindrical Fermi surface. Accordingly, the trajectories in actual space also become large, with dimensions of the order of r_B/θ , where r_B is the Larmor radius corresponding to the momentum p_r . For angles such that

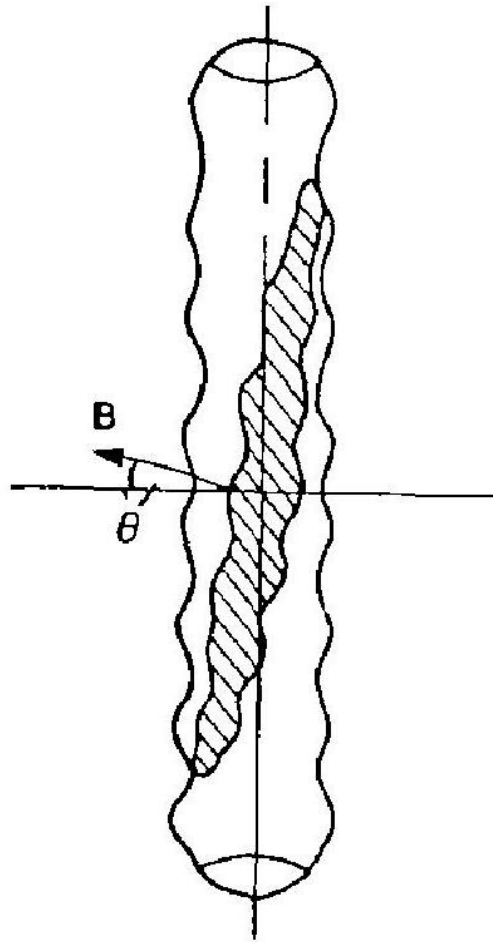


Fig. 30.

$r_B/\theta l \sim 1$, the expansion in powers of r_D/l used above becomes inapplicable, and it is in this range of angles that the field dependence of the resistance changes.

The whole of this discussion has related, of course, to single crystals." In polycrystalline materials there is an averaging of the anisotropic galvanomagnetic properties, depending on the directional distribution of the crystallites.

The thermomagnetic phenomena in a metal in a strong magnetic field could be discussed similarly. In particular, the components of the electronic thermal conductivity tensor would be found to tend to zero as $B \rightarrow \infty$. Under these conditions, the transfer of heat by phonons becomes important, it is necessary to take account of the electron-phonon interaction, and the whole situation is greatly complicated.

17.10.8 §86. Anomalous skin effect

It is known from macroscopic electrodynamics that an alternating electromagnetic field is damped within a conductor, and not only the field but also the resulting electric current is concentrated near the surface of the conductor. This is called the skin effect. The following formulae have been given in ECM, §§45 and 46.

The quasi-steady electromagnetic field in the metal satisfies Maxwell's equations

^{1*}The electron trajectory in the xy -plane of actual space differs from that in the $p_x p_y$ -plane of momentum space only in scale and in a rotation through 90° (SP 2,857). In the present case, therefore, the motion of the electron in actual space is infinite in the y -direction.

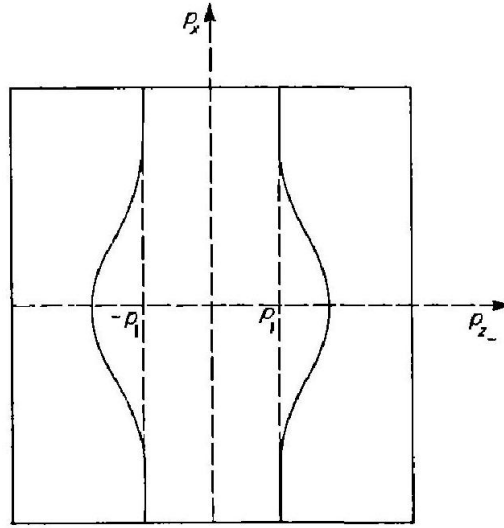


Fig. 31.

$$\text{curl } \mathbf{E} = -(1/c)\partial\mathbf{B}/\partial t \quad (86.1)$$

$$\text{curl } \mathbf{B} = 4\pi\mathbf{j}/c, \quad \text{div } \mathbf{B} = 0; \quad (86.2)$$

the metal is assumed non-magnetic, so that $\mathbf{H} = \mathbf{B}$ in it. Here, of course, we assume that the general condition for validity of the macroscopic equations is satisfied: the distances δ over which the field varies significantly are large in comparison with atomic dimensions. If moreover these distances are large in comparison with the conduction electron mean free path l , then the relation between the current density $\mathbf{j}$ and the field $\mathbf{E}$ is given by linear expressions connecting their values at one point in space: $j_\alpha = \sigma_{\alpha\beta}E_\beta$, where $\sigma_{\alpha\beta}$ is the conductivity tensor. The skin effect is then said to be normal. In discussing this case, we shall assume the medium isotropic, or else a crystal with cubic symmetry; the tensor $\sigma_{\alpha\beta}$ then reduces to a scalar, and $\mathbf{j} = \sigma\mathbf{E}$.

Let us take a simple geometry in which the metal occupies the half-space $x > 0$ bounded by the plane $x = 0$. A uniform external electric field is applied, parallel to the surface of the metal and varying in time with frequency ω . Equations (86.1) and (86.2) become

$$\text{curl } \mathbf{E} = i\omega\mathbf{B}/c, \quad \text{curl } \mathbf{B} = 4\pi\sigma\mathbf{E}/c, \quad \text{div } \mathbf{B} = 0. \quad (86.3)$$

The symmetry of the problem shows that the distributions of all quantities in the metal are functions of the coordinate x only. The first equation (86.3) then shows that the magnetic field $\mathbf{B}$ is everywhere parallel to the boundary plane. We can satisfy all the equations by supposing that the electric field $\mathbf{E}$ is everywhere in that plane also. This also fulfils automatically the necessary boundary condition that the current component normal to the surface of the metal is zero: from $E_x = 0$, it follows that $j_x = 0$ everywhere [†]

Eliminating $\mathbf{B}$ from the first two equations (86.3), we find

$$\text{curl curl } \mathbf{E} = \text{grad div } \mathbf{E} - \Delta\mathbf{E} = 4\pi i\omega\sigma\mathbf{E}/c^2$$

For the tangential field, which depends only on x , $\text{div } \mathbf{E} = 0$, and this equation becomes

$$\mathbf{E}'' = -4\pi i\omega\sigma\mathbf{E}/c^2 \quad (86.4)$$

[†] The situation is different in an anisotropic medium. To satisfy this condition there, an electric field normal to the surface would have to be present, as well as the tangential one.

the prime denoting differentiation with respect to x . The solution which tends to zero as $x \rightarrow \infty$ is

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 e^{-i\omega t} e^{-(1-i)\sqrt{\omega/8\pi\sigma} x}, \quad (86.5)$$

where E_0 is the field amplitude at the surface of the metal, and

$$\delta = c/\sqrt{2\pi\sigma\omega} \quad (86.6)$$

The quantity δ is called the field penetration depth; it decreases with increasing frequency of the field. The magnetic field in the metal decreases according to the same law; it follows from (86.3) that $\mathbf{E}$ and $\mathbf{B}$ are everywhere related by $\mathbf{E} = \zeta \mathbf{B} \times \mathbf{n}$, where $\mathbf{n}$ is a unit vector normal to the surface and into the metal, i.e. in the positive x -direction, with

$$\zeta = (1-i)\omega\delta/2c = (1-i)\sqrt{\omega/8\pi\sigma} \quad (86.7)$$

In particular, this relation exists between the values of the fields at the surface of the metal:

$$\mathbf{E}_0 = \zeta \mathbf{B}_0 \times \mathbf{n}. \quad (86.8)$$

The quantity ζ is called the surface impedance of the metal. Its real part governs the field energy dissipation in the metal (ECM, §67).

In order that the relation $\mathbf{j} = \sigma \mathbf{E}$ should hold between the current and the field at the same point and the same time, the electron mean free path l and mean free time $\tau \sim l/v_F$ must satisfy the conditions $l \ll \delta$ and $\tau\omega \ll 1$, i.e. l must be small in comparison with the characteristic distance δ over which the field varies, and τ small in comparison with the field period. When the first of these conditions is not satisfied, the relation between the field and the current is no longer local and there is a spatial dispersion of the conductivity. When the second condition is not satisfied, there is a frequency dispersion of the conductivity. The transport equation is then needed to determine the relation between the current and the field.

The nature of the skin effect thus depends on the relative magnitude of the three characteristic dimensions δ , l , and v_F/ω . The normal skin effect described by (86.5)-(86.8) corresponds to the lowest range of frequencies, such that

$$l \leq \delta, \quad l \leq v_F/\omega. \quad (86.9)$$

As the field frequency increases, or the mean free path increases (with decreasing temperature of the metal), the penetration depth decreases. In metals, the condition $l \ll \delta$ is usually the first to be violated, and the current-field relation becomes non-local; the skin effect is then said to be anomalous. In this section, we shall consider the limiting case where

$$\delta \ll l, \quad \delta \ll v_F/\omega. \quad (86.10)$$

There may be any relation between l and v_F/ω .†

The solution of the boundary problem of the skin effect begins from the auxiliary problem of the relation in an infinite metal between the current and the electric field

$$E = E_0 e^{i(k \cdot r - \omega t)}$$

variable in time and space. The wave vector of the field is assumed to satisfy the inequalities

$$1/k \leq l, \quad 1/k \leq v_F/\omega, \quad (86.11)$$

corresponding to (86.10). The change δn in the electron distribution varies in the same manner as the field.

Since $v_1 k \gg v_F/l \sim 1/\tau$, the collision integral $C(n) \sim \delta n/\tau$ in the transport equation may be neglected in comparison with the spatial derivative term $v \cdot \partial n / \partial \mathbf{r} \sim v_k k \delta n$. Since $k v_F \gg \omega$, we can also neglect the time derivative $\partial n / \partial t \sim \omega \delta n$.

With the latter approximation, the transport equation for the quasi-particles in an electron Fermi liquid again reduces to the equation for a gas when the distribution function is redefined, δn being replaced by $\delta \tilde{n}$ from (74.13). In the present case, these approximations bring the transport equation to the simple form

$$v \cdot \partial \delta \tilde{n} / \partial \mathbf{r} - e \mathbf{E} \cdot \partial n_0 / \partial \mathbf{p} = 0.$$

Putting

$$\partial \delta \tilde{n} / \partial \mathbf{r} = \mathbf{i} \mathbf{k} \delta \tilde{n}, \quad \partial n_0 / \partial \mathbf{p} = \mathbf{v} \partial n_0 / \partial \epsilon$$

we then find

$$\delta \tilde{n} = -\mathbf{i}(e \mathbf{E} \cdot \mathbf{v} / \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}) \partial n_0 / \partial \epsilon \quad (86.12)$$

This expression has a pole at $\mathbf{k} \cdot \mathbf{v} = 0$. To calculate the current

$$\mathbf{j} = -e \int v \delta \tilde{n} \cdot 2d^3p / (2\pi\hbar)^3$$

The equality $\delta \sim l$ is reached when $\omega \sim c^2/\sigma l^2$, i.e. (with the estimate $\sigma \sim le^2 N/p_F$) when $\omega \sim c^2 p_F / e^2 l^3 N$. This is compatible with the inequality $\delta \sim l \leq v_F/\omega$ if $l \gg c/\Omega$, where $\Omega \sim (Ne^2/m^*)^{1/2}$ is the plasma frequency of the metal ($m^* \sim p_F/v_F$ being the effective mass of the conduction electrons). For ordinary metals, $\Omega \sim 10^{15} - 10^{16} \text{ s}^{-1}$. This pole must be avoided by writing $\mathbf{k} \cdot \mathbf{v} \rightarrow \mathbf{k} \cdot \mathbf{v} - i0$: †

$$\mathbf{j} = ie^2 \int \frac{\mathbf{v}(\mathbf{E} \cdot \mathbf{v})}{\mathbf{k} \cdot \mathbf{v} - i0} \frac{\partial n_0}{\partial \epsilon} \frac{2d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \quad (86.13)$$

Neglecting as usual the thermal blurring of the equilibrium distribution function, we write $\partial n_0 / \partial \epsilon = -\delta(\epsilon - \epsilon_F)$ and transform the integral over d^3p into one over the Fermi surface by (74.20). According to the usual formula of differential geometry, the area element is $dS = do_\nu / K$, where do_ν is a solid-angle element for the direction of the normal $\boldsymbol{\nu}$ to the surface and K is the Gaussian curvature of the surface, i.e. $K = 1/R_1 R_2$, the reciprocal of the product of its principal radii of curvature at the point concerned. Noting also that the direction of the normal at any point on the Fermi surface is the same as that of the velocity $\mathbf{v} = \partial \epsilon / \partial \mathbf{p}$, we find

$$\mathbf{j} = -\frac{2ie^2}{(2\pi\hbar)^3} \int \frac{\boldsymbol{\nu}(\mathbf{E} \cdot \boldsymbol{\nu})}{K(\boldsymbol{\nu})} \frac{do_\nu}{\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\nu} - i0} \quad (86.14)$$

If the direction of $\boldsymbol{\nu}$ is specified by the azimuthal and polar angles φ and θ relative to the direction of $\mathbf{k}$ as polar axis, $\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\nu} = k \cos \theta$ and $do_\nu = \sin \theta d\varphi d\theta$.

The integration in (86.14) with respect to the variable $\mu = \cos \theta$ is taken over the segment $-1 \leq \mu \leq 1$ of the real axis, passing along a semicircle below the pole $\mu = 0$. It is easy to see that the integral along the straight segments (i.e. the principal value) is then zero, leaving only the contribution from the semicircle. To prove this, we note that the function $\epsilon(\mathbf{p})$ is even, and therefore the Fermi surface $\epsilon(\mathbf{p}) = \epsilon_F$ is unchanged when $\mathbf{p} \rightarrow -\mathbf{p}$; since a change in the sign of $\mathbf{p}$ changes the sign of the normal vector $\boldsymbol{\nu}$, it follows that $K(-\boldsymbol{\nu}) = K(\boldsymbol{\nu})$. The integral in (86.14) can therefore be written as

$$\frac{1}{2} \left\{ \int \frac{\boldsymbol{\nu}(\mathbf{E} \cdot \boldsymbol{\nu}) do_\nu}{K(\boldsymbol{\nu})(\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\nu} - i0)} - \int \frac{\boldsymbol{\nu}(\mathbf{E} \cdot \boldsymbol{\nu}) do_\nu}{K(\boldsymbol{\nu})(\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\nu} + i0)} \right\}$$

where the braces contain the sum of the integrals obtained from each other by the change of variable of integration $\nu \rightarrow -\nu$; the statement made above is then obvious.

At the pole of the integrand, $k \cdot \nu = k \cos \theta = 0$, i.e. the normal ν is perpendicular to the given direction of the wave vector k . The residue with respect to the variable $\cos \theta$ is therefore the integral

$$\int \frac{\nu(\mathbf{E} \cdot \nu)}{kK(\nu)} d\varphi$$

taken along the geometric locus of points on the Fermi surface for which $\nu \perp k$. Thus we have finally the relation between the current and the field in the form

$$\mathbf{j}_\mu = \sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) E_\beta, \quad (86.15)$$

[†] This corresponds to the usual $\omega \rightarrow \omega + i0$ in $\omega - k.v$.
where

$$\sigma_{\alpha\beta}(k) = 2\pi e^2 A_{\alpha\beta} / (2\pi\hbar)^3 k, \quad A_{\alpha\beta} = \int_0^{2\pi} [\nu_\alpha \nu_\beta / K(\varphi)] d\varphi \quad (86.16)$$

is a real tensor in the plane perpendicular to k ; if the direction of k is taken as the x -axis, α and β take the values y and z . The vector $\mathbf{j}$ lies in this plane, and is therefore transverse to k .

The contribution to the current comes only from electrons with $\mathbf{v} \cdot \mathbf{k} = 0$, i.e. moving perpendicular to the wave vector. This is a natural consequence of an approximation in which the mean free path is regarded as indefinitely long: in motion at an angle to k , the electron passes through a field oscillating in space, and these oscillations reduce to zero the overall action of the field on the electron. In the next approximation, when the finite value of kl is taken into account, there is a contribution to the current from electrons moving in a small range of angles $\sim 1/kl$ to the plane perpendicular to k .

Let us now go on to the subject of field penetration in the anomalous skin effect. This is a half-space problem, to be solved with the boundary conditions at the surface of the metal. These conditions for the distribution function depend on the physical properties of the surface with respect to electrons incident on it. It is important, however, that in this case the current is due essentially only to electrons moving almost parallel to the metal surface. For these, the law of reflection is largely independent of the degree of perfection of the metal surface, and approximates to specular reflection, the electrons being reflected with reversed components of the velocity v normal to the surface but unchanged tangential components; in order not to interrupt the discussion, a more detailed treatment of this will be postponed to the end of the section.

Specular reflection corresponds to the following boundary condition on the distribution function:

$$\delta\tilde{n}(v_x, v_y, v_z) = \delta\tilde{n}(-v_x, v_y, v_z) \quad \text{for} \quad x = 0. \quad (86.17)$$

With this condition, the half-space problem is equivalent to that of an infinite medium in which the field distribution is symmetrical about the plane $x = 0$: $\mathbf{E}(t, x) = \mathbf{E}(t, -x)$. Electrons reflected from the boundary in the half-space ($x > 0$) problem correspond to electrons passing freely through the plane $x = 0$ from the side $x = 0$ in the infinite-medium problem.

In the problem of the extreme anomalous skin effect, we can suppose that the field $\mathbf{E}$ (which depends only on the one coordinate x) is everywhere parallel to the plane $x = 0$. According

to (86.15), the current vector $\mathbf{j}$ lies in the same plane, and so the condition of zero current component normal to the metal surface at all points on the surface is necessarily satisfied. [†]

Without the assumption that $\mathbf{j} = \sigma \mathbf{E}$, we have for the two-dimensional vector $\mathbf{E}$, in place of (86.4),

$$\mathbf{E}'' = -4\pi i\omega \mathbf{j}/c^2 \quad (86.18)$$

We shall leave the time factor $e^{-i\omega t}$ implicit in the subsequent formulae, so that $\mathbf{E}, \mathbf{j}$, etc., will be functions of x only.

The function $\mathbf{E}(x)$, continued symmetrically into the range $x < 0$, is continuous at $x = 0$, but the derivative $\mathbf{E}'(x)$, being an odd function of x , has a discontinuity there, changing sign as x passes through zero. According to (86.1), these derivatives are related to the magnetic field by

$$\mathbf{E}' = i\omega \mathbf{B} \times \mathbf{u}/c$$

where u is again a unit vector in the x -direction. In the half-space problem, the condition at $x = 0$ would therefore be $\mathbf{E}' = i\omega \mathbf{B}_0 \times \mathbf{u}/c$, where $\mathbf{B}_0$ is the field at the boundary of the metal. In the infinite-medium problem, this corresponds to

$$\mathbf{E}'(+0) - \mathbf{E}'(-0) = 2i\omega \mathbf{B}_0 \times \mathbf{u}/c$$

We multiply both sides of (86.18) by e^{-ikx} and integrate with respect to x from $-x$ to ∞ .[†] On the left-hand side, we write

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{E}'' e^{-ikx} dx = \int_{-\infty}^0 (\mathbf{E}' e^{-ikx})' dx + \int_0^{\infty} (\mathbf{E}' e^{-ikx})' dx + ik \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{E}' e^{-ikx} dx$$

Since the field $\mathbf{E}(x)$ is zero at infinity, the first two integrals give just the difference $\mathbf{E}'(-0) - \mathbf{E}'(+0)$. In the last term we can simply integrate by parts, since $\mathbf{E}(x)$ itself is continuous. The result is

$$2i\omega \mathbf{B}_0 \times \mathbf{u}/c + k^2 \mathbf{E}(k) = 4\pi i\omega \mathbf{j}(k)/c^2$$

where $\mathbf{E}(k)$ and $\mathbf{j}(k)$ are the Fourier transforms of $\mathbf{E}(x)$ and $\mathbf{j}(x)$.

According to (86.15), these transforms are related by $j_\alpha(k) = \sigma_{\alpha\beta}(k) E_\beta(k)$. We then find the expression

$$E_\alpha(k) = \zeta_{\alpha\beta}(k) (\mathbf{B}_0 \times \mathbf{u})_\beta \quad (86.19)$$

where $\zeta_{\alpha\beta}(k)$ is a two-dimensional tensor specified by means of its inverse:

$$\zeta_{\alpha\beta}^{-1}(k) = -\frac{c}{2i\omega} \left[k^2 \delta_{\alpha\beta} - \frac{4\pi i\omega}{c^2} \sigma_{\alpha\beta}(|k|) \right] \quad (86.20)$$

The argument of $\sigma_{\alpha\beta}$ is written as $|k|$, as a reminder that it is the magnitude of the vector k .

DK 1 – Y

The function $\mathbf{E}(x)$ itself is obtained from (86.19) on multiplying by e^{kx} and integrating over $dk/2\pi$. Since $\zeta_{\alpha\beta}(k)$ is even, we have

^{††} In subsequent approximations, when the finiteness of the ratio $\delta//$ is taken into account, there are components $\sigma_{\alpha x}$ and σ_{xx} of the conductivity tensor as well as $\sigma_{\alpha\beta}$. To satisfy the boundary condition $j_x = 0$, we must then include the field E_x normal to the surface, as already noted in the first footnote to this section.

^{††} The subsequent calculations are formally identical with those in the problem of magnetic field penetration into a superconductor (SP 2, §52).

$$E_\alpha(x) = \frac{1}{\pi} \int_0^\alpha \zeta_{\alpha\beta}(k) \cos kx dk \cdot (\mathbf{B}_0 \times \mathbf{u})_\beta \quad (86.21)$$

In particular, the field at the boundary of the metal is

$$E_{0\alpha} = \zeta_{\alpha\beta} (\mathbf{B}_0 \times \mathbf{n})_\beta, \quad \zeta_{\alpha\beta} = \frac{1}{\pi} \int_0^x \zeta_{\alpha\beta}(k) dk \quad (86.22)$$

For an actual calculation of the surface impedance, we take the principal axes of the symmetrical tensor $\sigma_{\alpha\beta}(k)$ as the y and z axes. The tensor $\zeta_{\alpha\beta}$ is brought to principal axes along with $\sigma_{\alpha\beta}$, and its principal values are

$$\zeta^{(\alpha)} = -\frac{2i\omega}{\pi c} \int_0^\infty \frac{dk}{k^2 - ib^{(\alpha)}/k}, \quad b^{(\alpha)} = \frac{\omega e^2 A^{(\alpha)}}{\pi c^2 \hbar^3}$$

where the $A^{(\alpha)}$ are the principal values of the tensor $A_{\alpha\beta}$. The integration gives †

$$\zeta^{(\alpha)} = (1 - i\sqrt{3}) \frac{2\pi^{1/3} \hbar}{3^{3/2}} \left(\frac{\omega^2}{ce^2 A^{(\alpha)}} \right)^{1/3} \quad (86.23)$$

The quantities $A^{(\alpha)}$ depend only on the shape and size of the Fermi surface. The impedance (86.23) does not depend at all on the electron mean free path. For an order-of-magnitude estimate, we can assume that the radii of curvature of the Fermi surface are $\sim p_F$; then $A \sim p_F^2$, and

$$\zeta \sim (\hbar^3 \omega^2 / ce^2 p_F^2)^{1/3} \quad (86.24)$$

The real part of the impedance determines the dissipation of the field energy in the metal. In the approximation concerned (where electron collisions are ignored) this dissipation is of the Landau-damping type. ‡

† The contour of integration (the right-hand half of the real axis) can be turned through $-\pi/6$ in the

complex xk -plane without crossing any poles of the integrand. Integration along the line $k = ue^{-iz/6}$ gives

and on substituting $u^3 + b = b/\xi$,

‡ The phenomena which are the essence of the anomalous skin effect were first noted by H. London

(1940). The qualitative theory of the effect is due to A. B. Pippard (1947), and the quantitative theory given here is due to G. E. H. Reuter and E. H. Sondheimer (1948).

The law of damping of the electric field within the metal in the anomalous skin effect is not exponential, and so the concept of the penetration depth has not the same literal significance as in (86.5). Since the integrand in (86.21) contains the oscillating factor $\cos kx$, the integral for any given x is mainly governed by the range $k \sim 1/x$. A considerable decrease of the function $\mathbf{E}(x)$ occurs when these $k \gg b^{1/3}$. The penetration depth δ is therefore of the order of $b^{-1/3}$, or

$$\delta \sim (c^2 \hbar^3 / \omega e^2 A)^{1/3} \sim (c^2 \hbar^3 / \omega e^2 p_F^2)^{1/3} \quad (86.25)$$

As the frequency increases, this depth continues to decrease, but more slowly than for the normal effect. The values given by (86.6) and (86.25), which we denote by δ_n and δ_a , are comparable in order of magnitude when $\delta \sim l$. Since one of them decreases as $\omega^{-1/2}$ and the other as $\omega^{-1/3}$, it is clear that for a given value of ω we have $\delta_a^3 \sim \delta_n^2 l$.

Lastly, some comments about the nature of electron reflection from the metal boundary. If the surface is ideal (free from defects) and coincides with a crystallographic plane, the configuration of atoms in it has the periodicity corresponding to the translational symmetry of the crystal lattice. In that case, the reflection of an electron conserves not only the energy but also the tangential components p_y and p_z of the electron quasi-momentum. The normal component p'_x of the quasi-momentum of the reflected electron is determined from the value p_x for the incident electron by means of the equation

$$\epsilon(p'_x, p_y, p_z) = \epsilon(p_x, p_y, p_z), \quad (86.26)$$

and we must have $v'_x = \partial\epsilon/\partial p'_x > 0$, the reflected electron moving away from the boundary (the velocity of the incident electron is $v_x = \partial\epsilon/\partial p_x < 0$). Equation (86.26) may have several such solutions, and in general $v'_x \neq -v_x$.

For electrons at glancing incidence, however, these solutions always include one that corresponds to a small change in the quasi-momentum, with $v_x^2 = -v_x$ (i.e., the reflection is literally specular): an electron moving almost parallel to the boundary has a small $v_x = \partial\epsilon/\partial p_x$, and this means that the electron corresponds to a point P on the constant-energy surface in p -space that is near the extremum of ϵ as a function of p_x (where $\partial\epsilon/\partial p_x = 0$). Near such a point, on the other side of the extremum, there is always a point P' where the derivative $\partial\epsilon/\partial p_x$ differs only in sign from its value at P .

It can be shown that the reflection of such an electron takes place, with very high probability, with this change of quasi-momentum. Moreover, the statement remains true for reflection from an imperfect surface having roughness of atomic dimensions, when there is, strictly speaking, no conservation of the tangential components of the quasi-momentum. An intuitive explanation is that the wave function

of the electron varies slowly in the x -direction and so does not "notice" the atomic roughnesses of the surface. [†]

It is noteworthy that the value of the surface impedance in the highly anomalous skin effect is in fact fairly insensitive to the nature of the electron reflection. For example, in diffuse reflection (when all directions of the reflected electron are equally probable, whatever the angle of incidence), the value of the impedance differs from (86.23) only by a factor 9/8. The boundary condition for diffuse reflection from a plane surface is $\delta r_i (v_x > 0, v_y, v_z) = 0$ for $x = 0$. Here, however, the Fourier method is unsuitable, and the problem has to be solved by what is called the Wiener-Hopf method. [‡]

17.10.9 §87. Skin effect in the infra-red range

We have now considered two limiting cases of the skin effect: the normal effect, when the mean free path l is the smallest of the three characteristic distances δ, l and v_l/ω ; and the anomalous effect, when the penetration depth δ is the smallest. Let us now take a third case, in which the smallest is

$$v_l l \omega \ll \delta, \quad v_l l \omega \ll l. \quad (87.1)$$

This is reached in a natural way from the anomalous effect by further increasing the frequency; although the penetration depth then decreases, the product $\omega\delta$ increases as $\omega^{2/3}$. For ordinary metals, the conditions (87.1) are satisfied in the infra-red range.

These conditions put a lower limit on the frequency. However, the validity of the results below, which are based on the theory of Fermi liquids, is also subject to an upper limit of

[†]When $x \geq \delta$, the integral (86.21) is governed by $k \leq b^{1/3}$. Then $\xi(k) - k$, and the field $E(x)$ decreases as x^{-2} .

frequency: $\hbar\omega \ll \epsilon_F$. If this is not satisfied, quasi-particles are excited from the depth of the Fermi distribution, and these have no meaning in the Fermi liquid theory.

To determine the relation between the current and the electric field, we must again go back to the transport equation. Now, however, because of the condition $\omega \gg v_F/\delta$, the term containing the time derivative is large compared with the term containing spatial derivatives, and because of the condition $\omega \gg v_F/l$ it is also large compared with the collision integral. Neglecting these terms, we have the transport equation in the form

$$\frac{\partial \delta n}{\partial t} - e\mathbf{E} \cdot \mathbf{v} \frac{\partial n_0}{\partial \epsilon} = 0.$$

Putting $\partial \delta n / \partial t = -i\omega \delta n$, we obtain from this

$$\delta n = -(\partial n_0 / \partial \epsilon) \psi, \quad \psi = e\mathbf{E} \cdot \mathbf{v} / i\omega. \quad (87.2)$$

The absence of the term containing the coordinate derivatives means that there is no spatial dispersion. In this sense the skin effect is normal again. The presence of the time-derivative term, however, causes frequency dispersion of the conductivity. The situation here is similar to that in calculating the permittivity of a collisionless plasma. The only difference lies in the anisotropy of the metal and in the Fermi-liquid effects. The latter have the result that the current density is given by an integral that depends not only on the distribution function δn but also on the interaction function $f(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$ of the quasi-particles (the conduction electrons). It should be noted that, because of the presence of the term $\partial \delta n / \partial t$ in the transport equation, it is not possible here to eliminate the interaction of the quasi-particles by using the effective distribution function $\delta \bar{n}$.

According to (74.21) and (74.22), the current density is expressed in terms of the correction to the electron distribution function by

$$\mathbf{j} = -e \int \nu \left[\psi(\mathbf{p}_r) + \int f(\mathbf{p}_r, \mathbf{p}'_i) \psi(\mathbf{p}'_i) \frac{dS'_F}{v'_i (2\pi\hbar)^3} \right] \frac{2dS_i}{(2\pi\hbar)^3}.$$

where ν is a unit vector in the direction of the velocity v_F , which is the same as the normal vector to the Fermi surface. Substituting ψ from (87.2), we find the relation between the current and the field in the form $j_\alpha = \sigma_{\alpha\beta}(\omega) E_\beta$, with the conductivity tensor

$$\left. \begin{aligned} \sigma_{\alpha\beta} &= -(e^2 / i\omega m) N_{u\beta}^{(\text{eff})} \\ N_{\alpha\beta}^{(\text{eff})} &= \int \nu_n \left[\nu_F \nu_\beta + \int f(\mathbf{p}_F, \mathbf{p}'_F) \nu'_\beta \frac{dS'_F}{(2\pi\hbar)^3} \right] \frac{2dS_F}{(2\pi\hbar)^3} \end{aligned} \right\} \quad (87.3)$$

The symmetry of the tensor $N_{\alpha\beta}^{(\text{cf})}$ is determined by that of the crystal, and does not depend on the direction of the field as in (86.15). In a crystal with cubic symmetry, which we shall assume for the sake of simplicity, this tensor, and therefore $\sigma_{\alpha\beta}$, reduce to a scalar: $N_{\alpha\beta}^{(eff)} = N^{(eff)} \delta_{\alpha\beta}$, and

$$\sigma(\omega) = -(e^2 \lim \omega) N^{(\text{eff})}. \quad (87.4)$$

The description of the properties of the metal by means of this conductivity can be replaced, in the usual manner, by a description in terms of the permittivity

$$\epsilon(\omega) = 1 + i4\pi\sigma(\omega)/\omega = 1 - 4\pi e^2 N^{(\text{eff})} / m\omega^2. \quad (87.5)$$

The notation $N^{(eff)}$ is used by analogy with the limiting expression (ECM, §59) for the permittivity at very high frequencies: $\epsilon = I - 4\pi e^2 N / m\omega^2$, where N is the total number

¹These statements are proved in the review article by A. F. Andreev, Soviet Physics Uspekhi 14, 609, 1972.
 § See G. E. H. Reuter and E. H. Sondheimer. Proceedings of the Royal Society A. 195. 336, 1948.

of electrons per unit volume of the substance. Thus $N^{(eff)}$ in the infra-red optics of metals represents the effective number of electrons; it depends on the interaction function of the conduction electrons.

Together with N^{leff} , it is useful to define also the effective plasma frequency

$$\Omega = \left(4\pi e^2 N^{(cf)}/m\right)^{1/2} \quad (87.6)$$

The conductivity is then

$$\sigma = i\Omega^2/4\pi\omega. \quad (87.7)$$

The value of Ω is determined only by the parameters of the electron spectrum of the metal; as a rough estimate, therefore, it is equal to $\epsilon_F/\hbar$, the Fermi limiting energy. Since the present theory is restricted by the condition $\hbar\omega \ll \epsilon_F$, we have $\Omega \gg \omega$.

The penetration of the field into the metal is described by equation (86.4), which, on substitution of σ from (87.7), becomes

$$\mathbf{E}'' - (\Omega^2/c^2) \mathbf{E} = 0.$$

The solution which tends to zero as $x \rightarrow \infty$ is

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 e^{-x/\delta}, \quad \delta = c/\Omega; \quad (87.8)$$

for typical metals, $c/\Omega \sim 10^{-5}$ cm. The field is therefore damped exponentially, the penetration depth being independent of the frequency. The relation between the electric and magnetic fields is now given (as is easily seen by means of the first equation (86.3)) by (86.8) with impedance

$$\zeta = -i\omega\delta/c = -i\omega/\Omega. \quad (87.9)$$

The purely imaginary impedance denotes total reflection of the electromagnetic wave from the surface of the metal, without dissipation. This is to be expected, since the approximation used has taken no account of collisions of electrons, which are the cause of dissipation.

With (87.7), the basic conditions for this theory to be valid may be written

$$\Omega \gg \omega \gg \Omega v_F/c. \quad (87.10)$$

The left $\dots$ and inequality is usually compatible with $\hbar\omega \gg \Theta$, where Θ is the Debye temperature. The Fermi parameter v_F and the function f in (87.3) must then be taken not on the Fermi surface itself but for $|\epsilon - \epsilon_F| \gg \Theta$. It has been shown in *SP 2*, §65, that the electron-phonon interaction has the result that v_F in this range differs from that in the range $|\epsilon - \epsilon_F| < \Theta$ (which is important, for instance, as regards the static properties of the metal at low temperatures); the same is true of the quasi-particle interaction function f .

17.10.10 §88. Helicon waves in metals

The fact that an external alternating magnetic field does not penetrate into a metal means that undamped electromagnetic waves with frequencies up to the plasma frequency ($\omega \sim \Omega$) cannot propagate in a metal.

The position is quite different, however, in the presence of a static magnetic field B . This field alters the motion of the electrons and therefore greatly affects the electromagnetic properties of the metal. It is important that the motion becomes finite in the plane perpendicular to the field. In strong fields, when the Larmor radius $r_B \sim cp_F/eB$ of the orbit becomes small in comparison with the mean free path,

$$r_B \ll 1. \quad (88.1)$$

or (equivalently) $\omega_B \tau \gg 1$, where $\omega_B \sim v_F/r_B \sim eB/m^*c$ is the Larmor frequency and $\tau \sim \|v_F$ the mean free time, the electrical conductivity in directions transverse to the field is greatly reduced, tending to zero as $B \rightarrow \infty$. We may say that in these directions the metal behaves like an insulator, and so the energy dissipation is reduced in waves whose electric field is polarized in the plane perpendicular to $\mathbf{B}$. The propagation of such waves without damping (in the first approximation) thus becomes possible. The permissible wave frequencies are limited by the condition

$$\omega < \omega_B; \quad (88.2)$$

only if this is satisfied can the electron trajectories undergo appreciable curvature during the period of the field. thus altering the electromagnetic properties of the metal with regard to these frequencies.

The finite motion of the electron (in the plane perpendicular to $\mathbf{B}$) presupposes that its momentum trajectory, a cross-section of the Fermi surface, is also finite. The above discussion therefore applies to metals with closed Fermi surfaces for any direction of $\mathbf{B}$, but to those with open surfaces only for directions of $\mathbf{B}$ such that the cross-sections are closed. With open cross-sections, the electron motion remains infinite in the magnetic field, the conductivity does not decrease, and the propagation of electromagnetic waves in the directions concerned cannot occur.

Undamped electromagnetic waves in a metal may be regarded as Bose branches of the energy spectrum of the electron Fermi liquid. The macroscopic nature of these waves is shown by the wavelength, which is large compared with the lattice constant. For this reason, the excitations correspond to only a very small relative phase volume, and their contribution to the thermodynamic quantities in the metal is negligible.

We again write Maxwell's equations:

$$\text{curl } \bar{\mathbf{B}} = 4\pi \mathbf{j}/c, \quad \text{curl } \mathbf{E} = -(1/c) \partial \bar{\mathbf{B}} / \partial t, \quad (88.3)$$

where $\bar{\mathbf{B}}$ denotes the weak alternating magnetic field of the wave, in contrast to the constant $\mathbf{B}$. Elimination of $\bar{\mathbf{B}}$ from these equations gives

$$\begin{aligned} \text{curl curl } E &= \text{grad div } E - \Delta E \\ &= - (4\pi/c^2) \partial \mathbf{j} / \partial t \end{aligned}$$

For a monochromatic plane wave, this becomes

$$(-k_c k_\gamma + k^2 \delta_{\alpha\gamma}) E_\gamma = 4\pi i \omega \mathbf{j}_\alpha / c^2. \quad (88.4)$$

The field $\mathbf{E}$ is expressed in terms of the current by $E_\alpha = \rho_{\alpha\beta} j_\beta$, where $\rho_{\alpha\beta} = \sigma_{\alpha\beta}^{-1}$ is the resistivity tensor. We then obtain a set of linear homogeneous equations,

$$[k^2 \rho_{\alpha\beta} - k_\alpha k_\gamma \rho_{\gamma\beta} - 4\pi i \omega \delta_{\alpha\beta} / c^2] j_\beta = 0. \quad (88.5)$$

The determinant of this yields the dispersion relation for the waves.

In §§84 and 85 we have derived the conductivity tensor for a metal (in the residual resistance range) in a strong magnetic field, for the stationary case. Let us now see how the results must be modified in the non-stationary case.

The periodicity of the electric field in time and space (and therefore that of the alternating part of the electron distribution function) causes the presence of terms

$$\frac{\partial \delta n}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial \delta \tilde{n}}{\partial \mathbf{r}} = -i\omega \delta n + i\mathbf{k} \cdot \mathbf{v} \delta \tilde{n}$$

on the left of the transport equation; cf. (74.25). Similarly to (84.7), we put $\delta \mathbf{n}$ and $\delta \tilde{n}$ in the form

$$\delta n = (\partial n_0 / \partial \epsilon) e \mathbf{E} \cdot \mathbf{h}, \quad \delta \tilde{n} = (\partial n_0 / \partial \epsilon) e \mathbf{E} \cdot \mathbf{g}.$$

According to (74.21), the functions h and g are related by the linear integral expression

$$\mathbf{g} = \mathbf{h} + \int f(\mathbf{p}, \mathbf{p}') h' dS'_F / v'_H (2\pi \hbar)^3 \equiv \hat{L} \mathbf{h}.$$

The transport equation then becomes

$$\partial g / \partial t - [I(g) + i\omega \hat{L}^{-1} g - i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}) g] = v. \quad (88.6)$$

It differs from (84.10) in that $I(g)$ is replaced by the expression in the square brackets, which depends not only on the nature of the electron scattering by impurity atoms but also on the interaction between the electrons.

Because of the condition $r_B \ll l$, the term $I(g)$ in (88.6) is much less than $\partial g / \partial t$, as it was in (84.10). Because of the condition $\omega \ll \omega_B$, the term $i\omega \hat{L}^{-1} g \sim i\omega g$ is also small. We shall impose also a condition on the wave number, $kv_F \ll \omega_B$, i.e.,

$$kr_B \ll 1 : \quad (88.7)$$

the wavelength must be much greater than the Larmor radius. Then the last term in the square brackets in (88.6) is small also. The method of solving the transport equation by successive approximation (§84) then remains valid, and therefore so do the results found there for the leading terms in the expansion of the conductivity tensor in powers of $1/B$. However, because of the presence of ω and $\mathbf{k}$ in (88.6), there will in general be frequency and spatial dispersion of the conductivity.

The presence of several characteristic parameters of length and time, and the variety of geometrical properties of the Fermi surfaces, causes a multiplicity of phenomena relating to the propagation of electromagnetic waves in metals. We shall consider in §§88 and 89 only some typical cases.

Let us take the case of an uncompensated metal with a closed Fermi surface. According to (85.4) and (85.5), the largest component of the resistivity tensor is

$$\rho_{xy} = -\rho_{yx} = B/ec(N_e - N_h); \quad (88.8)$$

this belongs to the non-dissipative (anti-Hermitian) part of the tensor. This component is entirely independent of the form of the collision integral, and therefore of the form of the expression in square brackets in (88.6). The formula (88.8) remains valid in the wave field, therefore.

The description of the medium by means of the resistivity tensor $\rho_{\alpha\beta}$ (or the conductivity tensor $\sigma_{\alpha\beta}$) is equivalent to the use of the permittivity tensor

$$\epsilon_{\alpha\beta} = 4\pi i \sigma_{\alpha\beta} / \omega, \quad \epsilon_{\alpha\beta}^{-1} = \omega \rho_{\alpha\beta} / 4\pi i.$$

The tensor $\epsilon_{\alpha\beta}^{-1}$ here has only the components

$$\epsilon_{xv}^{-1} = -\epsilon_{vx}^{-1} = \omega B / 4\pi i c e (N_e - N_h).$$

This is the same as that found in § 56 for waves in plasmas, except that the electron density N_e is replaced by the difference $N_e - N_h$. The results of §56 may therefore be applied immediately to these waves in metals, which are likewise called helicon waves. †

The dispersion relation for them is

$$\omega = cB |\cos \theta| / 4\pi e |N_e - N_h|, \quad (88.9)$$

where θ is the angle between $\mathbf{k}$ and $\mathbf{B}$. The electric field of the wave is elliptically polarized in the plane perpendicular to the magnetic field $\mathbf{B}$. Taking the direction of $\mathbf{B}$ as the z -axis (as in §56), and the plane through $\mathbf{k}$ and $\mathbf{B}$ as the xz -plane, we find the electric field

$$E_y = \pm i |\cos \theta| E_x, \quad (88.10)$$

the upper and lower signs relating to the cases $N_e > N_h$ and $N_e < N_h$ respectively.

17.10.11 §89. Magnetoplasma waves in metals

Let us now consider waves in a compensated ($N_e = N_h$) metal having a closed Fermi surface. In addition to the obligatory conditions (88.1) and (88.2), we shall assume that the inequalities

$$\omega \gg v_F l, \quad \omega \gg k v_F \quad (89.1)$$

are also satisfied. The first of these implies that the collision integral $I(g)$ in the transport equation (88.6) is much less than the term $i\omega \hat{L}^{-1} g$, and the second condition implies that the term $i(k \cdot v)g$ is also small. Neglecting these terms, we have the equation

$$\partial g / \partial \tau - i\omega \hat{L}^{-1} g = v \quad (89.2)$$

which is obtained from (84.10) on replacing the term $I(g)$ by $i\omega \hat{L}^{-1} g$.

The results derived in §85 for the resistivity tensor in the stationary case therefore remain valid, except that the small parameter in the expansion in powers of $1/B$ is not r_B/l but $-i\omega/\omega_B$. There is no spatial dispersion of the conductivity, but there is frequency dispersion.

According to (85.7), in the stationary case the leading terms in the expansion of the resistivity tensor for a compensated metal are

$$\rho_{zz} = \text{constant}; \quad \rho_{xx}, \rho_{yy}, \rho_{xy} \propto B^2; \quad \rho_{xz}, \rho_{yz} \propto B. \quad (89.3)$$

To bring out the parameter r_B/l in this tensor, however, we must ascertain how not only B but also l occurs in its components. To do so, we write, for example, the estimate

$$\rho_{xx} \sim \rho_0 (||r_B||)^2 \sim (B/ecN) ||r_B||$$

where $\rho_0 \sim p_F / Ne^2 l$. Similarly

$$\rho_{yz} \sim \rho_0 l / r_B \sim B / ecN, \quad \rho_{2z} \sim \rho_0 \sim (B/ecN) r_B / l.$$

Now, with the above-mentioned change of expansion parameter, we find the tensor $\rho_{\alpha\beta}(\omega)$ as

$$\rho_{\alpha\beta} = (B/ecN) \begin{bmatrix} (\omega_B / -i\omega) a_{xx} & (\omega_B / -i\omega) a_{xy} & a_{xz} \\ (\omega_B / -i\omega) a_{xy} & (\omega_B / -i\omega) a_{yy} & a_{yz} \\ -a_{xz} & -a_{yz} & (-i\omega / \omega_B) a_{zz} \end{bmatrix} \quad (89.4)$$

†The possibility of the propagation of such waves in metals was noted by O. V. Konstantinov and V. I. Perel' (1960).

where all the $a_{\alpha\beta} \sim 1$ are dimensionless real coefficients; the quantities N and m^* (in $\omega_B = eB/m^*c$) are to be regarded here as parameters chosen in some manner and having the correct order of magnitude. All the terms in (89.4) belong to the anti-Hermitian (i.e. non-dissipative) part of the tensor. It is therefore evident that including only these terms will give undamped waves. In the general case where the directions of B and k are arbitrary, the wave dispersion relation is expressed by fairly lengthy formulae. We shall consider only a particular case which illustrates the fundamental properties of these waves.

We shall suppose that the metal crystal lattice has an axis of symmetry with order higher than 2, and that the field $\mathbf{B}$ is along this axis (the z -axis). The quantities a_{xx} , a_{yy} and $a_{xy} = a_{yx}$ form a two-dimensional symmetrical tensor in the xy -plane, which with the symmetry stated reduces to a scalar: $a_{xx} = a_{yy} \equiv a_1$, $a_{xy} = 0$. The quantities a_{xz} and a_{yz} form a two-dimensional vector in the same plane, and with the symmetry stated are zero. Thus there remain only the components

$$\rho_{xx} = \rho_{yy} = (B/ecN)(\omega_B - i\omega)a_1, \quad \rho_{zi} = (B/ecN)(-i\omega/\omega_B)a_2. \quad (89.5)$$

We again take the xz -plane to contain the directions of k and $\mathbf{B}$. If ρ_{zz} , which is small compared with ρ_{xx} , is neglected, the dispersion relation separates into the two equations

$$4\pi i\omega/c^2 - k^2\rho_{yy} = 0, \quad 4\pi i\omega/c^2 - k_z^2\rho_{xx} = 0$$

here we assume that the angle θ between k and B is not too close to $\frac{1}{2}\pi$, so that k_z^2 is not too small ($\cos\theta \gg \omega/\omega_B$). Hence we find as the dispersion relations for the two types of wave

$$\left. \begin{aligned} \omega^{(1)} &= ku_A \vee a_1, \\ \omega^{(2)} &= ku_A |\cos\theta| \sqrt{a_1}, \end{aligned} \right\} \quad (89.6)$$

where $\dagger$

$$u_A = B/(4\pi Nm^*)^{1/2}. \quad (89.7)$$

These are called magnetoplasma waves. The two types are respectively analogous to the fast magnetosonic waves and the Alfvén waves in plasmas. $\ddagger$ Oscillations corresponding to the slow magnetosonic waves cannot have a speed ω/k that satisfies the second condition (89.1), and therefore cannot occur in metals.

17.10.12 §90. Quantum oscillations of the conductivity of metals in a magnetic field

The theory of galvanomagnetic effects given in §§84 and 85 was quasi-classical, in the sense that quantum behaviour appeared only in the electron distribution function; the discreteness of the energy levels in the magnetic field (with closed electron trajectories) was not taken into account. This discreteness causes, however, a qualitatively new effect, namely oscillations of the conductivity as a function of the magnetic field, called the Shubnikov-de Haas effect. This is analogous to the oscillations of the magnetic moment (the de Haas-van Alphen

effect), but the theory of it is more complex because it is a transport effect and not a thermodynamic effect. We shall consider it in terms of a model of non-interacting electrons,

¹ $\dagger$ With the dispersion relations (89.6), (89.7), the condition $kv_F \ll \omega$ signifies that we must have $u_A \gg v_F$. In attainable fields B , this can in practice be satisfied only in semi-metals (such as bismuth) with a low carrier density.

$\ddagger$ The possibility of such waves was noted by S. J. Buchsbaum and J. Golt (1961). The theory given here is due to É. A. Kaner and V. G. Skobov (1963).

leaving aside the question (which does not appear to have been investigated) of Fermi-liquid effects.

As in §84, the magnetic field will be assumed strong in the sense of the condition (84.1), which we write in the form

$$\omega_B \tau \gg 1, \quad (90.1)$$

where τ is the electron mean free time and

$$\omega_B = eB/m^*C \quad (90.2)$$

the Larmor frequency; m^* is the cyclotron mass of the electrons. [†]

At the same time, of course, the field must not be so strong as to violate the quasi-classicality condition

$$\hbar\omega_B \ll \epsilon_F. \quad (90.3)$$

There may be any relationship between $\hbar\omega_B$ and T .

We shall examine only the quantum oscillations of the transverse (relative to the magnetic field, which is in the z -direction) conductivity, and assume in order to simplify the formulae, that the crystal has a symmetry axis (of order > 2) parallel to the magnetic field. In such a crystal the symmetric (dissipative) part of the conductivity tensor has only the components $\sigma_{xx} = \sigma_{yy}$ and σ_{zz} . The comparative simplicity of the problem for the transverse components arises because for them the influence of collisions may (as we have seen in §84) be regarded as a small perturbation in comparison with the influence of the magnetic field; this is not so for the longitudinal conductivity σ_{zz} , [‡]

As in §84, we consider a metal in the residual resistance range, so that we are concerned with collisions between electrons and impurity atoms. Since these collisions are elastic, electrons with different energies take part independently in producing the electric current.

Let $g(\epsilon)$ be the number of quantum states of an electron per unit energy range. Then the spatial number density of electrons with energies in the range $d\epsilon$ is $n(\epsilon)g(\epsilon)d\epsilon$, where $n(\epsilon)$ denotes the state occupation numbers. Let $j_y(\epsilon)$ be the transverse current density generated by these electrons. When both an electric field and an electron density gradient are present, the current density is the sum

$$j_y(\epsilon) = eD(\epsilon)g(\epsilon)\partial n/\partial y + \sigma_{yy}(\epsilon)E_y \quad (90.4)$$

The first term is the diffusive charge transfer; $D(\epsilon)$ is the diffusion coefficient (in actual space) for electrons with energy ϵ . The current (90.4) must be zero for the distribution

$$n_0(\epsilon - e\varphi) \approx n_0(\epsilon) - e\varphi\partial n_0/\partial\epsilon,$$

which corresponds to statistical equilibrium of the electron gas in a weak static electric field with potential $\varphi(r)$ (n_0 being the Fermi distribution). Hence we have as the relation between $\sigma_{yy}(\epsilon)$ and $D(\epsilon)$

$$\sigma_{yy}(\epsilon) = -\epsilon^2 g(\epsilon) D(\epsilon) \partial n_0 / \partial \epsilon.$$

[†] The definition (SP 2(57.6)) is $m^* = (1/2\pi)\partial S/\partial\epsilon$, where $S(\epsilon, p_z)$ is the area of the cross-section of the constant-energy surface by a plane $p_z = \text{constant}$; this surface is here defined in p -space, not in $p/\hbar$ -space as in SP 2.

[‡] For the antisymmetric part of the conductivity tensor, the quantum oscillations occur only in the second approximation with respect to $1/\omega_B T$.

The total electrical conductivity, including the contributions from electrons of all energies, is

$$\sigma_{3v} = -e^2 \int g(\epsilon) D(\epsilon) \frac{\partial n_0}{\partial \epsilon} d\epsilon = -e^2 \sum_s D(\epsilon_s) \frac{\partial n_0(\epsilon_s)}{\partial \epsilon}. \quad (90.5)$$

The summation in the last expression is over all qt antum states of the electron; s conventionally denotes the set of all the state quantum numbers. This formula reduces the calculation of the conductivity to that of the electron diffusion coefficient in the absence of the electric field.

The diffusion coefficient is in turn expressed in terms of the properties of the microscopic scattering events by a formula of the type (21.4):

$$D = \sum (\Delta y)^2 / 2\delta t$$

where the summation is over the collisions undergone by an electron in the time δt , and Δy is the change in the mean value of the electron coordinate y in the collision (the electron motion is finite in the plane perpendicular to the field, and in the intuitive picture of quasi-classical orbits Δy is the displacement of the orbit centre). Let

$$N_{\text{imp}} W_{s's} \delta(\epsilon_s - \epsilon_{s'})$$

denote the probability of an electron transition from state s to state s' in scattering; the delta function expresses the fact that the scattering is elastic, and the factor N_{imp} , the concentration of impurity atoms, expresses the fact that scattering by randomly distributed atoms takes place independently. The diffusion coefficient is then

$$D(\epsilon_s) = \frac{1}{2} N_{\text{imp}} \sum_{s'} (y_s - y_{s'})^2 W_{ss'} \delta(\epsilon_s - \epsilon_{s'}),$$

where y_s is the mean value of the coordinate in state s . Substituting this expression in (90.5), we find the conductivity

$$\sigma_{yy} = -\frac{1}{2} e^2 N_{\text{imp}} \sum_{s,s'} (y_s - y_{s'})^2 \frac{\partial n_0(\epsilon_s)}{\partial \epsilon} W_{s's} \delta(\epsilon_s - \epsilon_{s'}) \quad (90.6)$$

(§. Tițeica 1935, B. I. Davydov and I. Ya. Pomeranchuk 1939). †

In practical applications of this formula the significance of s must be made explicit. Discrete quantization of conduction electron energy levels in a magnetic field occurs when there are closed quasi-classical trajectories in p -space (i.e. closed cross-sections of the constant-energy surfaces), and we shall assume that this is so. The quantum states are defined by four numbers:

$$s = (n, P_x, P_z = p_z, \sigma), \quad (90.7)$$

where n is a (large) positive integer; $\sigma = \pm 1$ denotes the value of the electron spin component; P_x and P_z are components of the generalized quasi-momentum $\mathbf{P} = \mathbf{p} - e \mathbf{A}/c$. The vector potential of the magnetic field is chosen in the gauge $A_x = -By, A_y = A_z = 0$. Because the coordinates x and z are cyclic, the generalized quasi-momentum components P_x and P_z are conserved; see SP2, §58. The energy levels depend on only the three quantum numbers n, p_z and σ ; they are given by

$$\epsilon_{nv}(p_2) = \epsilon(n, p_2) + \sigma \beta B \xi_n(p_2) \quad (90.8)$$

the function $\epsilon(n, p_k)$ being the solution of the equation

$$S(\epsilon, p_2) = 2\pi(e\hbar B/c) \left(n + \frac{1}{2}\right) \quad (90.9)$$

In the second term in (90.8), $\beta = e\hbar/2mc$ is the Bohr magneton, and the factor $\xi_n(p_-)$ represents the change in the electron magnetic moment due to spin-orbit interaction in the lattice.

The conductivity tensor considered in §§84 and 85 is actually the result of averaging the exact functions $\sigma_{\alpha\beta}(B)$ over small quantum oscillations. In particular, from (85.3), the transverse conductivity thus averaged is $\bar{\sigma}_{yy} \propto B^{-2}$. We shall show, first of all, that this result follows from (90.6), and ascertain the relation between the quantities $W_{s's}$ in this formula and the function $w(\mathbf{p}', \mathbf{p})$ in the quasi-classical collision integral (78.14) for electrons and impurities.

It has been noted in §84 that the condition for quasi-classical motion of the electrons ensures also that the scattering process is independent of the magnetic field. The scattering probability in the absence of the field, with change of quasi-momentum from $\mathbf{p}$ to $\mathbf{p}'$, has been expressed in the collision integral (78.14) as

$$w(\mathbf{p}', \mathbf{p}) \delta(\epsilon - \epsilon') d^3p' / (2\pi\hbar)^3 \quad (90.10)$$

In order to put this in a form suitable also for scattering in a magnetic field, it need only be changed to variables which remain meaningful for motion in the field:

$$w(P'_x, p'_z, \epsilon'; P_x, p_z, \epsilon) \delta(\epsilon - \epsilon') dP_x dp_z d\epsilon / (2\pi\hbar)^3 v_y; \quad (90.11)$$

the derivative $v_y = \partial\epsilon/\partial p$, also is understood to be expressed in terms of the new variables. The y -coordinate in motion in a quasi-classical trajectory is related to the generalized quasi-momentum by $P_x = p_x + eBy/c$; hence the mean value over the trajectory is

$$\bar{y} = (c/eB) [P_x - \bar{p}_x(\epsilon, p_z)] \equiv \kappa/B. \quad (90.12)$$

The conductivity $\bar{\sigma}_{yx}$ averaged over the oscillations is found from (90.6) by replacing the summation over the discrete variable s by integration over the continuous variable ϵ . Using for brevity the notation

$$a(\epsilon, p'_2, p_2) = \frac{1}{2} \int (\kappa - \kappa')^2 w dP_x dP'_x / v_y v'_y (2\pi\hbar)^4 \quad (90.13)$$

we find

$$\bar{\sigma}_y = -\frac{e^2 N_{\text{imp}}}{B^2} \int a \frac{\partial n_0}{\partial \epsilon} \delta(\epsilon - \epsilon') d\epsilon d\epsilon' \frac{2dp_z dp'_z}{(2\pi\hbar)^2} \quad (90.14)$$

the factor 2 comes from the two directions of the electron spin, and the scattering probability is assumed independent of the spin, so that the spin component is unchanged. The delta function is removed by the integration over ϵ' ; in that over ϵ , we can regard the slowly varying factor a as constant, and equal to its value for $\epsilon = \mu$, and integrate only the derivative $\partial n_0/\partial \epsilon$. The result is

$$\bar{\sigma}_{yv} = \frac{e^2 N_{\text{imp}}}{B} \int a \frac{2dp_z dp'_z}{(2\pi\hbar)^2} \equiv \frac{1}{B^2} \int b(p_z) .2dp_z \quad (90.15)$$

Let us now take into account the discreteness of the levels. The integration in (90.14) over the continuous variable ϵ (with fixed P_x and p_z) must then be replaced by a summation over n , with

¹In scattering by impurities, the Pauli principle does not affect the formulae; cf. the collision integral (78.14), in which the products nn' associated with this principle cancel.

$$\int \cdots d\epsilon \rightarrow \hbar\omega_B \sum_n \cdots$$

where

$$\hbar\omega_B = \partial\epsilon(n, p_z) / \partial n,$$

as is clear from (90.9) and the definition of the cyclotron mass m^* . With the notation given above, we have

$$\begin{aligned} \sigma_{yy} = & -\frac{e^2 N_{imp}}{B^2} \int \sum_{n, n', \sigma} a(\epsilon_{n\sigma}, p'_z, p_z) \frac{\partial n_0(\epsilon_{n\sigma})}{\partial \epsilon} \times \\ & \times \delta(\epsilon_{n\sigma} - \epsilon_{n'\sigma}) \hbar\omega_B \hbar\omega'_B \frac{dp_z dp'_z}{(2\pi\hbar)^3} \end{aligned} \quad (90.16)$$

because of the integration over both variables p_z and p'_z , the function a may be regarded as symmetrical with respect to them.

The oscillatory part $\tilde{\sigma}_{yy}$ of this expression is separated by means of the Poisson summation formula (cf. SP 2, § 63):

$$\frac{1}{2}F(0) + \sum_{n=1}^{\infty} F(n) = \int_0^{\infty} F(x) dx + 2\text{re} \sum_{t=1}^{\infty} \int_0^x F(x) e^{2\pi i x} dx \quad (90.17)$$

and arises from the sum over l in this formula, whereas the averaged $\bar{\sigma}_{yy}$ comes from the first (integral) term.

We shall suppose that the oscillation amplitude is small in comparison with the averaged $\bar{\sigma}_{yy}$; this imposes a certain condition on the magnetic field strength (see (90.26)). It is then sufficient to take account of the oscillatory part in only one of the sums over n and n' in (90.16). Using the symmetry of a with respect to p_z and p'_z , and defining b by analogy with (90.15), we have

$$\tilde{\sigma}_{yy} = \frac{4}{B^2} \text{re} \sum_{t=1}^x \sum_{\sigma=1}^x \tilde{J}_{lr}, \quad (90.18)$$

where $\tilde{J}_{ks}$ is the oscillatory part of the integral

$$J_{hs} = - \int_0^{\infty} dn \int b(\epsilon_{ns}, p_z) \frac{\partial n_0(\epsilon_{ns})}{\partial \epsilon} \frac{\partial \epsilon_{ns}}{\partial n} e^{2\pi i m} dp_z$$

With $\epsilon(n, p_z)$ from (90.8) as a variable of integration in place of n , we integrate by parts with respect to ϵ (and can regard the slowly varying factor b as a constant). The integrated term does not give an oscillatory dependence on the field (and is only a small correction to $\bar{\sigma}_{yy}$); omitting it, we have

$$\bar{J}_{l\sigma} = 2\pi i l \int_0^x \int \frac{b(\epsilon, p_z)}{\exp[(\epsilon - \mu_{\sigma})/T] + 1} \frac{\partial n}{\partial \epsilon} dp_z d\epsilon \quad (90.19)$$

Here $\mu_{\sigma} = \mu - \sigma\beta\xi B$, and

$$n(\epsilon, p_z) = \frac{cS(\epsilon, p_z)}{2\pi e\hbar B} - \frac{1}{2} \quad (90.20)$$

(cf. (90.9)); in the argument of the function $b(\epsilon_{n\sigma}, p_z)$, the term $\beta\xi B$ has been neglected in comparison with the large quantity ϵ .

The integration over p_z in (90.19) is carried out in exactly the same way as that which occurred in SP 2 (63.8) in the study of the de Haas-van Alphen effect. The integral is governed by the ranges near the points $p_z = p_{z,ex}(\epsilon)$ at which $n(\epsilon, p_z)$ (i.e. the cross-sectional area S) has an extremum as a function of p_z . The result is

$$\tilde{J}_{t\sigma} = \sum_{ex} \int_0^\infty \frac{2\pi i \sqrt{l} \exp \{2\pi i l n_{ex} \pm (1/4)i\pi\} b_{ex}(\epsilon) \frac{dn_{ex}}{d\epsilon} d\epsilon}{\{\exp[(\epsilon - \mu_\sigma)/T] + 1\} |\partial^2 n / \partial p_z^2|_{ex}^{1/2}} \quad (90.21)$$

where

$$n_{cx}(\epsilon) = n(\epsilon, p_{z,ex}(\epsilon)), \quad b_{ex}(\epsilon) = b(\epsilon, p_{z,x}(\epsilon)),$$

and the $\pm$ signs in the exponent refer to the cases in which $p_{z,ex}$ is respectively a maximum or a minimum of $n(\epsilon, p_z)$; the summation is over all extrema.

The integral (90.21) in turn is exactly analogous to the integral SP 2 (63.9), differing only in the slowly varying factors b and $dn_{cx}/d\epsilon = cm_{cx}^*/e\hbar\bar{B}$ in the integrand; these factors, and $|\partial^2 n / \partial p_z^2|_{ex}^{-1/2}$, may be replaced by their values at $\epsilon = \mu$, i.e. on the Fermi surface. The integration over ϵ and the summation over σ then lead to the final result

$$\left. \begin{aligned} \tilde{\sigma}_{yr} &= \sum_{ex} \sum_{l=1}^\infty (-1)^l \sigma_{yy}^{(1)} \cos \left\{ l \frac{cS_{ex}}{e\hbar B} \pm \frac{1}{4}\pi \right\} \\ \sigma_{yy}^{(1)} &= \frac{2^{5/2} \pi^{1/2} (eh)^{1/2} b_{ex}}{c^{1/2} B^{3/2} l^{1/2}} \left| \frac{\partial^2 S}{\partial p_z^2} \right|_{ex}^{-1/2} \frac{\lambda_1}{\sinh \lambda_1} \cos(\pi l \xi_{ex} m_{ex}^*/m) \\ \lambda_1 &= 2\pi^2 |T/\hbar\omega_B, \quad \omega_B = eB/m_{cx}^* c \end{aligned} \right\} \quad (90.22)$$

where $S_{ex}, \xi_{ex}, m_{ex}^*$ and b_{cx} are taken at $\epsilon = \mu$ on the Fermi surface. [†]

If for a given direction of $\mathbf{B}$ there is only one extremal cross-section of the Fermi surface, there is proportionality between the oscillatory parts of the conductivity σ_{yy} and the longitudinal magnetic susceptibility. Comparison of (90.22) with SP 2 (63.13) gives

$$\tilde{\sigma}_{sy} = \frac{(2\pi)^4 \hbar^3 m_{ex}^* b_{ex}}{S_{ex}^2} \frac{\partial \tilde{M}_z}{\partial B} \quad (90.23)$$

The foregoing calculations presuppose that the oscillation amplitude of the conductivity is small in comparison with its averaged value. This requirement is indeed the condition for the whole theory in §§ 84 and 85 to be applicable; it is clear that the averaged values have real significance only if they form the major part of the conductivity tensor.

When $\hbar\omega_B \sim T$, the oscillation amplitude is determined by the leading terms in the sum in (90.22), with $I \sim 1, \lambda_1 \sim 1$. According to the definition in (90.15), the value of b_{ex} can be estimated as $b_{ex} \sim \bar{\sigma} B^2 / p_F$. The derivative $\partial^2 S / \partial p_\tau^2 \sim 1$. Hence we have the following estimate of the oscillation amplitude:

$$\tilde{\sigma} / \bar{\sigma} \sim (\hbar\omega_B / \epsilon_F)^{1/2}, \quad \hbar\omega_B \sim T. \quad (90.24)$$

This ratio is small, because of the obligatory condition (90.3).

If $T < \pi\omega_B$, however, the estimate is changed. The oscillation amplitude is then determined by the sum of a large number of terms in (90.22), having $\lambda_1 \sim 1$, i.e. $I \sim \hbar\omega_B / T \gg 1$. The number of such terms is of the order of I itself. In comparison with the previous estimate, we now have an additional factor $l^{1/2} l \sim (\hbar\omega_B / T)^{1/2}$, so

that

[†] The oscillations of the conductivity were discussed by A. I. Akhiezer (1939) and by B. I. Davydov and I. Ya. Pomeranchuk (1939) for a quadratic electron dispersion relation, and by A. M. Kosevich and V. V. Andreev (1960) for any dispersion relation.

$$\tilde{\sigma}/\bar{\sigma} \sim (\hbar\omega_B/\epsilon_F)^{1/2} (\hbar\omega_B/T)^{1/2} \quad (90.25)$$

The requirement that this ratio be small leads to the condition

$$\hbar\omega_B \ll (\epsilon_F T)^{1/2}. \quad (90.26)$$

PROBLEM

Determine the transverse conductivity of an electron gas with a quadratic dispersion relation ($\epsilon = p^2/2m$). The electrons are scattered isotropically by impurity atoms, with a cross-section that is Independent of the energy.

Solution. The problem amounts to the calculation of $b(p_z)$ in (90.15) and (90.23). With a quadratic dispersion relation, $p = mv$, and $\bar{p} = 0$ since the mean velocity along a closed trajectory is $\bar{v} = 0$; hence, by (90.12), $\kappa = cP_x/e$. According to the discussion in the text, when calculating the mean value of $(\kappa - \kappa')^2$ we can regard the scattering process as independent of the magnetic field. The difference between $\mathbf{P}$ and $\mathbf{p}$ is then unimportant: if the position of the scattering atom is taken as $\mathbf{r} = 0$, we have $\mathbf{P} = \mathbf{p}$.

In the case under consideration, the scattering probability has the form $d\sigma/d\Omega = \sigma_0/4\pi$, where $d\Omega$ is the solid-angle element for directions of the momentum $\mathbf{p}'$ after scattering, and σ_0 is the constant total scattering cross-section. This expression may be put in the equivalent form

$$(\sigma_0/4\pi m) dp'_2 d\varphi' \delta(\epsilon - \epsilon') d\epsilon'$$

where φ' is the azimuthal angle for the direction of $\mathbf{p}'$ in the xy -plane, and it here replaces (90.11). Similarly, we write the volume element in p -space as $d^3p \rightarrow m dp_x d\varphi d\epsilon$, and

$$p_x = (2m\epsilon - p_z^2)^{1/2} \cos \varphi.$$

We then find

$$a(\epsilon, p_2, p') = \frac{c^2 \sigma_0}{8\pi e^2} \int (p_x - p'_x)^2 \frac{d\varphi d\varphi'}{2\pi\hbar} = \frac{\sigma_0 c^2}{8e^2 \hbar} (4m\epsilon - p_2^2 - p_2'^2)$$

and

$$\begin{aligned} b(\epsilon, p_x) &= e^2 N_{1mp} \int_{-\sqrt{(2m\epsilon)}}^{\sqrt{(2m\epsilon)}} adp'_y (2\pi\hbar)^2 \\ &= \frac{c^2 \sqrt{(2m\epsilon)}}{16\pi^2 \hbar^2 I} \left(\frac{10}{3} m\epsilon - p_z^2 \right) \end{aligned}$$

where $l = 1/\sigma_0 N_{\text{imp}}$ is the mean free path.

The averaged conductivity is calculated from (90.15):

$$\bar{\sigma}_{yy} = c^2 p_r N / B^2 l,$$

where $N = p_r^3/3\pi^2 \hbar^3$ is the number density of electrons. The cross-sectional area of the Fermi sphere is greatest at $p_z = 0$, and $S_{\text{ex}} = \pi p_F^2$. Hence

$$b_{\text{ex}} = 5c^2 N / 16l$$

The oscillatory part of the conductivity is, from (90.23),

$$\tilde{\sigma}_{yy} = B^2 \bar{\sigma}_{yy} \frac{5}{6N\epsilon_F} \frac{\partial \tilde{M}_z}{\partial B}$$

That of the magnetization, $\tilde{M}_2$, for the model in question is given by SP 1(60.6).

17.11 X The Diagrammatic Technique for Non-equilibrium Systems by Landau

17.11.1 §91. The Matsubara susceptibility

The study of the behaviour of various systems in a weak alternating external field usually amounts to the calculation of the appropriate generalized susceptibilities. In this section we shall derive expressions relating the generalized susceptibility to an auxiliary quantity which may be calculated by means of the Matsubara diagram technique; this opens the way to the use of such a technique to study the transport properties of various systems (A. A. Abrikosov, I. E. Dzyaloshinskii and L. P. Gor'kov, 1962).

The generalized susceptibility $\alpha(\omega)$ is defined as follows (SP I, § I23). Let the external action on the system be described by the inclusion in the Hamiltonian of a perturbing operator

$$\hat{V}(t) = -\hat{x}f(t), \quad (91.1)$$

where $\hat{x}$ is the Schrödinger (time-independent) operator of some physical quantity describing the system, and the perturbing generalized force $f(t)$ is a given function of time; we assume that the mean value of x is zero in the absence of the external action. Then, in the first approximation with respect to f , there is a linear relation between the Fourier components of the mean value $\bar{x}(t)$ and the force $f(t)$, and the generalized susceptibility is the coefficient in this relation:

$$\bar{x}_\omega = \alpha(\omega)f_\omega. \quad (91.2)$$

According to the Kubo formula (SP 1, § 126), the function $\alpha(\omega)$ can be expressed in the operator form

$$\alpha(\omega) = i \int_0^x e^{\omega t} \langle \hat{x}_0(t)\hat{x}_0(0) - \hat{x}_0(0)\hat{x}_0(t) \rangle dt, \quad (91.3)$$

where $\hat{x}_0(t)$ is the Heisenberg operator defined in terms of the unperturbed Hamiltonian of the system (indicated by the subscript 0), and the averaging is over the specified unperturbed stationary state of the system, or over the Gibbs distribution with the unperturbed Hamiltonian.
†

Let us now consider, purely formally, a system obeying the "Matsubara" equations of motion, which differ from the actual equations by the change of the time $t \rightarrow -i\tau$; the new variable τ takes values in the finite range

$$-1/T \leq \tau \leq 1/T \quad (91.4)$$

Let this system be subjected to a perturbation

$$\hat{V}(\tau) = -\hat{x}f(\tau) \quad (91.5)$$

The mean value $\bar{x}$ will then also be a function of τ . We expand the function $f(\tau)$ in Fourier series on the range (91.4):

$$f(\tau) = \sum_{s=-\infty}^{\infty} f e^{-i\zeta_s \tau}, \quad \zeta_s = 2\pi sT, \quad (91.6)$$

and the function $\bar{x}(\tau)$ similarly. † The Matsubara susceptibility is defined as the coefficient of proportionality between the components of the two expansions:

¹† Throughout this chapter we take $\hbar = 1$.

$$\bar{x}_x = \alpha_M(\zeta s) f. \quad (91.7)$$

Our aim is now, firstly, to obtain for $\alpha_M(\zeta s)$ a formula analogous to (91.3) and, secondly, to find a relation between $\alpha_M(\zeta s)$ and the function $\alpha(\omega)$ which is sought.

For the first task, let $\hat{H}$ be the unperturbed Hamiltonian of the system. The "exact" Matsubara operator of x is calculated as $\ddagger$

$$\hat{x}^M(\tau) = \hat{\sigma}^{-1}(\tau, 0) \hat{x}_0^M(\tau) \hat{\sigma}(\tau, 0) \quad (91.8)$$

where $\hat{\sigma}$ is the Matsubara S -matrix:

$$\hat{\sigma}(\tau, 0) = \mathbf{T}_\tau \exp \left\{ - \int_0^\tau \hat{V}_0^M(\tau') d\tau' \right\} \quad (91.9)$$

and the subscript 0 denotes operators in the Matsubara "interaction representation":§

$$\hat{x}_0^M(\tau) = \exp(\tau \hat{H}_0) \hat{x} \exp(-\tau \hat{H}_0) \quad (91.10)$$

and similarly for $\hat{V}_0^M(\tau)$. In first-order perturbation theory, the expression (91.9) reduces to

$$\hat{\sigma}(\tau, 0) \approx \mathbf{I} - \int_0^\tau \hat{V}_0^M(\tau') d\tau' \quad (91.11)$$

The value averaged over the Gibbs distribution is

$$\bar{x}(\tau) = \text{tr} \left\{ e^{\hat{\mathbf{H}}/T} \hat{x}^M(\tau) \right\}. \quad (91.12)$$

According to SP 2 (38.6), we have

$$\begin{aligned} e^{-\hat{H}/r} &= e^{-\hat{H}_0/T} \hat{\sigma}(\mathbf{I}/T, 0) \\ &\approx e^{-\hat{H}_0/r} \left(1 - \int_0^{1/T} \hat{V}_0^M(\tau') d\tau' \right) \end{aligned}$$

and by (91.8) and (91.11)

$$\hat{x}^M(\tau) \approx \hat{x}_0^M(\tau) - \int_0^\tau \left\{ \hat{x}_0^M(\tau) \hat{V}_0^M(\tau') - \hat{V}_0^M(\tau') \hat{x}_0^M(\tau) \right\} d\tau'$$

Substitution of these expressions in (91.12) gives with the same accuracy

$$\begin{aligned} \bar{x}(\tau) = \text{tr} \left\{ e^{-\hat{H}_0/T} \left[\int_0^\tau \left[\hat{V}_0^M(\tau') \hat{x}_0^M(\tau) - \hat{x}_0^M(\tau) \hat{V}_0^M(\tau') \right] d\tau' \right. \right. \\ \left. \left. - \int_0^{1/T} \hat{V}_0^M(\tau') \hat{x}_0(\tau) d\tau' \right] \right\} \end{aligned}$$

In the first integral, the variable $\tau' < \tau$; in the second, we divide the range of integration into those from 0 to τ and from τ to $1/T$. After cancelling, and substituting for $\hat{V}_0(\tau)$ from (91.5), we see that the result may be written

¹† For x , which has a classical limit, we must use the technique corresponding to Bose statistics; the expansion (91.6) is then made in terms of "even frequencies" ζ_s .

‡ All the concepts and formulae used below may be found in SP 2, §38.

§ Formula (91.8) is valid even when the initial operator $\hat{V}(\tau)$ depends explicitly on τ , although this has not been implied in the derivation given in SP 2, § 38.

$$\bar{x}(\tau) = \int_0^{1/T} f(\tau') (T_\tau \hat{x}_0^M(\tau) \hat{x}_0^M(\tau')) d\tau' \quad (91.13)$$

the operator T_τ of chronological ordering with respect to τ places the factors in order of increasing τ from right to left, without changing the sign of the product. The averaging in (91.13) is over the Gibbs distribution with the Hamiltonian $\hat{H}_0$. The result of the averaging depends only on the difference $\tau - \tau'$. Finally, putting $f(\tau')$ in the form of the Fourier expansion (91.6), we obtain the required formula for the Matsubara susceptibility:

$$\alpha_M(\zeta_s) = \int_0^{1/T} e^{i\zeta_s \tau} (T_\tau \hat{x}_0^M(\tau) \hat{x}_0^M(0)) d\tau \quad (91.14)$$

We see that $\alpha_M(\zeta_s)$ is expressed in terms of the Fourier component of the Matsubara Green's function constructed from the operators $\hat{x}$; cf. the definition in SP 2 (37.2). Note the difference from formula (91.3) for $\alpha(\omega)$, which contains the retarded (with respect to the time t) commutator, not the chronological product.

To deal with the second part of the problem, that is, to find the relation between the functions $\alpha(\omega)$ and $\alpha_M(\zeta_s)$, we must start from (91.3) and (91.1), and express these functions in terms of the matrix elements of the operator $\hat{x}$. We shall not give the relevant calculations here, since they are practically identical with earlier similar ones (SP 1, § 126; SP 2, §§ 36, 37), but simply give the result:

$$\alpha(\omega) = \sum_{m,n} e^{-E_n/T} \frac{|x_{mn}|^2}{\omega - \omega_{mn} + i0} (1 - e^{-\omega_{mn}/T}) \quad (91.15)$$

$$\alpha_M(\zeta_s) = \sum_{m,n} e^{-E_n/T} \frac{|x_{mn}|^2}{i\zeta_s - \omega_{mn}} (1 - e^{-\omega_{mn}/T}) \quad (91.16)$$

Here the x_{mn} are the matrix elements of the Schrödinger operator $\hat{x}$ with respect to the stationary states of the system, and $\omega_{mn} = E_m - E_n$. Comparison of the two expressions shows that

$$\alpha_M(\zeta_s) = \alpha(i\zeta_s), \quad \zeta_s > 0 \quad (91.17)$$

Since the generalized susceptibility $\alpha(\omega)$ is real on the positive half of the imaginary ω -axis, the function $\alpha_M(\zeta_s)$ is real when $\zeta_s > 0$. It is seen from (91.16) that $\alpha_M(-\zeta_s) = \alpha_M^*(\zeta_s)$. Thus $\alpha_M(\zeta_s)$ is a real even function of ζ_s , expressed in terms of $\alpha(\omega)$ by

$$\alpha_M(\zeta_s) = \alpha(i|\zeta_s|) \quad (91.18)$$

This gives the required relation. To determine $\alpha(\omega)$, we must construct a function that is analytic in the upper half of the ω -plane, whose values at discrete points $\omega = i\zeta_s$ on the positive half of the imaginary axis are equal to $\alpha_M(\zeta_s)$; this will give the required generalized susceptibility.

In the next chapter, the above method will be applied to the transport properties of superconductors.

To conclude, we shall show that from $\alpha(\omega)$ we can find the relaxation formula for the quantity x reaching its equilibrium value $x = 0$. To do so, we shall suppose that the initial non-equilibrium value of x is produced by a generalized force $f(t)$ acting when $t < 0$ but not thereafter. The value of $x(t)$ at a time t is determined by the values of f throughout the preceding time:

$$x(t) = \int_{-x}^t \alpha(t-t') f(t') dt'$$

the function $\alpha(t)$ being related to the generalized susceptibility by the inverse Fourier transformation

$$\alpha(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \alpha(\omega) e^{-\omega t} d\omega / 2\pi$$

cf. SP 1, § 123. If $f = 0$ when $t > 0$, then

$$x(t) = \int_{-\infty}^0 \alpha(t-t') f(t') dt'$$

The behaviour of $x(t)$ for large t is determined by the asymptotic form of $\alpha(t)$ as $t \rightarrow \infty$. The latter in turn is determined by the singularity of $\alpha(\omega)$ that is in the lower half-plane and closest to the real axis. In particular, the relaxation of x by a simple exponential law $x \propto e^{-t/\tau}$ with relaxation time τ corresponds to a simple pole of $\alpha(\omega)$ at $\omega = -i/\tau$.

17.11.2 §92. Green's functions for a non-equilibrium system

Problems in physical kinetics always involve the consideration of non-equilibrium states. Nevertheless, the application of the method described in §91 allows, in some cases, the calculation of kinetic quantities to be reduced to that of Green's functions for systems in thermodynamic equilibrium, and this shows the possibility of using a diagram technique (e.g. the Matsubara) which is essentially applicable to equilibrium states. Of course, this possibility is always limited to physical problems relating to states not far from equilibrium.

We will now proceed to set up a diagram technique that is in principle suitable for calculating the Green's functions of systems in any non-equilibrium states. The equations then obtained for the Green's functions are similar to the transport equations as regards their significance. As applied to equilibrium systems, however, the same technique makes it possible to obtain the Green's functions and the generalized susceptibilities (at non-zero temperatures) as functions of continuous real frequencies directly, without any need for analytical continuation; for this reason it may prove, in complex cases, more useful than the Matsubara technique. †

Green's function for a non-equilibrium system is defined in the same way as in the equilibrium case:

$$\begin{aligned} iG_{\sigma_1\sigma_2}(X_1, X_2) &= \langle n | T \hat{\Psi}_{\sigma_1}(X_1) \hat{\Psi}_{\sigma_2}^+(X_2) | n \rangle \\ &= \begin{cases} \langle n | \hat{\Psi}_{\sigma_1}(X_1) \hat{\Psi}_{\sigma_2}^+(X_2) | n \rangle, & t_1 > t_2; \\ \mp \langle n | \hat{\Psi}_{\sigma_2}^+(X_2) \hat{\Psi}_{\sigma_1}(X_1) | n \rangle, & t_1 < t_2. \end{cases} \end{aligned} \quad (92.I)$$

The only difference is that the averaging (denoted by $\langle n | \dots | n \rangle$) is now taken over any quantum state of the system, and not necessarily over the stationary state as in the equilibrium case. ‡ The upper sign here and below refers to Fermi statistics, and the lower sign to Bose statistics; in the latter case (for a system of spinless particles) the spin suffixes σ_1, σ_2 must of course be omitted. In the case of Bose statistics it is assumed that there is no condensation. i.e. that the systems concerned either do not have a conserved number of particles (phonons

or photons), or are at temperatures above the point at which condensation begins. In an inhomogeneous non-equilibrium system, the function (92.1) depends on the pairs of

variables $X_1 = (t_1, r_1)$ and $X_2 = (t_2, r_2)$ separately, and not only on their difference $X_1 - X_2$ as in the equilibrium case.

The diagram technique should enable us to express the Green's function of a system of interacting particles in terms of the functions for an ideal gas. There is, however, a necessity to introduce other functions besides G . In order not to interrupt the subsequent analysis, the definitions and some properties of these functions will now be given.

For reasons which will appear in §93, it is appropriate to denote the function (92.1) by G^{--} : thus we write this definition in the form †

$$\begin{aligned} iG_{12}^{-} &= \langle T \hat{\Psi}_1 \hat{\Psi}_2^{+} \rangle \\ &= \begin{cases} \langle \hat{\Psi}_1 \hat{\Psi}_2^{+} \rangle, & t_1 > t_2; \\ -F \langle \hat{\Psi}_2^{+} \hat{\Psi}_1 \rangle, & t_1 < t_2 \end{cases} \end{aligned} \quad (92.2)$$

The definition

$$\begin{aligned} iG_{12}^{++} &= \langle \tilde{T} \hat{\Psi}_1 \hat{\Psi}_2^{+} \rangle \\ &= \begin{cases} \mp \langle \hat{\Psi}_2^{+} \hat{\Psi}_1 \rangle, & t_1 > t_2; \\ \langle \hat{\Psi}_1 \hat{\Psi}_2^{+} \rangle, & t_1 < t_2 \end{cases} \end{aligned} \quad (92.3)$$

differs from (92.2) in that T is replaced by $\tilde{T}$, which signifies that the operator factors are arranged in the reverse of chronological order, with decreasing time from right to left.

Two further functions are defined as the mean values of the products of Ψ -operators not in chronological order:

$$iG_{12}^{+} = \langle \hat{\Psi}_1 \hat{\Psi}_2^{+} \rangle, \quad iG_{12}^{+-} = \mp \langle \hat{\Psi}_2^{+} \hat{\Psi}_1 \rangle. \quad (92.4)$$

The difference in the signs in these definitions for Fermi systems is due to the general rule that there must be a change of sign when Ψ -operators are interchanged.

The second function (92.4) with $t_1 = t_2 \equiv t$ is the same as the one-particle density matrix; written in full,

$$\mp iG^{+-}(t, r_1; t, r_2) = \mathcal{N}p \left(t, \frac{r_1, r_2}{2} \right) \quad (92.5)$$

(cf. SP 2 (7.17), (31.4)). Here it does not matter from which side t_2 tends to the limit t_1 , since G^{+-} is continuous when $t_2 = t_1$. The value of iG^{+-} with $t_1 = t_2$ is related to that of iG^{-+} by

$$i \{ G^{+-}(t, r_1; t, r_2) - G^{-+}(t, r_1; t, r_2) \} = \delta(r_1 - r_2), \quad (92.6)$$

† This technique is due to L. V. Keldysh (1964). In some respects it resembles that developed by R. Mills (1962) for equilibrium states.

‡ The definition of G in SP 2, §36, for an equilibrium system with $T \neq 0$ also involved averaging over the Gibbs distribution. Let us here mention once more that, according to the fundamental principles of statistical physics, the result of a statistical averaging for an equilibrium system is independent of whether it is carried out with respect to the exact wave function of the stationary state of a closed system or by means of the Gibbs distribution for a system in a "thermostat". The only difference is that in the first case the result of the averaging is expressed in terms of the energy and number of particles in the system, and in the second case in terms of the temperature and the chemical potential.

which follows from the commutation rule for Fermi or Bose Ψ -operators.

The four G functions thus defined are not independent. They are linearly related in a way that is obvious from their definitions:

$$G^{-} + G^{++} = G^{-+} + G^{+-} \quad (92.7)$$

The functions G^{--} and G^{++} are also connected by the relation of "anti-Hermitian conjugacy" when their arguments are interchanged:

$$G_{12}^{-} = -G_{21}^{+*} \quad (92.8)$$

The functions $G^{\dagger}$ and $G^{\dagger-}$ are themselves anti-Hermitian:

$$G_{12}^{+} = -G_{21}^{-*}, \quad G_{12}^{+-} = -G_{21}^{+*}. \quad (92.9)$$

The relation between these functions and the retarded or advanced Green's function will be important in the following discussions. These latter functions are defined similarly to those in the equilibrium case (cf. SP 2, §36):

$$iG_{12}^R = \left\{ \begin{array}{ll} \langle \hat{\Psi}_1 \hat{\Psi}_2^{\pm} \pm \hat{\Psi}_2^{\pm} \hat{\Psi}_1 \rangle, & t_1 > t_2 \\ 0, & t_1 < t_2 \end{array} \right\} \quad (92.10)$$

$$iG_{12}^A = \left\{ \begin{array}{ll} 0, & t_1 > t_2 \\ -\langle \hat{\Psi}_1 \hat{\Psi}_2^{\pm} \pm \hat{\Psi}_2^{\pm} \hat{\Psi}_1 \rangle, & t_1 < t_2 \end{array} \right\}$$

These two are Hermitian conjugates:

$$G_{12}^{\hat{1}} = G_{21}^{R*}. \quad (92.11)$$

Direct comparison of the definitions (92.2)-(92.4) and (92.10) gives

$$\left. \begin{array}{l} G^R = G^{-1} - G^{-4} = G^{+-} - G^{++}, \\ G^A = G^{-} - G^{+-} = G^{-+} - G^{++}. \end{array} \right\} \quad (92.12)$$

In the steady state with spatial homogeneity, when all functions depend only on the differences $t = t_1 - t_2$ and $r = r_1 - r_2$, they can be Fourier-expanded with respect to these variables. From (92.8) and (92.11) the Fourier components satisfy the equations

$$G^{--}(\omega, \mathbf{p}) = -[G^{++}(\omega, \mathbf{p})]^*, \quad G^A(\omega, \mathbf{p}) = [G^R(\omega, \mathbf{p})]^* \quad (92.13)$$

and it follows from (92.9) that the Fourier components $G^{+}(\omega, \mathbf{p})$ and $G^{-+}(\omega, \mathbf{p})$ are imaginary.

For a system of non-interacting particles the function G^{--} satisfies the equation

$$\hat{G}_{01}^1 G_{12}^0 \dots = \delta(X_1 - X_2). \quad (92.14)$$

where $\hat{G}_0^{-1}$ denotes the differential operator

$$\hat{G}_0^{-1} = i \frac{\partial}{\partial t} - \epsilon(-i\nabla) + \mu = i \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\Delta}{2m} + \mu \quad (92.15)$$

$\epsilon(\mathbf{p}) = \mathbf{p}^2/2m$, and

¹†To lighten the notation, we shall regard the spin suffixes as included in the variables $X = (t, r, \sigma)$. Where no misunderstanding is possible, we shall also simplify by using suffixes to represent the arguments X : $\Psi_1 \equiv \Psi(X_1)$, $G_{12} \equiv G(X_1, X_2)$, etc. Lastly, the averaging will be denoted by $(\dots)$ simply, not by $\langle n | \dots | n \rangle$.

$$\delta(X_1 - X_2) = \delta_{\sigma_1\sigma_2} \delta(t_1 - t_2) \delta(r_1 - r_2); \quad (92.16)$$

the superscript (0) to G indicates that this function pertains to an ideal gas, and the suffix 1 to $\hat{G}_0^{-1}$ indicates that the differentiation is with respect to the variables t_1 and r_1 . The delta function on the right of (92.14) arises from the discontinuity of the function G^{--} at $t_1 = t_2$.[†] The functions G^R and G^A have a similar discontinuity, and therefore $G^{(0)R}$ and $G^{(0)A}$ satisfy a similar equation. The function G^{++} has a discontinuity of the opposite sign at $t_1 = t_2$, and therefore

$$\hat{G}_{01}^{-1} G_{12}^{(0)++} = -\delta(X_1 - X_2). \quad (92.17)$$

Lastly, the functions G^{+-} and G^{-+} are continuous at $t_1 = t_2$, and so, for an ideal gas, they satisfy the equations[‡]

$$\hat{G}_{01}^{-1} G_{12}^{(0)++} = 0, \quad \hat{G}_{01}^{-1} G_{12}^{(0)-+} = 0. \quad (92.18)$$

We shall calculate all G functions for a stationary homogeneous state of an ideal gas, with some (not necessarily the equilibrium) momentum distribution n_p of the particles. To simplify the formulae, we shall suppose that this distribution is independent of the spin. The spin dependence of the G functions (in Fermi statistics) then separates as a factor $\delta_{\sigma_1\sigma_2}$, and we shall omit this factor together with the spin suffixes.

The Ψ -operators for an ideal gas are written as ordinary expansions

$$\hat{\Psi}_0(t, r) = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} \sum_p \hat{a}_p \exp\{i[p \cdot r - \epsilon(p)t + \mu t]\} \quad (92.19)$$

and similarly for $\hat{\Psi}_0^+$; see SP 2 (9.3). When these expressions are substituted in the definitions of the G functions, it must be remembered that the only non-zero diagonal matrix elements are those of products of particle annihilation and creation operators with the same $\mathbf{p}$:

$$\langle \hat{a}_{\mathbf{p}}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}} \rangle = n_{\mathbf{p}}, \quad \langle \hat{a}_{\mathbf{p}} \hat{a}_{\mathbf{p}}^+ \rangle = I \mp n_{\mathbf{p}}$$

^tSee SP 2, §9. The derivation given there does not depend on the assumed averaging over the ground state of the system, and remains valid for averaging over any quantum state.

[‡] If the differentiation is with respect to the second, not the first, variables in the G functions, the sign of $i\epsilon$ must be changed, i.e. the operator $\hat{G}_{01}^{-1}$ must be replaced by $\hat{G}_{01}^{1*}$:

$$\hat{G}_{02}^{1*} G_{12}^{01} = \delta(X_1 - X_2), \quad (92.14a)$$

and so on,

Thus we find, for example,

$$G^{(0)-+}(t, \mathbf{r}) = \pm \frac{i}{\mathcal{V}} \int n_p \exp\{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - i\epsilon(\mathbf{p})t + i\mu t\} \frac{\mathcal{V} d^3p}{(2\pi)^3}$$

where $t = t_1 - t_2$, $r = r_1 - r_2$. With an identical transformation of this expression into

$$G^{(0)-+}(t, \mathbf{r}) = \pm 2\pi i \int n_p \exp(i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - i\omega t) \delta(\omega - \epsilon + \mu) d\omega d^3p / (2\pi)^4$$

we see that

$$G^{(0)-4}(\omega, \mathbf{p}) = \pm 2\pi i n_{\mathbf{p}} \delta(\omega - \epsilon + \mu) \quad (92.20)$$

Similarly,

$$G^{(0)+-}(\omega, \mathbf{p}) = -2\pi i (1 \mp n_p) \delta(\omega - \epsilon + \mu) \quad (92.21)$$

To calculate G^R , it is most convenient to start directly from the equation

$$\left[i \frac{\partial}{\partial t} - \epsilon(-i\nabla) + \mu \right] G^{(0)R}(t, \mathbf{r}) = \delta(t) \delta(\mathbf{r})$$

solve it by the Fourier method, and use the fact that $G^R(\omega, \mathbf{p})$ cannot singularity in the upper half of the ω -plane. This gives immediately

$$G^{(0)R}(\omega, \mathbf{p}) = [\omega - \epsilon(\mathbf{p}) + \mu + i0]^{-1} \quad (92.22)$$

the function $G^{(0)A}(\omega, p)$ is found from this, in accordance with (92.13), by simply taking the complex conjugate.

Lastly, (92.12) then gives

$$\begin{aligned} G^{(0)-}(\omega, \mathbf{p}) &= [\omega - \epsilon(\mathbf{p}) + \mu + i0]^{-1} \pm 2\pi i n_p \delta(\omega - \epsilon + \mu) \\ &= P \frac{1}{\omega - \epsilon + \mu} + i\pi (\pm 2n_p - 1) \delta(\omega - \epsilon + \mu) \end{aligned} \quad (92.23)$$

Note that (92.22) is independent of the properties of the state (i.e. of the distribution n_p) over which the averaging is carried out. This property of $G^{(0)R}$ (and of $G^{(0)A}$) is not in fact dependent on the homogeneity and stationarity of the state of the system, which were assumed in the derivation of (92.22): the function $G^{(0)R}(X_1, X_2)$ is necessarily dependent only on the difference $X_1 - X_2$.

For an equilibrium system, n_p in (92.21)-(92.23) is to be taken as the Fermi or Bose distribution function. The G functions are then expressed in terms of T and μ ; this achieves the change from averaging over a given stationary quantum state to averaging over the Gibbs distribution.

PROBLEM

Find Green's functions for a homogeneous stationary state of a phonon gas in a liquid, Solution. Similarly to the definitions (92.4), we have for the phonon field

$$iD'_1 = \langle \dot{\rho}'_1 \dot{\rho}'_2 \rangle, iD'_{12} = \langle \dot{\rho}'_1 \dot{\rho}'_2 \rangle, \quad (1)$$

where $\dot{\rho}' = \dot{\rho}''$ is the operator of the variable part of the density of the medium. Since this operator is self-conjugate, the functions (1) are related by

$$D_{12}^+ = D_{21} \quad (2)$$

and they of course again have the property (92.9).

For a gas of non-interacting phonons (see SP 2 (24,10)).

$$\ddot{\rho}' = \dot{\rho}'^* = \sum_k i \left(\frac{\rho_u k}{2u} V' \right)^{1m} (\dot{c}_k e^{ik} + n dt - i c' c, nk, nk!) \quad (3)$$

where p_0 is the unperturbed density and u the speed of sound. Substituting (3) in (1) and changing from summation to integration, we have

$$iD^{(0)} \cdot (t, \Gamma) - \frac{\rho_n}{2u} \int \left\{ \langle \dot{c}_k' \dot{c}_k \rangle e^{i(k \cdot r = ukr)} + \langle \dot{c}_k \dot{c}_k \rangle e^{t(k, rukl)} \right\} \frac{k d' k}{(2\pi)}$$

or, replacing the variable of integration k by $-k$ in the second term and expressing the mean values in terms of the occupation numbers N_L of the phonon states,

$$iD^{10!}(i, \Gamma) = \int \frac{\rho_0 k}{2u} \left\{ N_k e^{ukr} + (1 + N_k) e^{iukr} \right\} e^{ik \cdot r} \frac{d^3 k}{(2\pi)^3}$$

The integrand (without the factor $e^{j \cdot r}$) is the Fourier component with respect to the coordinates. Expansion with respect to time, also, gives

$$iD^{0'+-}(\omega, \hat{k}) = \frac{1}{u} \pi \rho_0 \dot{k} \left\{ N_k \delta(\omega - uk) + (1 + N_k) \delta(\omega + uk) \right\} \quad (4)$$

For the function $D^{[0]t}$ we have, according to (2),

$$D^{(0)*-}(\omega, k) = D^{(0)-}(-\omega, -k). \quad (5)$$

Two further Green's functions are defined by

$$iD_{12} = \langle T \hat{\rho}_1 \hat{\rho}_2' \rangle, \quad iD_{12}^* = \langle T \hat{\rho}_1' \hat{\rho}_2 \rangle, \quad (6)$$

with

$$D_{12}^- = D_{21}^-, \quad D_{12}^{+*} = D_{21}^{+*}. \quad (7)$$

For non-interacting phonons, a similar calculation gives (cf. SP 2. §31. Problem)

$$\begin{aligned} D^{(0)--}(\omega, k) &= - \left[D^{[0]++}(\omega, k) \right]^* \\ &= \frac{\rho_0 k}{2u} \left\{ \left[\frac{1}{\omega - uk + i0} - \frac{1}{\omega + uk - i0} \right] - 2\pi i [N_k \delta(\omega - uk) + N_{-k} \delta(\omega + uk)] \right\}. \end{aligned} \quad (8)$$

In accordance with (7), $D^{[0]-}(\omega, k) = D^{[0]-}(-\omega, -k)$.

It follows from (8) that in the coordinate representation the function $D^{(01--)}(t, r)$ satisfies the equation

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} - u^2 \Delta \right) D^{(0)-}(t, r) = \rho_0 \delta(t) \Delta \delta(r) \quad (9)$$

which replaces (92.14) for the Green's functions of ordinary particles.

17.11.3 §93. The diagram technique for non-equilibrium systems

The whole of the diagram technique is based on separating in the Hamiltonian of the system the interaction operator: $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$, where $\hat{H}_0$ is the Hamiltonian for a system of non-interacting particles. The diagram technique is a perturbation theory with respect to $\hat{V}$.

For a non-equilibrium system, the technique is constructed in the same way as in the equilibrium case with $T = 0$.† The Green's function $G \equiv G^-$ is expressed in terms of the Ψ -operators in the interaction representation (i.e. for an ideal gas) by

$$iG_{12}^- = \langle \hat{S}^{-1} T [\hat{\Psi}_{01} \hat{\Psi}_{02} \hat{S}] \rangle, \quad (93.1)$$

where

$$\hat{S} \equiv \hat{S}(\infty, -x) = T \exp \left(-i \int_{-x}^x \hat{V}_0(t) dt \right) \quad (93.2)$$

and $\hat{V}_U(t)$ is the operator $\hat{V}$ in the interaction representation. The averaging in (93.1) is over some state of the system of non-interacting particles. It will be convenient to assume that this is a stationary homogeneous state but not the ground state; we shall see later that the initial state can be eliminated, and the theory formulated so that the equations are independent of it. There is a difference here from the case $T = 0$, where the averaging is over the ground state. This difference is very important: the averaging is over the ground state. This difference is very important: the averaging of the operator $\hat{S}^{-1}$ cannot be separated from that of the other factors as in the derivation of SP 2 (I2.14) from (I2.12), because a non-ground state is not transformed into itself by the operator $\hat{S}^{-1}$, but into a superposition of other excited states, which may be intuitively regarded as the result of all possible processes of mutual scattering of quasi-particles. ‡

The expression (93.1) is to be expanded in powers of $\hat{V}$. It is convenient first to transform $\hat{S}^{-1}$, using the unitarity of $\hat{S}$ and the fact that the operator $\hat{V}$ is Hermitian:

$$\hat{S}^{-1} = \hat{S}^+ = \hat{T} \exp \left(i \int_{-x}^x \hat{V}(t) dt \right); \quad (93.3)$$

the symbol $\overline{T}$, which denotes anti-chronological ordering, has been defined in §92.

Expanding $\hat{S}$ and $\hat{S}^{-1}$ in series and substituting in (93.1), we obtain a sum of various terms, in each of which an averaging is to be performed by means of Wick's theorem, and a diagram is associated with each way of contracting the Ψ -operators in pairs. §

First of all, as in the "ordinary" diagram technique with $T = 0$, only the connected diagrams (not containing separate vacuum loops) need be considered. The vacuum loops cancel out, as is easily seen by examining the first few diagrams, which show the general principle involved.

If all the contractions that yield a connected diagram are made in the factor $T \hat{\Psi}_1 \hat{\Psi}_2^+ \hat{S}$ in (93.1), we obtain terms represented by the ordinary diagrams described in SP 2, §13, though of course with a different specific form for the functions corresponding to the continuous lines. These are diagrams in the coordinate representation; the change to the momentum representation is unsuitable for non-equilibrium states (when the G functions depend on the variables X_1 and X_2 separately). Other terms arise from contractions involving also Ψ -operators from $\hat{S}^{-1} = \hat{S}^+$. In each order of perturbation theory, they are obtained from the ordinary terms on replacing any factor $\hat{V}$ from $\hat{S}$ by a factor from $\hat{S}^+$. Such terms are represented by diagrams of the same graphical form but with a somewhat different rule for reading them. The changes result from three causes: (1) in $\hat{S}^+$ the interaction operators appear as $+i\hat{V}$, not $-i\hat{V}$ as in $\hat{S}$; (2) all the Ψ -operators in $\hat{S}^+$ are always to the left of the operators in the product $T_1 \hat{\Psi}_2^+ \hat{S}$; (3) within the factor $\hat{S}^+$, the operators are ordered as a $\tilde{T}$ (not T) product.

Let us now consider how these changes affect the construction of the diagram technique in the simple case of a system of particles (fermions, say) in an external field $U(t, r) \equiv U(X)$.

¹‡The following discussion is essentially based on that in SP 2, §§ I2 and I3.

‡ For the same reason, the diagram technique given in SP2, I2 and I3, is not in general applicable, even when $\mathbf{T} = \mathbf{0}$, for the case where alternating external fields are present (i.e. when $\hat{V}$ depends explicitly on the time even in the Schrödinger representation): the alternating fields excite the ground state of the system. It must be emphasized, however, that the technique described here is valid even when an alternating field is present.

§ In the macroscopic limit, the validity of Wick's theorem does not depend on the homogeneous stationary state over which the averaging is carried out; see SP 2, § I3, end.

The first-order terms in the expansion of the expression (93.1) are

$$\left\langle \vec{T} \hat{\Psi}_1 \hat{\Psi}_2^+ \left(-i \int \hat{\Psi}_3^+ U_3 \hat{\Psi}_3 d^4 X_3 \right) \right\rangle + \overbrace{\left\langle \vec{T} i \int \hat{\Psi}_3^+ U_3 \hat{\Psi}_3 d^4 X_3, T \hat{\Psi}_1 \hat{\Psi}_2^+ \right\rangle}^0.$$

The second term in this sum is characteristic of the situation in question; on averaging over the ground state, only the first term would have to be considered. In the first term, all four Ψ -operators are in the T product; their contractions in pairs according to

$$T \Psi_1 \sqrt{\Psi_2^+ (-j \Psi_3^+ u_3 \Psi_3)} \quad (93.4)$$

give factors $G_{32}^{(0) --}$ and $G_{13}^{(0) --}$. In the second term, the Ψ -operators contracted are not inutually ordered by T or $\tilde{T}$:

$$\tilde{T} (\Psi_3^+ U_3 \Psi_3) T (\Psi_1 \Psi_2^+) \quad (93.5)$$

their contractions give factors $G_{32}^{(0) +-}$ and $G_{13}^{(0) -\dagger}$; $+iU_3$ replaces $-iU_3$.

The graphical elements differ from those occurring in the ordinary diagram technique by having additional symbols $+$ or $-$ at the ends of the lines. Broken lines with $+$ or $-$ at one end (a vertex of the diagram) denote factors $+iU(X)$ or $-iU(X)$:

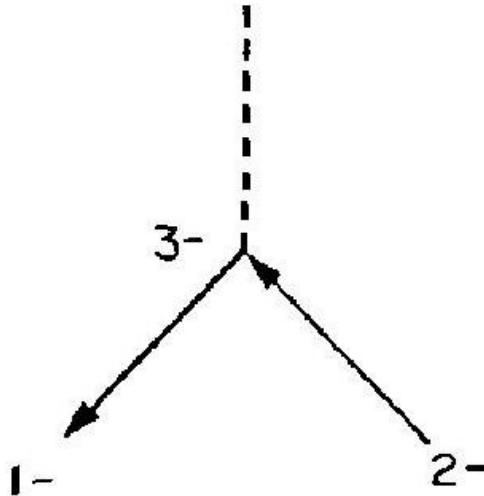
$$\cdots - \underset{+}{-} - \cdots = +iU(X), \quad - \cdots = -iU(X) \quad (93.6)$$

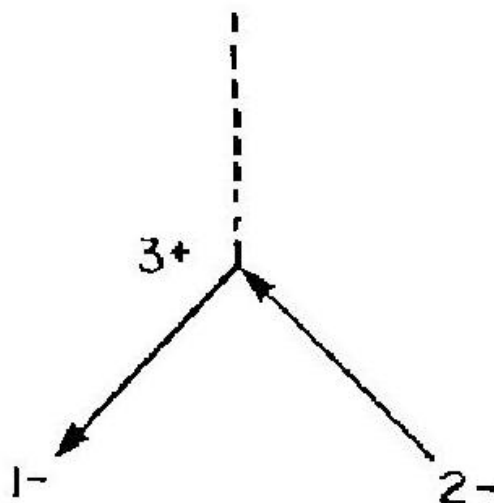
(cf. SP 2, § 19). Continuous lines with $+$ or $-$ at each end are associated with the various G functions:

$$\left. \begin{array}{l} 1^- \quad 2^- = 16_{12}^{101*}, \quad \frac{1^+}{2^-} = 16_{12}^{101+*} \\ 1^+ \quad 2^+ = 16_{12}^{101*}, \quad 2^+ \\ 2^+ \\ 6_{12}^{101} \end{array} \right\} \quad (93.7)$$

The numbers at the ends of the lines show the arguments of the functions (the variables X_1 and X_2).

The two terms (93.4) and (93.5) are then represented by the diagrams

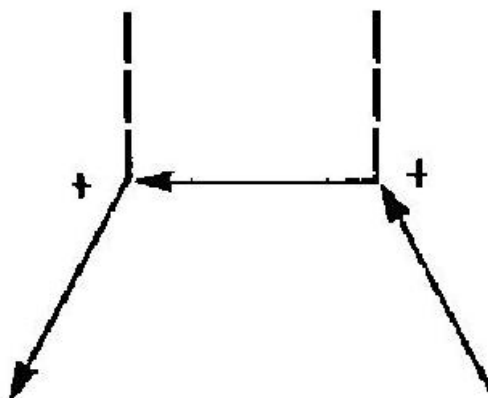
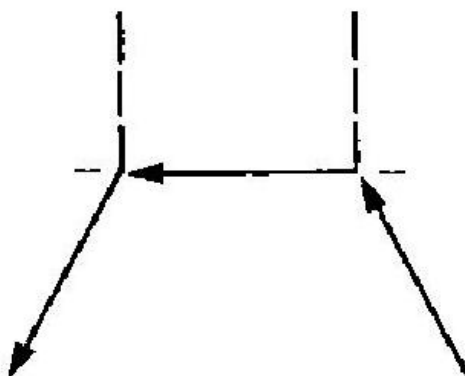




The two outer ends of the continuous lines are marked -, these being corrections to the functions G^{--} . Integration is implied with respect to the variables corresponding to the vertex of the diagram. † In analytical form,

$$iG_{12}^{(1) --} = \int \left\{ iG_{13}^{(1) --} iG_{32}^{(0) --} (-iU_3) + iG_{13}^{(0) -+} iG_{32}^{(0) +-} iU_3 \right\} d^4 X_3. \quad (93.9)$$

In the next (second) order of perturbation theory, the correction to the functions G is given by four diagrams:

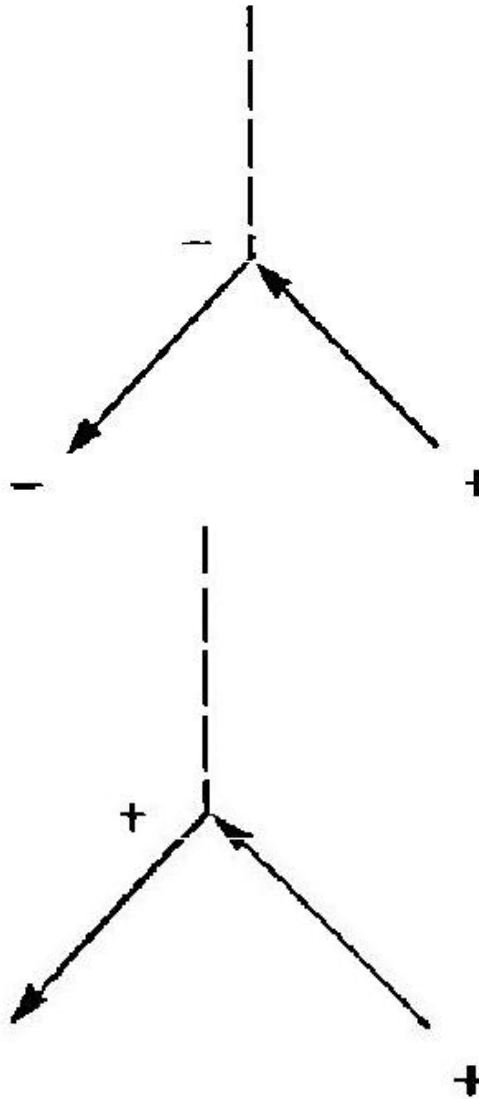


(the numerals are omitted). The signs + or - at each vertex of the diagram relate to the ends of all three of the lines that meet there. s, c^c

(93)

(93.10)

Similarly, the correction terms in the other G functions are represented by diagrams with other signs at the two outer ends of the continuous lines. For example, in the first order the function G^{++} has two diagrams:



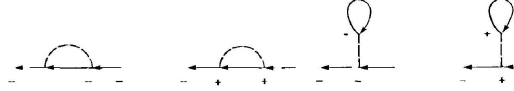
Thus the diagrams in the Keldysh technique are obtained from those in the ordinary technique by assigning additional indices $+$ or $-$ in all possible ways to their vertices and free ends. This rule remains valid in the diagram technique for other types of interaction.

For a system with a pair interaction between particles, in the ordinary diagram technique the interaction potential of two particles is associated with an internal broken line. We now assign to the ends of such a line a further pair of like signs $+$ or $-$:

^{1†} More precisely, integration over $dl d^3x$ and summation over a pair of like spin suffixes. The latter will be regarded here as included in the integration over d^4X .

$$\left. \begin{aligned} 1+2+ &= iU(X_1 - X_2) \equiv i\delta(t_1 - t_2)U(r_1 - r_2), \\ 1-2- &= -iU(X_1 - X_2). \end{aligned} \right\} \quad (93.12)$$

For example, the first-order correction to the functions G^- for a system with pair interaction is represented by a sum of four diagrams:



instead of the two diagrams SP 2 (13.13) in the ordinary technique. The continuous line forming a closed loop is again associated with a factor $N_0(\mu, T)$ (the ideal gas density) for either sign of the vertex.

It has already been mentioned that the Keldysh diagram technique is applicable also to equilibrium systems with $T \neq 0$. Let us suppose that there is no external field, and change from the coordinate to the momentum representation, expanding all G functions as Fourier integrals. Then each line in the diagrams is, as usual, assigned a definite 4-momentum, and the functions $U(Q)$ and $G^{(0)}(P)$ in the momentum representation are associated with these lines by the same rules.

When $T = 0$, the Fermi distribution function is

$$\begin{aligned} n_p &= 1 & \text{for } p < p_F \\ &= 0 & \text{for } p > p_F \end{aligned}$$

Hence, from (92.20) and (92.21), we have for a Fermi system with $T = 0$

$$G^{(0)-1}(P) = 0 \quad \text{for } p > p_F, \quad G^{(0)+-}(P) = 0 \quad \text{for } p < p_F,$$

and all the diagrams for G^{--} that contain "plus" vertices are identically zero. Thus the Keldysh diagram technique, as applied to equilibrium systems, becomes the ordinary diagram technique directly when $T = 0$, unlike the Matsubara technique.

17.11.4 §94. Self-energy functions

Like any "reasonable" diagram technique, the Keldysh technique allows the diagrams to be summed in "blocks". The most important of these are the selfenergy functions.

This concept arises (SP 2, § 14) in considering Green's function diagrams that cannot be divided into two parts joined only by one continuous line. We can separate the factors $iG^{(0)}$ corresponding to the two end lines of such a diagram and express it (in the coordinate representation as a function of the two arguments X_1 and X_2) in the form

$$\int iG_{13}^{(m)}(-i\Sigma_{14})iG_{42}^{(m1)}d^4X_3d^4X_4$$

The function $-i\Sigma_{34}$, which stands for the whole of the inner part of the diagram, is called a self-energy function. The exact self-energy function, denoted by $-i\Sigma$, is the sum of all possible diagrams of this type. In accordance with the fact that in this technique each vertex in the diagram has to be given the sign $+$ or $-$, there are four exact self-energy functions, corresponding to the signs of their "exit" and "entry" vertices: they are denoted by Σ , Σ^{++} , Σ^+ and Σ^{+-} .

The exact G functions are expressed in terms of the exact Σ functions by identities which may be written graphically for G as

$$\text{---} = \text{---} + \text{---} \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} \text{---}$$

and similarly for the other functions; the thick lines are exact G functions and the ovals Σ functions (cf. SP 2 (14.4)). In analytical form.

$$G_{12}^{--} = G_{12}^{(0)-} + \int \left\{ G_{14}^{(0)-} \Sigma_{43}^{--} G_{32}^{--} + G_{14}^{(0)-+} \Sigma_{43}^{++} G_{32}^{++} + G_{14}^{(0)-+} \Sigma_{43}^{+-} G_{32}^{--} + G_{14}^{(0)--} \Sigma_{43}^{+-} G_{32}^{+-} \right\} d^4 X_3 d^4 X_4 \quad (94.2)$$

with three more equations for the other G functions.

These equations may be compactly written by means of the matrices

$$G = \begin{pmatrix} G^{--} & G^{-+} \\ G^{+-} & G^{++} \end{pmatrix}, \quad \Sigma = \begin{pmatrix} \Sigma^{--} & \Sigma^{++} \\ \Sigma^{+-} & \Sigma^{+-} \end{pmatrix}. \quad (94.3)$$

Then the four equations such as (94.2) can be written jointly as one matrix equation

$$G_{12} = G_{12}^{(0)} + \int G_{14}^{(0)} \Sigma_{43} G_{32} d^4 X_3 d^4 X_4, \quad (94.4)$$

the factors in the integrand being combined by the rule of matrix multiplication.

The equations (92.14)-(92.18) satisfied by the ideal-gas G functions are similarly written jointly as

$$\hat{G}_{01}^{-1} G_{12}^{(0)} = \sigma_2 \delta(X_1 - X_2), \quad (94.5)$$

where $\dagger$

$$\sigma_I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Let us now return to (94.4) and apply the operator $\hat{G}_{01}^{-1}$ to each side. Using (94.5), we obtain a set of four integro-differential equations written jointly as one matrix equation:

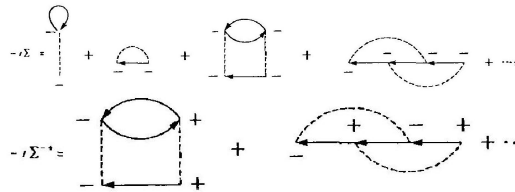
1

$$\hat{G}_{01}^{-1} G_{12} = \sigma_z \delta(X_1 - X_2) + \int \frac{d}{\sigma_z \Sigma_{13} G_{32}} d^4 X_3.$$

This equation may be written in an equivalent alternative way, by noting that in the diagram form (94.1) the thick lines may just as well be on the left instead of on the right. In (94.2), therefore, the factors in each term of the integrand may be written in the order $G_{14} \Sigma_{43} G_{32}^{(0)}$. By applying the operator $\hat{G}_{02}^{-1*}$ (see the last footnote to §92) to the resulting equations, we find

$$\hat{G}_{02}^{-1*} G_{12} = \sigma_z \delta(X_1 - X_2) + \int G_{13} \Sigma_{32} \sigma_z d^4 X_3. \quad (94.7)$$

The self-energy functions themselves can be expressed as a series of skeleton diagrams whose graphical elements are thick continuous lines corresponding to exact G functions. For example, in a system of particles with pair interaction,



and similarly for Σ^{++} and Σ^{+-} ; the further terms of the series contain diagrams with a larger number of broken lines. $\ddagger$ Thus the equation (94.4) or (94.7) constitutes a complete (though very complicated) set of equations for the exact G functions.

Equations (94.6) do not involve the functions $G^{(0)}$ which depend on the choice of the "zero" state of a system of non-interacting particles. Thus there is no depend-

ence on that choice. [†] But the occurrence of differential operators in the equations makes their solutions indefinite. This is manifested by the presence of the functions $G^{(0)}$ in the integral equations (94.4).

The set of equations (94.6) has, however, the disadvantage that it does not explicitly take account of the linear dependence of the G functions shown by (92.7). To avoid this disadvantage we must make a linear transformation of the matrix G in such a way that we can use (92.7) to reduce one of its elements to zero. This is done by means of the formula

$$G' = R^{-1}GR, \quad (94.10)$$

where

$$R = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}, \quad R^{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}.$$

It is easily seen that the transformed matrix is

$$G' = \begin{pmatrix} 0 & G^A \\ G^R & F \end{pmatrix}, \quad (94.11)$$

where

$$F = G^{++} + G^{--} = G^{+-} + G^{-+}. \quad (94.12)$$

When the matrices $G^{(0)}$ and Σ are transformed in this way, equation (94.4) remains invariant. The transformed matrix Σ is

$$\Sigma' = R^{-1}\Sigma R = \begin{pmatrix} \Omega & \Sigma^R \\ \Sigma^A & 0 \end{pmatrix}, \quad (94.13)$$

with the notation

$$\Omega = \Sigma^{--} + \Sigma^{++}, \quad \Sigma^R = \Sigma^{--} + \Sigma^{-+}, \quad \Sigma^A = \Sigma^{--} + \Sigma^{+-} \quad (94.14)$$

This may be proved by direct calculation, using the equation

$$\Sigma^{++} + \Sigma^{--} = -(\Sigma^{+-} + \Sigma^{-+}), \quad (94.15)$$

which follows from (92.7) and is easily derived by equating to zero the expression $\hat{G}_{01}^{-1}(G^{--} + G^{++} - G^{-+} - G^{+-})$ formed by means of equations (94.6).

Now expanding the transformed matrix equation (94.4), we obtain three equations. One of them is

$$G_{12}^A = G_{12}^{(0)A} + \int G_{14}^{(0)A} \Sigma_{43}^A G_{22}^A d^4 X_3 d^4 X_4 \quad (94.16)$$

[†] The symbol σ_2 , taken from the standard notation for the Pauli matrices, has of course no reference to spin here.

[‡] Cf. SP 2 (14.9), (14.10); all the diagrams of the first or second order listed there are among the skeleton diagrams (94.8).

¹ An important comment is needed here. When there is no external field, the functions G_0 depend only on the difference $X_1 - X_2$, and the functions G given by a series expansion in terms of the G_0 would have this property also. After the elimination of G_0 , however we can also consider solutions of (94.6) that depend on X_1 and X_2 separately.

The corresponding equation for G^R gives nothing new, since it is simply the Hermitian conjugate of (94.16). That equation, although it contains the function G^{014} pertaining to an ideal gas, does not depend on the "zero" state, since G^{014} does not do so, as noted in §92.

Lastly, the third equation derived from (94.4), for the function F , contains terms involving the function $F^{(0)}$, which does depend on the "zero" state. These, however, are reduced to zero by the differential operator $\hat{G}_{in}^{-1}$, since $\hat{G}_{01}^{-1}F^{(0)} = 0$. The resulting equation is

$$\hat{G}_{01}^{-1}F_{12} = \int \{ \Omega_{13}G_{12}^A + \Sigma_{13}^R F_{23} \} d^4X_3 \quad (94.17)$$

Equations (94.16) and (94.17) constitute a complete description in principle of the behaviour of a non-equilibrium system. The second of them is an integro-differential equation, and forms a generalization of the Boltzmann equation: here it should be remembered that by (92.5) and (92.6) the functions G^+ and G^- , and therefore F , are directly related to the particle distribution function in the system. The solution of (94.17) is arbitrary to the same extent as that of the transport equation. However, (94.16) is a purely integral equation and therefore brings no further arbitrariness into the solution.

There is nevertheless a fundamental feature of equations (94.16) and (94.17) by which they differ in general from the ordinary transport equation: they contain not one but two time variables, t_1 and t_2 . We shall show in §95 how this difference is removed in the quasi-classical case.

17.11.5 §95. The transport equation in the diagram technique

We shall use a simple example to show how the passage is made from equations of the type (94.16), (94.17) to the ordinary quasi-classical transport equation. Let us consider a slightly non-ideal Fermi gas at temperatures $T \sim \epsilon_F$, assuming the quasi-classicality conditions to be satisfied: the time intervals τ and distances L over which all quantities vary significantly satisfy the inequalities

$$\tau \epsilon_F \not\gg 1, L p_F \not\gg 1 \quad (95.1)$$

cf. §40. Although no new result is obtained in this case, of course, the analysis has some instructive features that will be useful in more complicated cases.

The quantized transport equation must determine the one-particle density matrix $\rho(t, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$.[†] To go to the quasi-classical case, it is appropriate to use the mixed

coordinate-momentum representation, taking a Fourier expansion with respect to $\boldsymbol{\xi} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ but retaining the coordinate dependence on $\mathbf{r} = \frac{1}{2}(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)$. Here $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r} + \frac{1}{2}\boldsymbol{\xi}$, $\mathbf{r}_2 = \mathbf{r} - \frac{1}{2}\boldsymbol{\xi}$, so that the Fourier transform is

$$\frac{1}{N}n(t, \mathbf{r}, \mathbf{p}) = \int e^{-i\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\xi}} \rho \left(t, \mathbf{r} + \frac{1}{2}\boldsymbol{\xi}, \mathbf{r} - \frac{1}{2}\boldsymbol{\xi} \right) d^2\xi \quad (95.2)$$

The inverse transform is

$$\rho(t, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{r}} \int e^{i\mathbf{p} \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)} n \left(t, \frac{1}{2}(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2), \mathbf{p} \right) \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \quad (95.3)$$

The integration of $n(t, \mathbf{r}, \mathbf{p})$ with respect to the coordinates gives the particle momentum distribution function, as is seen from the expression for this integral in terms of the original density matrix:

[†] As in §40, we assume that the electron distribution is independent of the spin, and omit the spin factor $\delta_{\sigma_1, \text{tr}}$ from ρ .

$$N_p = \int n(t, \mathbf{r}, \mathbf{p}) d^7x = \Re \int e^{-i\mathbf{p} \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}' - \mathbf{r}'')} \rho(t, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) d^3x_1 d^3x_2 \quad (95.4)$$

The integration with respect to momenta gives the coordinate distribution, i.e. the spatial number density of particles, as we again see from the expression in terms of the density matrix:

$$N(t, \mathbf{r}) = \int n(t, \mathbf{r}, \mathbf{p}) d^3p = v_\rho(t, \mathbf{r}, \mathbf{r}) \quad (95.5)$$

The function $n(t, \mathbf{r}, \mathbf{p})$ itself, in the general quantum case, cannot be regarded as the coordinate and momentum distribution function simultaneously: this would contradict the fundamental principles of quantum mechanics, and in any case the function $n(t, \mathbf{r}, \mathbf{p})$ defined by (95.2) is in general not even positive.

The function $n(t, \mathbf{r}, \mathbf{p})$ does, however, have the literal sense of a distribution function in the quasi-classical approximation. To see this, let us consider the operator of some physical quantity pertaining to an individual particle and depending on $\mathbf{r}$ and $\mathbf{p}$: $\hat{f} = f(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{p}}) = f(\mathbf{r}, -i\nabla)$.[†] By definition of the density matrix, the mean value of f is

$$\bar{f} = \int [\hat{f}_1 \rho(t, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)]_{\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_2 = \mathbf{r}} d^3x$$

where $\hat{f}_1$ acts on the variable $\mathbf{r}_1$. We substitute ρ in the form (95.3), and use the fact that with the conditions (95.1) n is a more slowly varying function of $\mathbf{r}_1$ than the factor $\exp(i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}_1)$. It is therefore sufficient to differentiate only the latter, which amounts to the change $-i\nabla_1 \rightarrow \mathbf{p}$. The expression for $\bar{f}$ then becomes

$$\bar{f} = \frac{1}{N} \int f(\mathbf{r}, \mathbf{p}) n(t, \mathbf{r}, \mathbf{p}) d^3x \frac{d^7p}{(2\pi)^3} \quad (95.6)$$

which (since f is arbitrary) corresponds exactly to the definition of the classical distribution function.

We will now obtain the equations for the Green's function $G^{-+}(X_1, X_2)$ which is, by (92.5), most closely related to the density matrix. We use for this function the "four-dimensional" mixed representation

$$G^{-+}(X, P) = \int e^{iP\Xi} G^{-+}\left(X + \frac{1}{2}\Xi, X - \frac{1}{2}\Xi\right) d^4\Xi \quad (95.7)$$

where $P = (\omega, \mathbf{p})$, $X = (t, \mathbf{r})$, $\Xi = (\xi_0, \boldsymbol{\xi})$, $t = \frac{1}{2}(t_1 + t_2)$, $\xi'_0 = t_1 - t_2$. Then

$$n(t, \mathbf{r}, \mathbf{p}) = -i \int G^{-+}(X, P) d\omega / 2\pi \quad (95.8)$$

-13

the integration over $d\omega/2\pi$ is equivalent to putting $\mathbf{t}_1 = \mathbf{t}_2$.

After these preliminary definitions, let us derive the transport equation. We take the $-+$ component of equations (94.6) and (94.7), and subtract term by term:

$$(\hat{G}_{02}^{-1*} - \hat{G}_{01}^{-1}) G_{12}^{-+} = - \int (\Sigma_{13}^- G_{32}^{-+} + \Sigma_{13}^{-+} G_{32}^{++} + G_{13}^{-+} \Sigma_{32}^{++} + G_{13}^{--} \Sigma_{32}^{-+}) d^4X_3. \quad (95.9)$$

The operator acting on the function G_{12}^{-+} on the left is

[†]We shall take the particular case where all the operators Γ are to the right of r . In the quasi-classical approximation, this is not an important point.

$$\begin{aligned}\hat{G}_{02}^{-L} * -\hat{G}_{01}^{-E} &= -i \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \frac{\partial}{\partial t_2} \right) - \frac{1}{2m} (\Delta_1 - \Delta_2) \\ &= -i \left(\frac{\partial}{\partial t} - \frac{i}{m} \nabla_{\mathbf{r}} \cdot \nabla_{\xi} \right).\end{aligned}$$

We now take Fourier components (95.7) on each side of (95.9) and put $t_1 = t_2$ (or, equivalently, integrate over $d\omega/2\pi$). Using (95.8), we find that the left-hand side of (95.9) becomes

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \frac{\partial n}{\partial \mathbf{r}}$$

which is the required form of the left-hand side of the transport equation for the distribution function $n(t, \mathbf{r}, \mathbf{p})$. The right-hand side of (95.9), after Fourier transformation, must therefore give the collision integral $C(n)$.

The change to Fourier components on the right-hand side must take account of the quasi-classicality conditions. The integral in (95.9) is a sum of terms of the form

$$\int \Sigma(X_1, X_3) G(X_3, X_2) d^4 X_3$$

We express the factors Σ and G as functions of the differences and averages of the "4-coordinates":

$$\int \Sigma \left(X_1 - X_3, \frac{1}{2} (X_1 + X_3) \right) G \left(X_3 - X_2, \frac{1}{2} (X_3 + X_2) \right) d^4 X_3$$

In the change to Fourier components with respect to the first arguments, the important ranges are $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_3|, |\mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_2| \sim 1/p$ for the coordinate differences, and $|t_1 - t_3|, |t_3 - t_2| \sim 1/\epsilon$ for the time differences. According to the conditions (95.1), Σ and G as functions of their second arguments vary only slightly in these ranges. We can therefore approximately replace those arguments by $X = \frac{1}{2} (X_1 + X_2)$:

$$\int \Sigma(X_1 - X_3, X) G(X_3 - X_2, X) d^4 X_3,$$

and can then take the Fourier representation for a given value of X . The right-hand side of (95.9) then becomes

$$\begin{aligned}C(n) &= - \int \{ \Sigma^{-+} (G^{--} + G^{++}) + (\Sigma^{--} + \Sigma^{++}) G^{-+} \} d\omega/2\pi \\ &= \int \{ -\Sigma^{-+} G^{+-} + \Sigma^{+-} G^{-+} \} d\omega/2\pi\end{aligned}\tag{95.10}$$

where all the functions in the integrand have the same arguments $(X, P) \equiv (\mathbf{t}, \mathbf{r}; \omega, \mathbf{p})$; in the second expression, we have used the relations (92.7) and (94.15).

Let us apply formula (95.10) to the model of an almost ideal Fermi gas discussed previously (SP 2, §§6 and 21). As there, we shall arbitrarily suppose that the potential $U(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ of the interaction between particles satisfies the condition for perturbation theory to be applicable; in the change to the real interaction (which does not satisfy this condition) it is sufficient to express the result in terms of the scattering amplitude.

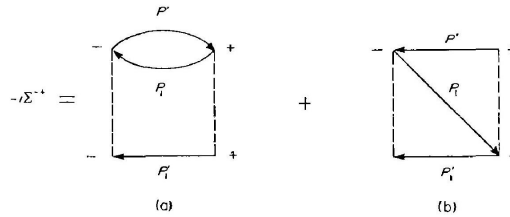
Having in view the determination of the collision integral in the first nonvanishing approximation of perturbation theory with regard to the particle interaction, we may suppose that the exact G functions in (95.10) are related to the distribution function n by the same formulae (92.20), (92.21) as in an ideal gas; this implies the neglect of small corrections, due to the

interaction, in the gas particle energy $\epsilon = p^2/2m$. [†] The expressions (92.20) and (92.21) relate, strictly speaking, to the homogeneous steady state of the gas, but, in the quasi-classical case, because of the slow variation of n with coordinates and time, we can use the same expressions with n_p regarded as a function $n(t, r, p)$, with t and r as parameters. The integration with respect to ω removes the delta functions, leaving

$$C(n) = i\Sigma^{-+}(\epsilon - \mu, \mathbf{p}; t, \mathbf{r})[1 - n(t, \mathbf{r}, \mathbf{p})] + i\Sigma^{+-}(\epsilon - \mu, \mathbf{p}; t, \mathbf{r})n(t, \mathbf{r}, \mathbf{p}). \quad (95.11)$$

It is clear from the form of this expression that the first term describes the "gain" of particles, possible only when $1 - n \neq 0$; the second describes the "loss", which is proportional to n . It remains to calculate the self-energy functions Σ^{-+} and Σ^{+-} .

The first non-vanishing contribution to these comes from the second-order diagrams (cf. (94.9)); for example,



where $P'_i = P + P_i - P'$. When U is replaced by U_0 (see below), the contributions to Σ from these two diagrams are related by $\Sigma_a = -2\Sigma_b$ (the minus sign comes from the closed loop in diagram (a), and the factor 2 from the spin summation in that loop; compare the analogous calculations in SP2, §21). Expanding diagram (b) in analytical form, we find

$$i\Sigma^{-+}(P) = \int G^{-+}(P') G^{+-}(P_1) G^{-+}(P'_1) U^2(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}') d^4 P_1 d^4 P' (2\pi)^8$$

In a degenerate gas, the particle wavelength ($\sim 1/p$) is necessarily large in comparison with the range of the interaction forces, because of the condition for the gas to be rarefied (see SP 2, §6); this enables us to replace $U(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}')$ by its value for $\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}' = 0$:

$$U_0 \equiv \int U(r) d^3 x$$

Substituting the expressions (92.20) and (92.21) for G^{-+} and G^{+-} , and eliminating the two delta functions by integration with respect to the "time" components of the 4-vectors P_1 and P' , we see that the first term in (95.11) in fact coincides with the "gain" term in the collision integral (74.5) ($w = 2\pi U_0^2$). The calculation of Σ^{+-} is similar, and the second term in (95.11) coincides with the "loss" term in the same collision integral.

17.12 XI Superconductors by Landau

17.12.1 §96. High-frequency properties of superconductors. General formula

Formulae have been derived in SP 2, §51, which relate the current in a superconductor to the vector potential of the electromagnetic field there. Here, these formulae will be generalized to case of a field varying in time. As in SP 2, the investigation will be based on the BCS model,

[†] This approximation enables us to neglect the remaining components of (94.6), i.e. to regard them as satisfied identically in the relevant approximation.

the electrons in a metal being regarded as an isotropic gas with a weak attraction between the particles. †

As always in metals (and the more so in superconductors), the displacement current may be neglected in Maxwell's equations:

$$\text{curl } \mathbf{H} = 4\pi\mathbf{j}/c. \quad (96.1)$$

Hence, in this approximation,

$$\text{div } \mathbf{j} = 0. \quad (96.2)$$

To describe the field, we choose the gauge in which the scalar potential $\varphi = 0$. The linear relation between the Fourier components (with respect to time and coordinates) of the current density and the vector potential of the field is written

$$j_\alpha(\omega, k) = -Q(\omega, k) (\delta_{\alpha\beta} - k_\alpha k_\beta / k^2) A_\beta(\omega, k) \quad (96.3)$$

which satisfies identically the equation (96.2), i.e. the condition $\mathbf{k} \cdot \mathbf{j}(\omega, \mathbf{k}) = 0$. The longitudinal part (parallel to $\mathbf{k}$) of the vector $\mathbf{A}$ does not appear in (96.3), nor therefore in the equations at all, so that it can be taken as zero, with the assumption that $\mathbf{k} \cdot \mathbf{A}(\omega, \mathbf{k}) = 0$. With this choice of $\mathbf{A}$, the relation between the current and the field reduces to

$$\mathbf{j}(\omega, \mathbf{k}) = -Q(\omega, \mathbf{k}) \mathbf{A}(\omega, \mathbf{k}). \quad (96.4)$$

Our object is to calculate the function $Q(\omega, \mathbf{k})$. This is a generalized susceptibility, and to solve the problem we use the method described in §91. We formally include in the Hamiltonian of the superconductor a "vector potential" that depends on the Matsubara variable τ (and on the coordinates): ‡

$$\mathbf{A}(\tau, \mathbf{r}) = \mathbf{A}(\zeta_s, \mathbf{k}) e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \zeta_s \tau)}, \quad \zeta_s = 2\pi s T \quad (96.5)$$

Using Gor'kov's equations, we calculate the correction linear in $\mathbf{A}$ to the Matsubara Green's function:

$$\mathcal{G}(\tau_1, \mathbf{r}_1; \tau_2, \mathbf{r}_2) = \mathcal{G}^{(0)}(\tau_1 - \tau_2, \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) + \mathcal{G}^{(1)}(\tau_1, \mathbf{r}_1; \tau_2, \mathbf{r}_2); \quad (96.6)$$

because of the "homogeneity in τ " and the spatial homogeneity of the unperturbed superconductor, $\mathcal{G}^{(0)}$ depends only on the differences of its arguments. The current density $\mathbf{j}(\tau, \mathbf{r})$ is expressed in terms of the Green's function by

$$\mathbf{j}(\tau, \mathbf{r}) = -\frac{ie}{m} [(\nabla' - \nabla) \mathcal{G}^{(1)}(\tau, \mathbf{r}; \tau', \mathbf{r}')]_{\mathbf{r}'=\mathbf{r}, \tau'=\tau+0} - \frac{e^2 N}{mc} \mathbf{A}(\tau, \mathbf{r}), \quad (96.7)$$

where N is the number density of particles. † With the field (96.5), this relation has in practice the form

$$\mathbf{j}(\tau, \mathbf{r}) = -Q_M(\zeta_s, \mathbf{k}) \mathbf{A}(\tau, \mathbf{r}) \quad (96.8)$$

The coefficient Q_M is the Matsubara susceptibility, and by (91.18)

$$Q(i|\zeta_s|, \mathbf{k}) = Q_M(\zeta_s, \mathbf{k}) \quad (96.9)$$

¹† The results in §§96 and 97 are due to J. Bardeen and D. C. Mattis (1958) and to A. A. Abrikosov, L. P. Gor'kov and I. M. Khalatnikov (1958).

‡ In this section we put $\hbar = 1$.

To determine the required function $Q(\omega, \mathbf{k})$, it is necessary to make an analytical continuation from the points $\omega = i|\zeta_s|$ to the whole of the upper half-plane.

The calculation of Q_M is similar to the calculations in SP 2, 51. In the potential gauge with $\text{div } \mathbf{A} = 0$, there is no correction to the gap Δ in the energy spectrum, and the linearized Gor'kov equations for the Green's functions $\mathcal{G}$ and $\overline{\mathcal{F}}$ are

$$\left. \begin{aligned} & \left[-\frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{\Delta}{2m} + \mu \right] \mathcal{G}^{(1)}(\tau, \mathbf{r}; \tau', \mathbf{r}') + \Delta \overline{\mathcal{F}}^{(1)}(\tau, \mathbf{r}; \tau', \mathbf{r}') \\ & \quad = -\frac{ie}{mc} \mathbf{A}(\tau, \mathbf{r}) \cdot \nabla \mathcal{G}^{(1)}(\tau - \tau', \mathbf{r} - \mathbf{r}') \\ & \left[\frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{\Delta}{2m} + \mu \right] \overline{\mathcal{F}}^{(1)}(\tau, \mathbf{r}; \tau', \mathbf{r}') - \Delta \mathcal{G}^{(1)}(\tau, \mathbf{r}; \tau', \mathbf{r}') \\ & \quad = \frac{ie}{mc} \mathbf{A}(\tau, \mathbf{r}) \cdot \nabla \overline{\mathcal{F}}^{(0)}(\tau - \tau', \mathbf{r} - \mathbf{r}') \end{aligned} \right\} \quad (96.10)$$

With a field of the form (96.5), we can at once separate the dependence of $\mathcal{G}^{(1)}$ and $\overline{\mathcal{F}}^{(1)}$ on the sums $\tau + \tau'$ and $\mathbf{r} + \mathbf{r}'$, putting

$$\mathcal{G}^{(1)} = g(\tau - \tau', \mathbf{r} - \mathbf{r}') \exp \left[\frac{1}{2} i k, (\mathbf{r} + \mathbf{r}') - \frac{1}{2} i \zeta_s (\tau + \tau') \right] \quad (96.11)$$

† Cf. SP 2 (51.17). In making comparisons with the formulae in SP 2, §51, it must be remembered that e is now a positive quantity, the unit charge.

and similarly for $\overline{\mathcal{F}}^{(1)}$ with f in place of g . After this change, the first equation (96.10), for example, becomes

$$\begin{aligned} & \left[-\left(\frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{1}{2} i \zeta_s \right) + \frac{\mathbf{I}}{2m} \left(\nabla + \frac{1}{2} \mathbf{k} \right)^2 + \mu \right] g + \Delta f \\ & = -\frac{ie}{mc} \mathbf{A}(\zeta_s, \mathbf{k}) \exp \left[\frac{1}{2} i \mathbf{k}, (\mathbf{r} - \mathbf{r}') - \frac{1}{2} i \zeta_s (\tau - \tau') \right] \cdot \nabla \mathcal{G}^{(0)}. \end{aligned}$$

We now expand all quantities in Fourier series with respect to $\tau - \tau'$ and Fourier integrals with respect to $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$:

$$g(\tau, \mathbf{r}) = T \sum_{s'=-\infty}^{\infty} \int g(\zeta'_s, \mathbf{p}) \exp [i \mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - i \zeta'_s \tau] d^3 p / (2\pi)^3 \quad (96.12)$$

and so on. We then obtain for the Fourier components a pair of algebraic equations:

$$\left. \begin{aligned} & \left[i \left(\zeta'_s + \frac{1}{2} \zeta_s \right) - \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} + \frac{1}{2} \mathbf{k} \right)^2 + \mu \right] g(\zeta'_s, \mathbf{p}) + \Delta f(\zeta'_s, \mathbf{p}) \\ & \quad = \frac{e}{mc} \mathbf{p} \cdot \mathbf{A}(\zeta_s, \mathbf{k}) \mathcal{G}^{(0)} \left(\zeta'_s - \frac{1}{2} \zeta_s, \mathbf{p} - \frac{1}{2} \mathbf{k} \right) \\ & \left[-i \left(\zeta'_s + \frac{1}{2} \zeta_s \right) - \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} + \frac{1}{2} \mathbf{k} \right)^2 + \mu \right] f(\zeta'_s, \mathbf{p}) - \Delta g(\zeta'_s, \mathbf{p}) \\ & \quad = -\frac{e}{mc} \mathbf{p} \cdot \mathbf{A}(\zeta_s, \mathbf{k}) \overline{\mathcal{F}}^{(0)} \left(\zeta'_s - \frac{1}{2} \zeta_s, \mathbf{p} - \frac{1}{2} \mathbf{k} \right) \end{aligned} \right\} \quad (96.13)$$

The "unperturbed" Green's functions $\mathcal{G}^{(0)}$ and $\overline{\mathcal{F}}^{(0)}$ are expanded in Fourier series with "odd frequencies" $(2s' + 1) \pi T$. It therefore follows from (96.13) that the "frequencies" ζ'_s take the values

$$\zeta'_s = (2s' + 1 - s) \pi T$$

The functions $\mathcal{G}^{(0)}$ and $\overline{\mathcal{F}}^{(0)}$ are (see SP 2 (42.7), (42.8))

$$\left. \begin{aligned} & \mathcal{G}^{(0)}(\zeta_s, \mathbf{p}) = - (i \zeta_s + \eta) / (\zeta_s^2 + \epsilon^2) \\ & \overline{\mathcal{F}}^{(0)}(\zeta_s, \mathbf{p}) = \Delta / (\zeta_s^2 + \epsilon^2) \end{aligned} \right\} \quad (96.14)$$

where

$$\eta = \frac{p^2}{2m} - \mu \approx v_F (p - p_F), \quad \epsilon^2 = \Delta^2 + \eta^2 \quad (96.15)$$

the constant Δ is assumed real. By using these formulae, we can easily put the solution of equations (96.13) in the form

$$g(\zeta'_s, p) = \frac{e}{mc} \mathbf{p} \cdot \mathbf{A}(\zeta_s, p) \left\{ \mathcal{G}^{(0)}(P_+) \mathcal{G}^{(0)}(P_-) + \overline{\mathcal{F}}^{(0)}(P_+) \overline{\mathcal{F}}^{(0)}(P_-) \right\} \quad (96.16)$$

where

$$P_{\pm} = \left(\zeta'_s \pm \frac{1}{2} \zeta_s, \mathbf{p} \pm \frac{1}{2} \mathbf{k} \right). \quad (96.17)$$

With (96.7), (96.11) and (96.12), we obtain for the current density

$$\mathbf{j}(\zeta_s, k) = -\frac{2eT}{m} \sum_{r'=-\infty}^{\infty} \int p g(\zeta'_{s'}, p) \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} - \frac{Ne^2}{mc} \mathbf{A}(\zeta_s, k),$$

g being given by (96.16). As the vectors $\mathbf{i}$ and $\mathbf{A}$ are transverse to $\mathbf{k}$, we average in the integrand over the directions of the vector $p_{\perp}$ in the plane perpendicular to k . The functions $\mathcal{G}^{(0)}$ and $\overline{\mathcal{F}}^{(0)}$ in (96.16) do not depend on the direction of $\mathbf{p}_1$; averaging of the factor $\mathbf{p}_1 (\mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{A})$ converts it to $Ap^2 \sin^2 \frac{1}{2} \theta$, where θ is the angle between $\mathbf{p}$ and $\mathbf{k}$. We thus have the following final expression for the Matsubara susceptibility:

$$Q_M(\zeta_s, \mathbf{k}) = \frac{Ne^2}{mc} + \frac{e^2 T}{m^2 c} \int \sum_{s'=-\infty}^x p^2 \sin^2 \theta \times \\ \times \left[\mathcal{G}^{(0)}(P_+) \mathcal{G}^{(0)}(P_-) + \overline{\mathcal{F}}^{(0)}(P_+) \overline{\mathcal{F}}^{(0)}(P_-) \right] d^3 p / (2\pi)^3 \quad (96.18)$$

Let us now make the analytical continuation of this function from the discrete series of points $\zeta_s = 2s\pi T$ to the whole of the right-hand half of the complex ζ -plane, i.e. to the upper half of the ω -plane ($\omega = i\zeta$). This amounts to the analytical continuation of the integrand in (96.18): let us consider its first term, for example:

$$\mathbf{J}_M(\zeta_s) \equiv T \sum_{s'=-\infty}^x \mathcal{G}_+ \left(\zeta'_{s'} + \frac{1}{2} \zeta_s \right) \mathcal{G}_- \left(\zeta'_{s'} - \frac{1}{2} \zeta_s \right) \\ = T \sum_{s'=-x}^x \mathcal{G}_+((2s'+1)\pi T) \mathcal{G}_-((2s'+1)\pi T - \zeta_s) \quad (96.19)$$

For brevity, we omit the index (0), and replace the arguments $\mathbf{p}_{\pm} = \mathbf{p} \pm \frac{1}{2} \mathbf{k}$ by suffixes $\pm$. This expression may be written as the integral

$$J_M(\zeta_s) = \frac{1}{4\pi i} \oint \mathcal{G}_+(z) \mathcal{G}_-(z - \zeta_s) \tan(z/2T) dz \quad (96.20)$$

taken along the three closed contours C_1, C_2 and C_3 in Fig. 32, which together enclose the infinite set of poles of the factor $\tan(z/2T)$ at the points $z = (2s'+1)\pi T$ (marked by strokes in the diagram). The residues of the integrand at each pole give corresponding terms in the sum (96.19); at infinity, $\mathcal{G}(z) \propto 1/z$, and the integral therefore converges. In choosing the contours, we have used the fact that $\mathcal{G}(z)$ is analytic in each of the two half-planes:

$$\mathcal{G}(z) = \begin{cases} G^R(iz), & \text{re } z > 0 \\ G^A(iz), & \text{re } z < 0 \end{cases}$$

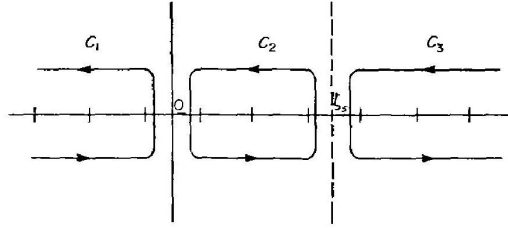


Fig. 32.

where G^R and G^A are analytic functions, the retarded and advanced Green's functions (see SP 2. §37); the imaginary z -axis is in general a cut for the function $\mathcal{G}(z)$.

We now rotate the contours so as to pass vertically on either side of the cuts $\text{re } z = 0$ and $\text{re } z = \zeta_s$ (Fig. 33; the infinitely distant parts which close the contours

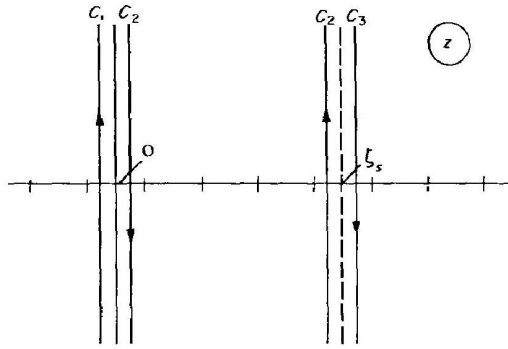


Fig. 33.

are not shown). On the pair of lines C_1, C_2 we change the variable of integration by putting $z = i\omega'$, and on C_2, C_3 we put $z - \zeta_s = i\omega'$. Then, when $\zeta_s > 0$,

$$J_M(\zeta_s) = -\frac{1}{4\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ \tan \frac{i\omega'}{2T} [G_+^R(\omega') - G_+^A(\omega')] G^A(\omega' - i\zeta_s) + \tan \frac{i\omega' + \zeta_s}{2T} [G_-^R(\omega') - G_-^A(\omega')] G_+^R(\omega' + i\zeta_s) \right\} d\omega' \quad (96.21)$$

In the derivation of this equation, ζ_s has been fixed as $2\pi sT$. For such values,

$$\tan \frac{i\omega' + \zeta_s}{2T} = \tan \frac{i\omega'}{2T} = i \tanh \frac{\omega'}{2T}.$$

The fact that the expression (96.21) is analytic for all $\zeta_s > 0$ is then evident from the fact that G^A and G^R are analytic in the corresponding half-planes. Now putting $i\zeta_s = \omega$, we have for the analytically continued function †

$$\begin{aligned}
J(\omega) &\equiv J_M(-i\omega) \\
&= -\frac{i}{4\pi} \int \tanh \frac{\omega'}{2T} \{ [G_+^R(\omega') - G_+^A(\omega')] G_-^A(\omega' - \omega) \\
&\quad + [G_-^R(\omega') - G_-^A(\omega')] G_+^R(\omega' + \omega) \} d\omega'
\end{aligned} \tag{96.22}$$

The second term in the integrand in (96.18) is analytically continued in a similar way, and the result differs from (96.22) only in that G^R and G^A are replaced by F^{+R} and F^{+A} .[‡] These functions are (see SP 2, § 41)

$$\begin{aligned}
G^R(\omega, \mathbf{p}) &= \frac{u_p^2}{\omega - \epsilon + i0} + \frac{v_p^2}{\omega + \epsilon + i0} \\
F^{+R}(\omega, \mathbf{p}) &= \frac{\Delta}{2\epsilon} \left[\frac{1}{\omega + \epsilon + i0} - \frac{1}{\omega - \epsilon + i0} \right]
\end{aligned} \tag{96.23}$$

where

$$\frac{u_p^2}{v_p^2} \Big\} = \frac{1}{2}(1 \pm \eta/\epsilon).$$

The functions G^A and F^{+A} are the same with the sign of $i0$ changed. Hence

$$\begin{aligned}
G^R - G^A &= 2\text{im}G^R = -\pi [u_p^2 \delta(\omega - \epsilon) + v_p^2 \delta(\omega + \epsilon)], \\
F^{+R} - F^{+A} &= (\pi\Delta/2\epsilon)[\delta(\omega - \epsilon) - \delta(\omega + \epsilon)],
\end{aligned}$$

and the integration in (96.22) amounts to the removal of the delta functions. After some simple but laborious algebra we arrive at the final expression§

$$\begin{aligned}
Q(\omega, \mathbf{k}) &= \frac{Ne^2}{mc} - \frac{e^2}{4m^2c} \int p^2 \sin^2 \theta \tanh \frac{\epsilon_+}{2T} \times \\
&\times \left\{ \left[1 + \frac{\eta + \eta_-}{\epsilon_+ \epsilon_-} \right] \left[\frac{1}{\epsilon_+ - \epsilon_- - \omega - i0} + \frac{1}{\epsilon_+ - \epsilon_- + \omega + i0} \right] \right. \\
&+ \left. \left[1 - \frac{\eta + \eta + \Delta^2}{\epsilon_+ \epsilon_-} \right] \left[\frac{1}{\epsilon_+ + \epsilon_- - \omega - i0} + \frac{1}{\epsilon_+ + \epsilon_- + \omega + i0} \right] \right\} \frac{d^3p}{(2\pi)^3}
\end{aligned} \tag{96.24}$$

[†] This method of analytical continuation is due to G.M. Éliashberg (1962).

[‡] The definition of the Green's function F^+ (corresponding to the temperature function $\overline{\mathcal{F}}$) is given in SP 2, §41. The definitions of F^{+R} and F^{+A} differ from that of F^+ in that the T product is replaced by the commutator, the relationship being similar to that between G^R, G^A and G . §Mention has been made (SP 2, §51) of the need for caution in calculating sums and integrals of the form (96.18), because of the slowness of decrease of the integrand. With the order of operations used here, this difficulty is avoided, as is confirmed by the fact that the final expression (96.24) satisfies the necessary condition: $Q = 0$ when $\Delta = 0$ and $\omega = 0$ (a normal metal in a static field); see the second footnote to §97.

where

$$\eta_{\pm} = \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} \pm \frac{1}{2}\mathbf{k} \right)^2 - \mu, \quad \epsilon_{\pm}^2 = \Delta^2 + \eta_{\pm}^2. \tag{96.25}$$

The two terms in the braces in (96.24) are quite different in origin and significance. The first is an odd function of p , and the integral of it is therefore zero for $T = 0$, when $\tanh(\epsilon_+/2T) = 1$. This part of Q is related to the collisionless dynamics of elementary excitations. Its imaginary part, which exists for all ω and $\mathbf{k}$, is related to the collisionless Landau damping.

The integral of the second term is not zero even when $T = 0$. This part of Q is related to the formation or break-up of Cooper pairs. The poles of the integrand in this part are at $\epsilon_+ + \epsilon_- = \pm\omega$. For them to exist (and so for there to be dissipation because Q has an imaginary part), the frequency must exceed 2Δ , the Cooper pair binding energy.

17.12.2 §97. High-frequency properties of superconductors. Limiting cases

Let us now examine the general formula (96.24). The number of limiting cases here is very large on account of the presence of four independent parameters $\hbar\omega$, $\hbar kv_F$, Δ and T , which can be in various relationships to one another. Several of these limiting cases will be considered.

When $\hbar\omega \gg \Delta$, the gap in the superconductor spectrum is unimportant. Putting $\Delta = 0$ in the first approximation, we should obtain the formula for the transverse permittivity of a normal electron Fermi gas; we shall not pause to give the relevant calculations. †

London case

Let us take the London limiting case, in which

$$\hbar kv_F \ll \Delta_0, \quad (97.1)$$

where Δ_0 is the value of $\Delta(T)$ when $T = 0$. We shall assume that $\Delta \leq T$, thus excluding the range of very low temperatures. The frequency will be regarded as small, in the sense that $\omega \leq kv_F$.

As $k \rightarrow 0$,

$$1 - \frac{\eta_+ \eta_- + \Delta^2}{\epsilon_+ \epsilon_-} \propto k^2.$$

The second term in the braces in (96.24) is therefore small, and may be neglected. In the first term, the first square bracket is equal to 2 ; since the second square

† The relation between $Q(\omega, k)$ and the transverse permittivity $\epsilon_1(\omega, k)$ is ascertained as follows. Expressing the current density in terms of the polarization vector by $-i\omega \mathbf{P} = \mathbf{j}$, and the vector potential A in terms of the electric field by $E = i\omega A/c$, we can rewrite (96.4) as $P = -c\omega^{-2}QE$. This shows that

$$-cQ/\omega^2 = (\epsilon_i - 1)/4\pi$$

bracket is an odd function of p , we can then write

$$Q(\omega, \mathbf{k}) = \frac{Ne^2}{mc} - \frac{e^2}{2m^2c} \int \left[\tanh \frac{\epsilon_+}{2T} - \tanh \frac{\epsilon_-}{2T} \right] \frac{p^2 \sin^2 \theta}{\epsilon_+ - \epsilon_- - \hbar\omega - i0} \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}$$

We have $\tanh(\epsilon/2T) = 1 - 2n_0(\epsilon)$, where

$$n_0 = \left[e^{\epsilon/T} + 1 \right]^{-1} \quad (97.2)$$

is the distribution function of elementary excitations in a superconducting Fermi gas (a Fermi distribution with zero chemical potential), and thus put

$$\begin{aligned} \tanh \frac{\epsilon_+}{2T} - \tanh \frac{\epsilon_-}{2T} &= 2[n_0(\epsilon_+) - n_0(\epsilon_-)] \\ &\approx -2\hbar k.v \partial n_0 / \partial \epsilon_1 \end{aligned}$$

where

$$\mathbf{v} = \partial\epsilon/\partial\mathbf{p} = \eta\mathbf{p}/m\epsilon$$

Then

$$Q(\omega, \mathbf{k}) = \frac{Ne^2}{mc} + \frac{e^2}{m^2c} \int \frac{\partial n_0}{\partial\epsilon} \frac{\mathbf{k} \cdot v p^2 \sin\theta}{\mathbf{k} \cdot v - \omega - i0} \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \quad (97.3)$$

When $\omega = 0$, this expression agrees, as it should, with the London value $N_s e^2/mc$, where $N_s(T)$ is the density of superconducting electrons. † We can therefore rewrite (97.3) in the equivalent form

$$Q(\omega, k) = \frac{N_s e^2}{mc} + \frac{\omega e^2}{m^2 c} \int \frac{\partial n_0}{\partial\epsilon} \frac{p^2 \sin^2\theta}{\mathbf{k} \cdot v - \omega - i0} \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \quad (97.4)$$

The second term in this expression represents the contribution to the permittivity from the elementary excitations in the Fermi gas. ‡

When $\omega \ll kv$, we may neglect ω in the denominator of the integrand in (97.4):

$$Q(\omega, \mathbf{k}) = \frac{N_s e^2}{mc} + \frac{\omega e^2}{4\pi^2 c \hbar^3 k} \int_{-1}^1 \frac{\sin^2\theta d\cos\theta}{\cos\theta - i0} \int \frac{\partial n_0}{\partial\epsilon} \frac{p^4}{m^2 v} dp \quad (97.5)$$

† This is easily shown by means of the formulae given in SP 2, §40, for the calculation of $\rho_s = mN_s$. The function $Q(0, k)$ tends to zero (as does N_s) when $T \rightarrow T_c$, as already mentioned in the last footnote to §96.

‡ This may be seen by comparing (97.4) with formula (2) in §31, Problem 2, for the transverse permittivity of a collisionless electron plasma. In making the comparison, it must be noted that the London case corresponds to the quasi-classical limit, so that the formula for a degenerate gas differs from that for a Maxwellian plasma only in the form of the distribution function and the dispersion relation $\epsilon(p)$.

The integral with respect to $\cos\theta$ is calculated from the residue at the pole $\cos\theta = i0$, and is equal to $i\pi$. The integral with respect to p , written as

$$\int \frac{\partial n_0}{\partial\epsilon} \frac{p^2 \epsilon}{\eta} d\eta$$

diverges logarithmically when $|\eta| \ll \Delta$. With a cut-off at $|\eta| \sim \omega\Delta/kv_F$ (where $kv \sim \omega$), we find with logarithmic accuracy

$$\left[\frac{\partial n_0}{\partial\epsilon} \right]_{\epsilon=1} p_F^2 \Delta \cdot 2 \int_{\omega\Delta/kv_F}^{\Delta} \frac{d\eta}{\eta}$$

Thus

$$Q(\omega, k) = \frac{N_s e^2}{mc} - i \frac{e^2 p_F^2 \Delta \omega \log(kv_F/\omega)}{2\pi c \hbar^3 T k (e^{\Delta/T} + 1) (e^{-\Delta/T} + 1)}. \quad (97.6)$$

The imaginary part of Q determines the dissipation; a negative sign of this part corresponds to a positive imaginary part of the permittivity.

The expression (97.6) becomes invalid when $T \rightarrow T_c$ and N_s and Δ tend to zero. The principal contribution to the integral with respect to p in (97.5) here comes from the range $\eta \sim T \gg \Delta$. and in it we may put $\Delta = 0$. The result is

$$Q(\omega, k) = -i \cdot \frac{3}{4} \pi \frac{N e^2}{mc} \frac{\omega}{kv_F}$$

where $N = p_F^3/3\pi^2\hbar^3$ is the electron density. This expression simply represents the anomalous skin effect in a normal metal, with the dispersion relation $\epsilon = p^2/2m$.¹

Pippard case

In a static magnetic field, the Pippard limiting case corresponds to the inequality

$$\hbar k v_F \gg \Delta_0 \sim T_c \quad (97.7)$$

To consider an alternating electromagnetic field, we add the further condition

$$k v_F \gg \omega. \quad (97.8)$$

The calculations in this case are considerably simplified by first subtracting from $Q(\omega, k)$ (96.24) its static value $Q(0, k)$; this is equivalent to omitting the constant term Ne^2/mc and subtracting from each term $(\epsilon_+ \pm \epsilon_- \pm \hbar\omega)^{-1}$ in the integrand a similar term with $\omega = 0$. The difference $Q(\omega, \mathbf{k}) - Q(0, \mathbf{k})$ is found to be proportional to $1/k$. The Pippard-case $Q(0, k)$ has a similar dependence on k :

$$Q(0, k) = \frac{c\beta}{4\pi k}, \quad \beta = \frac{4\pi Ne^2}{mc^2} \frac{3\pi^2}{4\hbar v_F} \Delta \tanh \frac{\Delta}{2T}; \quad (97.9)$$

see *SP2* (51.21). We can therefore write $Q(\omega, k)$ in the form

$$Q(\omega, \mathbf{k}) = \frac{c}{4\pi k} [\beta + \gamma(\omega)] \quad (97.10)$$

where $\gamma(\omega)$ is a function that may be calculated and is zero when $\omega = 0$. Because of this dependence on k , the formula *SP 2* (52.6) for the penetration depth δ remains valid, if we replace β by $\beta + \gamma(\omega)$. However, since $\gamma(\omega)$ is complex (see below), it is natural to use here not δ itself but the related surface impedance $\zeta(\omega) = -i\omega\delta/c$.

In the integral which gives the difference $Q(\omega, k) - Q(0, k)$, the important range is that of small values of $\cos\theta$, as in the calculation of $Q(0, k)$ in *SP2*, 51, and the integral converges rapidly as $\cos\theta$ increases; we can therefore put $\sin\theta = 1$, and extend the integration with respect to $\cos\theta$ from $-\infty$ to ∞ .

The integral is transformed by means of

$$d^3p = 2\pi p^2 dp d\cos\theta \approx 2\pi p_F^2 m d\eta d\cos\theta$$

($\eta = p^2/2m - \mu$), and new variables of integration are used:

$$x_1 = \epsilon_+/\Delta, \quad x_2 = \epsilon_-/\Delta.$$

We have

$$\eta_+ + \eta_- \approx 2\eta, \quad \eta_+ - \eta_- \approx \hbar k v_F \cos\theta.$$

The integration over $d\eta d\cos\theta$ can therefore be replaced by one over $d\eta_+ d\eta_-/k v_F$ from $-\infty$ to ∞ for each of the variables η_+ and η_- . All terms in the integrand which contain the product $\eta_+ \eta_-$ and are therefore odd functions of these variables then give zero on integration. We can then change to integration from 1 to ∞ with respect to each of the variables x_1 and x_2 , putting

$$\begin{aligned} d\eta d\cos\theta &\rightarrow 4 \frac{\epsilon_+ \epsilon_-}{\hbar k v_F \eta_+ \eta_-} d\epsilon_+ d\epsilon_- \\ &= \frac{4\Delta^2 x_1 x_2 dx_1 dx_2}{\hbar k v_F [(x_1^2 - 1)(x_2^2 - 1)]^{1/2}} \end{aligned}$$

¹tSee (86.16). In making the comparison, it is important that K in this case is independent of φ , and that Q relates $\mathbf{j}$ to A , not to E as σ does in (86.16).

These transformations lead to the result

$$\begin{aligned}\gamma(\omega) &= -3\pi \frac{Ne^2}{mc^2} \frac{\Delta}{\hbar v_F} J \\ J &= \int_1^\infty \int_1^\infty \frac{dx_1 dx_2}{[(x_1^2 - 1)(x_2^2 - 1)]^{1/2} \tanh \frac{x_1 \Delta}{2T}} \times \\ &\quad \times \left\{ (x_1 x_2 + 1) \left[\frac{1}{x_1 - x_2 - \bar{\omega} - i0} + \frac{1}{x_1 - x_2 + \bar{\omega} + i0} - \text{P} \frac{1}{x_1 - x_2} \right] \right. \\ &\quad \left. + (x_1 x_2 - 1) \left[\frac{1}{x_1 + x_2 - \bar{\omega} - i0} + \frac{1}{x_1 + x_2 + \bar{\omega} + i0} - \frac{2}{x_1 + x_2} \right] \right\} \quad (97.11)\end{aligned}$$

where $\bar{\omega} = \hbar\omega/\Delta$. We shall consider only the imaginary part of this expression, which determines the absorption of energy from the field.

The imaginary part of the integrands in (97.11) is separated by means of the rule (29.8), and the delta functions are then eliminated by integrating with respect to one variable x_1 or x_2 ; it is necessary here to verify that the point at which the argument of the delta function is zero does in fact lie in the range of integration. A simple calculation gives, when $\omega > 0$,

$$\begin{aligned}J'' \equiv \text{im } J &= \pi \int_1^\infty \frac{x(x + \bar{\omega}) + 1}{(x^2 - 1)^{1/2} [(x + \bar{\omega})^2 - 1]^{1/2}} \left[\tanh \frac{(x + \bar{\omega})\Delta}{2T} - \tanh \frac{x\Delta}{2T} \right] dx \\ &\quad + \pi \int_1^{\bar{\omega}-1} \frac{x(\bar{\omega} - x) - 1}{(x^2 - 1)^{1/2} [(x - \bar{\omega})^2 - 1]^{1/2}} \tanh \frac{x\Delta}{2T} dx \quad (97.12)\end{aligned}$$

the second term occurs only when $\bar{\omega} > 2$. Similarly, we can easily show that $J''(-\tilde{\omega}) = J''(\tilde{\omega})$. The integral (97.12) depends on two parameters Δ/T and $\hbar\omega/\Delta$, which may bear various relations to each other and to unity. Let us consider some of the possible limiting cases.

Let $\mathbf{T} = \mathbf{0}$. Then the first integral in (97.12) is zero; the second is non-zero when $\omega > 2\Delta_0$; that is, there is an absorption threshold at the binding energy of the Cooper pairs. The presence of this threshold, which is a direct result of the gap in the spectrum, is a specific property of a superconductor.

Near the threshold, when $\bar{\omega} - 2 \ll 1$, x is close to unity throughout the range of integration. Putting $\bar{\omega} - 2 = \delta$, $x - 1 = z\delta$, we find

$$J'' \approx \frac{1}{2}\pi\delta \int_0^1 \frac{dz}{\sqrt{[z(1-z)]}} = \frac{1}{2}\pi^2\delta = \pi^2 \left(\frac{1}{2}\tilde{\omega} - 1 \right)$$

Collecting the above formulae, we have the following expression for the imaginary part of Q at $T = 0$ near the absorption threshold:

$$Q'' = -\frac{3\pi^2 Ne^2}{4mc} \frac{\Delta_0}{\hbar v_F k} \left(\frac{\hbar\omega}{2\Delta_0} - 1 \right) \quad (97.13)$$

If the temperature is not zero, let us consider the case of low frequencies $\hbar\omega \ll \Delta$, and assume that $\Delta(T) \sim T$ (thus excluding both temperatures near zero and those near T_c). The second integral in (97.12) is then absent. In the first integral, the important range is $x - 1 \sim \bar{\omega} \ll 1$. Expanding the difference of two tanh in the integrand in powers of $\bar{\omega}$ and using the variable $x - 1 = u$, we find with logarithmic accuracy

$$J'' \approx \frac{\pi\hbar\omega}{2T} \cosh^{-2} \frac{\Delta}{2T} \int_0^{-1} \frac{du}{\sqrt{[u(u + \tilde{\omega})]}} = \frac{\pi\hbar\omega}{2T} \cosh^{-2} \frac{\Delta}{2T} \log \frac{\Delta}{\hbar\omega}$$

The result is then

$$Q'' = -\frac{3\pi}{8} \frac{Ne^2}{mc} \frac{\omega}{v_F k} \frac{\Delta}{T} \cosh^{-2} \frac{\Delta}{2T} \log \frac{\Delta}{\hbar\omega}. \quad (97.14)$$

17.12.3 §98. Thermal conductivity of superconductors

The physical nature of electronic thermal conduction in superconductors is similar to that of thermal conduction or viscosity in Bose superfluids. In both cases we are concerned with the transport coefficients of the normal component of a quantum liquid, which forms a set of elementary excitations therein. Here we shall consider this topic also in the BCS model (B. T. Geilikman 1958).

We start from the transport equation for the distribution function of quasiparticles in a superconductor where there is a temperature gradient:

$$\mathbf{v} \cdot \frac{\partial n}{\partial \mathbf{r}} - \frac{\partial \epsilon}{\partial \mathbf{r}} \cdot \frac{\partial n}{\partial \mathbf{p}} = C(n), \quad (98.1)$$

where $v = \partial \epsilon / \partial p$ is the quasi-particle velocity. The energy of a quasi-particle is

$$\epsilon = \left[v_F^2 (p - p_F)^2 + \Delta^2(T) \right]^{1/2} \quad (98.2)$$

and itself depends on the temperature through the energy gap $\Delta(T)$. Hence, when a temperature gradient is present, the energy ϵ also becomes a function of the coordinates, and $-\partial \epsilon / \partial \mathbf{r}$ represents the force acting on a quasi-particle. This is the source of the second term on the left of (98.1).

As usual, we put $n = n_0(\epsilon) + \delta n(\mathbf{r}, \mathbf{p})$, where

$$n_0(\epsilon) = (e^{\epsilon/T} + 1)^{-1} \quad (98.3)$$

is the equilibrium distribution function. Retaining only the terms in n_0 on the left, we have as the equation for n_0

$$v \cdot \frac{\partial n_0}{\partial \mathbf{r}} - \frac{\partial \epsilon}{\partial \mathbf{r}} \cdot \frac{\partial n_0}{\partial \mathbf{p}} = \left[\frac{\partial n_0}{\partial T} - \frac{\partial n_0}{\partial \epsilon} \frac{\partial \epsilon}{\partial T} \right] v \cdot \nabla T.$$

The difference of terms containing the derivative of Δ is zero in the square brackets, leaving

$$-\frac{\epsilon}{T} \frac{\partial n_0}{\partial \epsilon} v \cdot \nabla T = \frac{v \cdot \nabla T}{T^2} \frac{\epsilon}{(e^{\epsilon/T} + 1)(e^{-\epsilon/T} + 1)}$$

The collision integral depends on the quasi-particle scattering mechanism. We shall consider the case where the principal mechanism is elastic scattering by impurity atoms at rest, and assume this scattering to be isotropic. Then the collision integral reduces (cf. (11.3)) to

$$C(n) = -\nu \delta n,$$

where $\nu = v N_{\text{imp}} \sigma_t$ is the effective collision frequency, N_{imp} the number density of impurity atoms, and σ_t the transport cross-section for the scattering of a quasiparticle by an impurity atom. The latter quantity is a constant, of the order of atomic dimensions.

The transport equation thus becomes

$$\frac{\mathbf{v} \cdot \nabla T}{v} \frac{\epsilon}{T} \frac{\partial n_0}{\partial \epsilon} = \frac{\delta n}{l} \quad (98.4)$$

where $l = 1/N_{\text{imp}} \sigma_1$ is the constant mean free path.
The heat flux is calculated as the integral

$$q = \int \epsilon v \delta n \cdot 2d^3p / (2\pi\hbar)^3 \quad (98.5)$$

the factor 2 coming from the two directions of the quasi-particle spin. The distribution function $n = n_0 + \delta n$ is also related to the normal electric current in the superconductor, with density

$$\mathbf{j}_n = \mathbf{j} - \mathbf{j}_s = -\frac{e}{m} \int \mathbf{p} \delta n \frac{2d^3p}{(2\pi\hbar)^3} - e(N - N_s) v_s$$

in the model under consideration, $\mathbf{j} = -e\mathbf{i}/m$, with $\mathbf{i}$ given by (77.7). The thermal conductivity is defined in terms of the heat flux with $\mathbf{j} = 0$. In the present case, however, this condition does not call for any change in equation (98.4). The reason is that the total current density in the superconductor is $\mathbf{j} = \mathbf{j}_n + \mathbf{j}_s$, the sum of the normal and superconducting currents. The current $\mathbf{j}_n$ that occurs in the presence of a temperature gradient is automatically balanced (in an open circuit) by the superconducting current $\mathbf{j}_s = -\mathbf{j}_n$. An important point here is that the movement of superconducting electrons does not involve any transfer of heat. The equilibrium distribution function of quasi-particles against the "background" of the superfluid flow with velocity $v_s = -\mathbf{j}_s/eN_s$ differs from (98.3) in that ϵ is replaced by $\epsilon + \mathbf{p} \cdot \mathbf{v}_s$ (cf. §77); this change would also have to be made in the transport equation (98.1). The velocity v_s is proportional to $\mathbf{j}_n$, and therefore to the small gradient ∇T ; hence the above change would give rise only to second-order small terms on the left of the transport equation, and these would in any case have to be omitted in arriving at (98.4).

Substituting δn from (98.4) in (98.5), we find, after averaging over the directions of $\mathbf{p}$, the thermal conductivity

$$\kappa = -\frac{l}{3T} \int v \epsilon^2 \frac{\partial n_0}{\partial \epsilon} \frac{2.4\pi p^2 dp}{(2\pi\hbar)^3},$$

or, with $v dp = d\epsilon, p^2 \approx p_F^2$,

$$\kappa = -\frac{lp_F^2}{3\pi^2\hbar^3 T} \cdot 2 \int_{\Delta}^{\infty} \epsilon^2 \frac{\partial n_0}{\partial \epsilon} d\epsilon \quad (98.6)$$

Finally, after some obvious substitutions,

$$\kappa = \frac{2lp_F^2\Delta^3}{3\pi^2\hbar^3 T^2} \int_1^{\infty} \frac{u^2 du}{(e^{u\Delta/T} + 1)(e^{-u\Delta/T} + 1)} \quad (98.7)$$

When $T \rightarrow 0, \Delta \rightarrow \Delta_0$, the conductivity tends to zero:

$$\kappa = \frac{2lp_F^2\Delta^2}{3\pi^2\hbar^3 T} e^{-\Delta/T} \quad (98.8)$$

When $T \rightarrow T_c, \Delta \rightarrow 0$, it is seen from (98.6) to tend to the limit

$$\kappa = \frac{4lp_F^2 T}{3\pi^2\hbar^3} \int_0^{\infty} \epsilon n_0(\epsilon) d\epsilon = \frac{lp_F^2 T}{9\hbar^3}$$

corresponding to the case of a normal metal.

Part VII

Problems in Kinetics

Обсудим известные мне задачи по кинетике.

18 Problems about well-known phenomena

18.1 Problems about general models of kinetics, gases, liquids

18.1.1 Problems about Langevin equation and random processes

Белан.ВШЭл8.2 Коэффициент диффузии при $\langle \zeta(t_1) \zeta(t_2) \rangle \sim \exp\left(-\frac{|t_1-t_2|}{\tau_0}\right)$

Эволюция координаты и скорости частицы описывается парой уравнений

$$\begin{aligned}\dot{x}(t) &= v(t) \\ \dot{v}(t) &= -\gamma v(t) + \zeta(t)\end{aligned}$$

где для стохастического процесса $\zeta(t)$ справедливо $\langle \zeta(t) \rangle = 0$, $\langle \zeta(t_1) \zeta(t_2) \rangle = 2\frac{\kappa}{\tau_0} \exp\left(-\frac{|t_1-t_2|}{\tau_0}\right)$. Найдите коэффициент диффузии такой частицы.

Solution

(??? оказывается, не решил еще)

Белан.ВШЭл8.1 Диффузия на плоскости

Рассмотрим частицу, совершающую движение в плоскости с постоянной по модулю скоростью v_0 . Стохастическая динамика угла отклонения $\varphi(t)$ мгновенной скорости частицы $\vec{v}(t) = v_0(\cos \varphi(t), \sin \varphi(t))^T$ от направления оси x описывается уравнением

$$\frac{d\varphi(t)}{dt} = \xi(t)$$

где $\xi(t)$ - это Гауссов белый шум с нулевым средним $\langle \xi(t) \rangle = 0$ и парным коррелятором $\langle \xi(t_1) \xi(t_2) \rangle = 2\nu\delta(t_1 - t_2)$. Найдите время корреляции скорости и коэффициент диффузии такой частицы.

Solution

Коэффициент диффузии дается через коррелятор скоростей из формулы Грина-Кубо, сам коррелятор находим из определения, переписав его через вероятность положения частицы. Далее переход к функции Грина для уравнения диффузии, которое решаем методом Фурье, дает эту вероятность.

(??? про метод в теории напишу, важно знать, что такой метод есть.)

Согласно формуле Кубо-Грина, коэффициент диффузии равен

$$D = \frac{1}{2} \int_0^{+\infty} d\tau C(\tau)$$

где парную корреляционную функцию C найдем из определения.

Скорость частицы запишем как

$$\vec{v}(t) = (v_0 \cos \varphi(t), v_0 \sin \varphi(t))^T$$

поэтому

$$\begin{aligned} C(\tau) &\equiv \langle \vec{v}(0) \cdot \vec{v}(t) \rangle = v_0^2 \langle \cos \varphi(0) \cos \varphi(t) \rangle + \langle \sin \varphi(0) \sin \varphi(t) \rangle = \\ &= v_0^2 \langle \cos[\varphi(t) - \varphi(0)] \rangle = \\ &= v_0^2 \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi_1 d\varphi_2 P(\varphi_2, t; \varphi_1, 0) \cos(\varphi_2 - \varphi_1). \end{aligned}$$

Здесь $P(\varphi_2, t; \varphi_1, 0) \equiv \langle \delta(\varphi(t) - \varphi_2) \delta(\varphi(0) - \varphi_1) \rangle$ - это совместная функция распределения пары значений случайного угла $0 \leq \varphi(t) < 2\pi$ в моменты времени t и 0 .

Функция плотности вероятности, очевидно, может быть записана как

$$P(\varphi_2, t; \varphi_1, 0) = G(\varphi_2, t | \varphi_1, 0) p(\varphi_1; 0),$$

где $p(\varphi_1; 0) = \frac{1}{2\pi}$ - частная функция распределения случайного угла $\varphi(t)$ в момент времени 0 , а G - функция Грина уравнения диффузии на кольце, то есть решение начально-краевой задачи

$$\partial_t G(\varphi_2, t | \varphi_1, 0) = \nu \partial_{\varphi_2}^2 G(\varphi_2, t | \varphi_1, 0)$$

в области $0 \leq \varphi_2 < 2\pi$ с периодическим граничным условием $G(2\pi, t | \varphi_1, 0) = G(0, t | \varphi_1, 0)$ и дельта-функциональным начальным условием $G(\varphi_2, 0 | \varphi_1, 0) = \delta(\varphi_2 - \varphi_1)$.

(!?!?!?)

Разложим периодическую функцию $G(\varphi_2, t | \varphi_1, 0)$ в ряд Фурье при $\varphi_2 \in [2\pi]$:

$$G(\varphi_2, t | \varphi_1, 0) = \sum_{k=-\infty}^{+\infty} e^{ik\varphi_2} \tilde{n}(k; t)$$

где

$$\tilde{n}(k; t) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi_2 G(\varphi_2, t | \varphi_1, 0) e^{-ik\varphi_2}$$

Умножив $\partial_t G(\varphi_2, t | \varphi_1, 0) = \nu \partial_{\varphi_2}^2 G(\varphi_2, t | \varphi_1, 0)$ на $\frac{1}{2\pi} e^{-ik\varphi_2}$ и проинтегрируем по φ_2 от 0 до 2π , получаем ОДУ на эволюции коэффициентом ряда Фурье

$$\frac{d\tilde{n}(k; t)}{dt} = -\nu k^2 \tilde{n}(k; t).$$

(?? тут разве мы не просто подставляем функцию гринна через n и все? проверю потом.)

Решение имеет вид

$$\tilde{n}(k; t) = \tilde{n}(0; t) e^{-\nu k^2 t} = \frac{1}{2\pi} e^{-ik\varphi_1 - \nu k^2 t},$$

где мы учли начальное условие $\tilde{n}(0; t) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi_2 \delta(\varphi_2 - \varphi_1) e^{-ik\varphi_2} = \frac{1}{2\pi} e^{-ik\varphi_1}$.

Подставим $\tilde{n}(k; t)$ в разложение функции Грина в ряд Фурье, получим

$$G(\varphi_2, t | \varphi_1, 0) = \frac{1}{2\pi} + \frac{1}{\pi} \sum_{k=1}^{+\infty} e^{-\nu k^2 t} \cos[k(\varphi_2 - \varphi_1)]$$

В итоге, подставляем в коррелятор скоростей:

$$\begin{aligned} C(\tau) &= \frac{v_0^2}{2\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi_1 d\varphi_2 \cos(\varphi_2 - \varphi_1) \left(\frac{1}{2\pi} + \frac{1}{\pi} \sum_{k=1}^{+\infty} e^{-\nu k^2 t} \cos[k(\varphi_2 - \varphi_1)] \right) = \\ &= \frac{v_0^2}{2\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi'_1 d\varphi'_2 \cos \varphi'_2 \left(\frac{1}{2\pi} + \frac{1}{\pi} \sum_{k=1}^{+\infty} e^{-\nu k^2 t} \cos[k\varphi'_2] \right) = \\ &= \frac{v_0^2}{\pi} e^{-\nu t} \int_0^{2\pi} d\varphi'_2 \cos^2 \varphi'_2 = v_0^2 e^{-\nu t} \end{aligned}$$

Отсюда коэффициент диффузии

$$D = \int_0^{\infty} e^{-\nu t} v_0^2 / 2 = \frac{v_0^2}{2\nu}$$

Белан-?.3

Стохастическая динамика координаты частицы подчиняется уравнению

$$\frac{d^2x(t)}{dt^2} = \xi(t)$$

где $\xi(t)$ - это Гауссов белый шум с нулевым средним значением $\langle \xi(t) \rangle = 0$ и парным коррелятором $\langle \xi(t_1) \xi(t_2) \rangle = 2\kappa \delta(t_1 - t_2)$. Воспользовавшись методом характеристической функции, найдите плотность распределения координаты частицы $n(x; t)$ в момент времени t , если $x(0) = 0, \dot{x}(0) = 0$.

Белан-?.4

Броуновская частица в режиме сильного трения находится в поле внешней силы, причем потенциальная энергия частицы как функция координаты имеет вид

$$U(x) = \left(-\frac{1}{5} \left(\frac{x}{L} \right)^5 + \frac{5}{3} \left(\frac{x}{L} \right)^3 - 4 \frac{x}{L} \right) U_0.$$

Предполагая, что $U_0 \gg k_B T$, где T - температура среды, найдите при помощи формулы Крамерса математическое ожидание времени, которое потребуется частице, чтобы убежать из ямы, если в нулевой момент времени частица находилась в точке $x = -2L$.

Белан-?.5

Рассмотрим одномерное броуновское движение на интервале $(-\infty, L]$ в потенциале $U(x) = U_0|x|$ (где $U_0 > 0$) при температуре T . Стенка в точке $x = L$ является для частицы поглощающей. Используя обратное уравнение Фоккера-Планка, найдите среднее время жизни частицы $\langle \tau \rangle$, если она стартует в точке $x = 0$.

Колоколов-? Средние и асимптотики простейшего уравнения Ланжевена (???)

Рассмотрим броуновскую частицу, динамика которой подчиняется стохастическому уравнению

$$\frac{d\vec{v}}{dt} = -\gamma\vec{v} + \vec{\xi}, \quad \frac{d\vec{r}}{dt} = \vec{v}$$

где ξ имеет свойства:

$$\langle \xi_i \rangle = 0, \quad \langle \xi_i(t_1) \xi_j(t_2) \rangle = 2\gamma^2 D \delta_{ij} \delta(t_1 - t_2)$$

Solution**Колоколов-? Корреляторы (???)**

Предполагая $\vec{r}(0) = 0$ и $\vec{v}(0) = 0$, вычислите следующие статистические моменты

$$\langle v_i(t) \rangle, \quad \langle v_i(t) v_j(t) \rangle, \quad \langle r_i(t) \rangle, \quad \langle r_i(t) r_j(t) \rangle, \quad \langle \xi_i(t) r_j(t) \rangle, \quad \langle \xi_i(t) v_j(t) \rangle, \quad \langle r_i(t) v_j(t) \rangle$$

Найдите асимптотическое поведение полученных величин при

$$\text{a) } t \ll \gamma^{-1} \quad \text{b) } t \gg \gamma^{-1}.$$

Колоколов-? Найти $\langle x(t)^2 \rangle$ для $\dot{x} = x\xi$

Динамика переменной x описывается уравнением

$$\dot{x} = x\xi$$

с начальным условием $x(0) = x_0 > 0$.

Найдите среднее $\langle x(t)^2 \rangle$, если для случайной величины ξ справедливо

$$\langle \xi(t_1) \xi(t_2) \rangle = 2D \delta(t_1 - t_2)$$

Solution**Колоколов-? Найти $\langle x(t)^2 \rangle$ для $\dot{x} = x + x\xi$** Динамика переменной x описывается уравнением

$$\dot{x} = x + x\xi$$

с начальным условием $x(0) = x_0 > 0$.Найдите среднее $\langle x(t)^2 \rangle$, если для случайной величины ξ справедливо

$$\langle \xi(t_1) \xi(t_2) \rangle = 2D\delta(t_1 - t_2)$$

Solution**Колоколов-? Найти $\langle \sin[x(t)]\xi(t) \rangle$ для $\dot{x} = \xi$** Динамика переменной x описывается уравнением

$$\dot{x} = \xi$$

где для случайной величины ξ справедливо

$$\langle \xi(t_1) \xi(t_2) \rangle = 2D\delta(t_1 - t_2)$$

Найдите среднее

$$\langle \sin[x(t)]\xi(t) \rangle$$

Solution**Колоколов-? функция плотности вероятности для $\dot{x} = x\xi$** Динамика переменной x описывается уравнением

$$\dot{x} = x\xi$$

с начальным условием $x(0) = x_0 > 0$. Для случайной величины ξ справедливо

$$\langle \xi(t_1) \xi(t_2) \rangle = 2D\delta(t_1 - t_2)$$

Найдите функцию плотности вероятности $\rho(x, t) = \langle \delta(x - x(t)) \rangle_\xi$ **Solution****Колоколов-?.6 средние квадрат и куб смещения для $\dot{x} = \xi$** Динамика переменной x описывается уравнением

$$\dot{x} = \xi$$

с начальным условием $x(0) = 0$.**Solution****Колоколов-? Еще корреляторы**Для случайной величины ξ справедливо

$$\langle \xi(t_1) \xi(t_2) \rangle = \frac{2D}{\tau} \exp\left(-\frac{|t_1 - t_2|}{\tau}\right)$$

Найдите средние

$$\langle x(t)^2 \rangle, \quad \langle x(t)^3 \rangle$$

Solution

БРМ-1 среднеквадратичное смещение $R(t)$ в уравнении Ланжевена

Используя флуктуационно-диссипационную теорему, найти среднеквадратичное смещение $R(t)$ частицы массой $m = 1$, одномерное движение которой в термодинамически равновесной среде с температурой T подчиняется уравнению Ланжевена

$$\ddot{x}(t) + \gamma \dot{x}(t) = f(t),$$

где $\gamma > 0$ - коэффициент трения, связанный с подвижностью $\mu = 1/\gamma$, и $f(t)$ - случайная сила.

БРМ-3.1.

Найдем α_R с помощью перехода к фурье-представлению

$$x(t) = \int_{-\infty}^{\infty} x(\omega) e^{-i\omega t} \frac{d\omega}{2\pi} \quad \text{и} \quad f(t) = \int_{-\infty}^{\infty} f(\omega) e^{-i\omega t} \frac{d\omega}{2\pi}$$

Согласно уравнению движения имеем

$$(-\omega^2 - i\gamma\omega) x(\omega) = f(\omega) \quad \text{и} \quad \alpha_R(\omega) x(\omega) = f(\omega)$$

Отсюда получим

$$\alpha_R(\omega) = -\frac{1}{(\omega + i\delta)(\omega + i\gamma)}$$

Здесь мы добавили бесконечно малую величину $\delta = +0$ к множителю ω в знаменателе, чтобы обеспечить аналитичность запаздывающего отклика в верхней полуплоскости Π^+ . Выполняя обратное преобразование Фурье, найдем

$$\alpha_R(t) = - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-i\omega t}}{(\omega + i\delta)(\omega + i\gamma)} \frac{d\omega}{2\pi} \Bigg|_{\delta=+0} = \frac{1 - e - \gamma t}{\gamma} \vartheta(t)$$

Пусть сила $f(t)$ - случайная величина. Рассмотрим среднее смещение частицы или коррелятор первого порядка

$$\langle x(t) \rangle = \left\langle \int \alpha_R(t - \tau) f(\tau) d\tau \right\rangle = \int \alpha_R(t - \tau) \langle f(\tau) \rangle d\tau$$

где $\langle \dots \rangle$ означает усреднение по случайному распределению силы $f(t)$. Обычно удобно считать, что $\langle f(t) \rangle = 0$ и тогда $\langle x(t) \rangle = 0$.

Перейдем к коррелятору смещений второго порядка $G(t_2, t_1) = \langle x(t_2) x(t_1) \rangle$

$$G(t_2, t_1) = \iint \alpha_R(t_2 - \tau_2) \alpha_R(t_1 - \tau_1) \langle f(\tau_2) f(\tau_1) \rangle d\tau_2 d\tau_1$$

и зададим временной коррелятор силы $K(\tau_2, \tau_1) = \langle f(\tau_2) f(\tau_1) \rangle$. Обычно рассматривают однородную временную корреляцию, зависящую только от разности времен $K(\tau_2, \tau_1) = K(\tau_2 - \tau_1)$, что приводит к $G(t_2, t_1) = G(t_2 - t_1)$. Фурье-компонента коррелятора смещений или спектральная плотность коррелятора определяется формулой

$$G(\omega) \equiv \langle x(t)x(0) \rangle_\omega = \int \langle x(t)x(0) \rangle e^{i\omega t} dt$$

и как фурье-образ свертки сводится к произведению фурье-компонент

$$\langle x(t)x(0) \rangle_\omega = \alpha_R(\omega) \alpha_R(-\omega) K(\omega) = |\alpha_R(\omega)|^2 K(\omega)$$

где $K(\omega)$ - фурье-образ или спектральная плотность коррелятора силы $K(\tau)$.

В термодинамически равновесной среде имеется однозначная связь между функцией линейного отклика или восприимчивостью с коррелятором случайной силы, которая может выражена с помощью флуктуационно-диссипационной теоремы, согласно

$$K(\omega) = \frac{\hbar \alpha_R''(\omega)}{|\alpha_R(\omega)|^2} \coth \frac{\hbar \omega}{2T} = \text{Im} \left(\frac{1}{\alpha_R} \right) \hbar \coth \frac{\hbar \omega}{2T}$$

где $\alpha_R''(\omega)$ - мнимая часть функции отклика $\alpha_R = \alpha_R' + i\alpha_R''$. Это дает для фурье-компоненты или спектральной плотности коррелятора случайной силы следующее выражение:

$$K(\omega) = \gamma \hbar \omega \operatorname{cth} \frac{\hbar \omega}{2T} = \begin{cases} 2\gamma T, & \text{классический предел, } \hbar = 0, \\ \gamma \hbar |\omega|, & \text{квантовый предел, } T = 0. \end{cases}$$

Во временном представлении коррелятор силы $K(t)$ равен

$$K(t) = \begin{cases} 2\gamma T \delta(t), & \text{классический предел, } \hbar = 0, \\ -\gamma \hbar / (\pi t^2), & \text{квантовый предел, } T = 0 \end{cases}$$

и случайная сила оказывается некоррелированной в классическом пределе и коррелированной в квантовом пределе.

Рассмотрим среднеквадратичное смещение $R^2(t)$, определенное как среднее

$$\begin{aligned} R^2(t) &= \langle (x(t) - x(0))^2 \rangle = \langle x^2(t) \rangle - 2\langle x(t)x(0) \rangle + \langle x(0)x(0) \rangle = \\ &= 2[\langle x(0)x(0) \rangle - \langle x(t)x(0) \rangle] = 2[G(0) - G(t)] \end{aligned}$$

Пользуясь тем, что

$$G(t) = \int \langle x(t)x(0) \rangle_{\omega} e^{-i\omega t} \frac{d\omega}{2\pi} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \hbar \alpha''_R(\omega) \operatorname{cth} \frac{\hbar \omega}{2T} e^{-i\omega t}$$

найдем среднеквадратичное смещение

$$R^2(t) = 2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{\hbar \gamma \omega}{\omega^2 + \gamma^2} \operatorname{cth} \frac{\hbar \omega}{2T} \frac{1 - e^{-i\omega t}}{\omega^2 + \delta^2} = 2 \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \frac{\hbar \gamma}{\omega^2 + \gamma^2} \operatorname{cth} \frac{\hbar \omega}{2T} \frac{1 - \cos \omega t}{\omega}.$$

В первом интеграле можно перейти к пределу $\delta = 0$, поскольку числитель в дроби при $\omega \rightarrow 0$ пропорционален ω^2 и точка $\omega = 0$ в знаменателе становится неособой.

Отметим, что в задаче имеются три параметра времени: текущее время t , время свободного пробега $\tau_0 = \gamma^{-1}$, и обратная температура $\hbar/T$. Рассмотрим сначала предельные случаи. Начнем с классического предела $\hbar = 0$. Вычисляя второй интеграл

$$\int_0^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \frac{2\gamma T}{\omega^2 + \gamma^2} \frac{1 - \cos \omega t}{\omega^2} = \lim_{\delta \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{2\gamma T}{\omega^2 + \gamma^2} \frac{1 - \cos \omega t}{\omega^2 + \delta^2}$$

с помощью теории вычетов и переходя к пределу $\delta \rightarrow 0$, находим

$$R_{\text{кл}}^2(t) = \frac{2T}{\gamma} \left(t - \frac{1 - e^{-\gamma t}}{\gamma} \right) = \begin{cases} Tt^2 = v_T^2 t^2, & t \ll \tau_0 = \gamma^{-1} \\ \frac{2T}{\gamma} t = 2Dt, & t \gg \tau_0 = \gamma^{-1} \end{cases}$$

На малых временах $t \ll \tau_0$ движение частицы имеет вид свободного бесстолкновительного движения $R(t) \sim v_T t$ со средней тепловой скоростью v_T . На больших временах после нескольких столкновений движение частицы становится диффузионным $R(t) \sim \sqrt{t}$. Коэффициент диффузии D и подвижность $\mu = \gamma^{-1}$ связаны между собой соотношением Эйнштейна $D = T\mu$.

Проанализируем теперь квантовый предел или случай нулевой температуры $T = 0$. Среднеквадратичное смещение равно

$$R^2(t) = 2 \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \frac{\hbar \gamma}{\omega^2 + \gamma^2} \frac{1 - \cos \omega t}{\omega} = \frac{2\hbar}{\pi \gamma} \int_0^{\infty} \frac{dx}{1 + x^2} \frac{1 - \cos(\gamma t x)}{x}$$

Ответ нетрудно оценить, согласно

$$R^2(t) \sim \frac{2\hbar}{\pi \gamma} \int_0^{(\gamma t)^{-1}} dx \frac{\gamma^2 t^2 x}{2(1 + x^2)} + \frac{2\hbar}{\pi \gamma} \int_{(\gamma t)^{-1}}^{\infty} \frac{dx}{1 + x^2} \frac{1}{x}$$

Здесь мы учли, что в области $x \lesssim (\gamma t)^{-1}$ можно разложить косинус, а в области $x \gtrsim (\gamma t)^{-1}$ косинус не дает существенного вклада в интеграл в силу его быстрых осцилляций. Отсюда имеем

$$R^2(t) \sim \frac{\hbar}{\pi \gamma} \left[\frac{\gamma^2 t^2}{2} \ln \left(1 + \frac{1}{\gamma^2 t^2} \right) + \ln (1 + \gamma^2 t^2) \right] \approx \begin{cases} \frac{\hbar \gamma t^2}{\pi} \ln \frac{1}{\gamma t}, & \gamma t \ll 1 \\ \frac{2\hbar}{\pi \gamma} \ln(\gamma t), & \gamma t \gg 1 \end{cases}$$

Точное значение среднеквадратичного смещения дается формулой

$$R^2(t) = \frac{2\hbar}{\pi \gamma} \left(\ln(\gamma t) + C - \frac{e^{-\gamma t} \operatorname{Ei}(\gamma t) + e^{\gamma t} \operatorname{Ei}(-\gamma t)}{2} \right), \quad C = 0,577 \dots$$

где $\operatorname{Ei}(x)$ - интегральная показательная функция, определенная интегралом в смысле главного значения

$$\text{Ei}(x) = \mathcal{P} \int_{-\infty}^x \frac{e^t}{t} dt$$

и $C = 0,577\dots$ - постоянная Эйлера. Приведем более точные асимптотики

$$R^2(t) = \frac{2\hbar}{\pi\gamma} \begin{cases} \frac{\gamma^2 t^2}{2} \left(\ln \frac{1}{\gamma t} + \frac{3}{2} - C \right) + \dots, & t \ll \gamma^{-1} = \tau_0 \\ \ln(\gamma t) + C + \frac{1}{\gamma^2 t^2} + \dots, & t \gg \gamma^{-1} = \tau_0 \end{cases}$$

Поведение среднеквадратичного смещения в квантовом пределе при $T = 0$ качественно отличается от классического предела. В пределе больших времен диффузионное поведение частицы отсутствует и коэффициент диффузии $D = 0$ в соответствии с соотношением Эйнштейна $D = T\mu$. Формально можно считать, что коэффициент диффузии зависит от времени как $D(t) = \hbar \ln(\gamma t)/(\pi t) \rightarrow 0$ при $t \rightarrow \infty$.

На малых временах $t \ll \tau_0$, если не обращать внимания на множитель со слабой логарифмической зависимостью, то можно считать, что частица, несмотря на нулевую температуру, обладает характерной ненулевой скоростью порядка $v_T \approx \sqrt{\hbar\gamma/\pi}$. Это результат действия случайной силы.

Перейдем к анализу случая произвольной температуры $T \neq 0$. Здесь мы имеем три параметра размерности времени: $t, \tau_0 = \gamma^{-1}$ и $\hbar/T$. Для анализа предельного поведения при $t \rightarrow 0$ удобно воспользоваться общим выражением для среднеквадратичного смещения

$$R^2(t) = 2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{\hbar\gamma\omega}{\omega^2 + \gamma^2} \text{cth} \frac{\hbar\omega}{2T} \frac{1 - e^{-i\omega t}}{\omega^2 + \delta^2} \Bigg|_{\delta \rightarrow 0}$$

которое можно оценить с помощью теории вычетов

$$R^2(t) = \frac{2T}{\gamma} t - \frac{\hbar}{\gamma} \frac{1 - e^{-\gamma t}}{\text{tg}(\hbar\gamma/2T)} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{4\gamma T}{\gamma^2 - \omega_n^2} \frac{1 - e^{-\omega_n t}}{\omega_n}, \quad \omega_n = \frac{2\pi n T}{\hbar}$$

Частоты $\omega_n = 2\pi n T/\hbar$, где n - целое число, принято называть мацубаровскими частотами. С помощью разложения функции котангенса

$$\text{ctg} x = \frac{1}{x} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2x}{x^2 - \pi^2 n^2}$$

в ряд Лорана при $x = \hbar\gamma/2T$ можно представить $R^2(t)$ в виде

$$R^2(t) = R_{\text{K}\Omega}^2(t) - 4T \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{1 - e^{-\gamma t}}{\gamma^2 - \omega_n^2} - \frac{\gamma}{\omega_n} \frac{1 - e^{-\omega_n t}}{\gamma^2 - \omega_n^2} \right)$$

где $R_{\text{K}\Omega}^2(t)$ отвечает смещению в классическом пределе. Отсюда можно видеть, что конечная температура в пределе больших времен

$$t \gg \begin{cases} \frac{1}{\gamma}, & 2\pi T \gg \hbar\gamma, \\ \frac{\hbar}{2\pi T} \ln \frac{\hbar\gamma}{2\pi T}, & 2\pi T \ll \hbar\gamma \end{cases} \quad (\text{или огрубленно}) \sim \max \left\{ \frac{1}{\gamma}, \frac{\hbar}{2\pi T} \right\}$$

все-таки приводит к разрушению квантовых корреляций и восстанавливает диффузионное поведение частицы с сохранением соотношения Эйнштейна между коэффициентом диффузии и подвижностью $D = T\mu$. Другими словами, размытие энергии броуновской частицы в результате как столкновений, так и температуры существенно для формирования диффузионного движения частицы в термодинамически равновесной среде.

Приведем ответ для среднеквадратичного смещения $R^2(t)$ при малых временах:

$$R^2(t) \sim \frac{\hbar\gamma}{\pi} t^2 \ln \frac{1}{t \max\{\gamma, 2\pi T/\hbar\}}, \quad t \ll \min \left\{ \frac{1}{\gamma}, \frac{\hbar}{2\pi T} \right\}$$

БРМ-2. Средний квадрат смещения Ланжевене + осцилляторе

Частица массой m колеблется в одномерной гармонической ловушке с частотой ω_0 , находящейся в термодинамически равновесной среде с температурой T . Уравнение движения частицы имеет ланжевенский вид

$$m\ddot{x}(t) + \eta\dot{x}(t) + m\omega_0^2 x(t) = F(t),$$

где $\eta = m\gamma$ - коэффициент трения и $F(t)$ - случайная сила. Благодаря флуктуациям положение частицы $x(t)$ будет испытывать отклонения от $x = 0$. Используя флуктуационно-диссипационную теорему, найти средний квадрат $\langle x^2 \rangle$ положения частицы.

2

Фурье-компонента линейного отклика или восприимчивости равна

$$\alpha(\omega) = \alpha'(\omega) + i\alpha''(\omega) = -\frac{1}{m(\omega^2 - \omega_0^2 + i\gamma\omega)}$$

Используя флуктуационно-диссипационную теорему, найдем фурьекомпоненту коррелятора

$$\langle x(t)x(0) \rangle_\omega = \alpha''(\omega) \hbar \coth \frac{\hbar\omega}{2T} = \frac{1}{m} \frac{\gamma \hbar \omega}{(\omega^2 - \omega_0^2)^2 + \gamma^2 \omega^2} \coth \frac{\hbar\omega}{2T}$$

Тогда средний квадрат положения частицы в гармонической ловушке дается интегралом

$$\langle x^2 \rangle = \frac{1}{m} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{\gamma \hbar \omega}{(\omega^2 - \omega_0^2)^2 + \gamma^2 \omega^2} \coth \frac{\hbar\omega}{2T}$$

Случай термодинамически равновесного осциллятора без трения, т. е. $\gamma = 0$, тривиален. При $\gamma \rightarrow 0$ в интеграл вклад вносит только малая окрестность точек $\omega = \pm\omega_0$, что позволяет упростить подынтегральное выражение и прийти к очевидному ответу, хорошо известному из курса статистической физики

$$\langle x^2 \rangle = \frac{1}{m} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{\gamma \hbar \omega_0 \coth(\hbar\omega_0/2T)}{4\omega_0^2 (\omega - (\pm\omega_0))^2 + \gamma^2 \omega_0^2} = \frac{\hbar}{2m\omega_0} \coth \frac{\hbar\omega_0}{2T}$$

Проанализируем теперь другие предельные случаи. Начнем с классического предела $\hbar = 0$. Тогда интеграл легко вычисляется и для среднего квадрата положения частицы находим выражение

$$\langle x^2 \rangle = \frac{1}{m} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{2\gamma T}{(\omega^2 - \omega_0^2)^2 + \gamma^2 \omega^2} = \frac{T}{m\omega_0^2} = T\alpha(0)$$

которое не зависит от коэффициента трения $\eta = m\gamma$ и может быть выражено через значение восприимчивости на нулевой частоте $\alpha(0)$. Также можно сказать, что средняя потенциальная энергия частицы $m\omega_0^2 \langle x^2 \rangle / 2$ равна $T/2$.

В квантовом пределе нулевой $T = 0$ температуре средний квадрат положения частицы имеет ненулевое значение и равен интегралу

$$\langle x^2 \rangle = \frac{1}{\pi m} \int_0^{\infty} \frac{\gamma \hbar \omega d\omega}{(\omega^2 - \omega_0^2)^2 + \gamma^2 \omega^2} = \frac{\hbar \gamma}{2\pi m \omega_0^2} \int_0^{\infty} \frac{dx}{(x-1)^2 + x\gamma^2/\omega_0^2}$$

Вычисление интеграла дает

$$\langle x^2 \rangle = \frac{\hbar}{\pi m \omega_0} \frac{1}{\sqrt{|a-4|}} \begin{cases} \frac{\pi}{2} - \arcsin \frac{a-2}{2}, & a \leq 4, \\ \left[\frac{a-2}{2} + \sqrt{\frac{(a-2)^2}{4} - 1} \right], & a \geq 4, \end{cases} \quad a = (\gamma/\omega_0)^2.$$

Средний квадрат положения частицы $\langle x^2 \rangle$ монотонно падает с увеличением диссипации в системе, т.е. с ростом коэффициента γ (левый рис. 3.1). Приведем предельные выражения $\langle x^2 \rangle$ и его значение при $\gamma = 2\omega_0$

$$\langle x^2 \rangle = \begin{cases} \frac{\hbar}{2m\omega_0} \left(1 - \frac{\gamma}{\pi\omega_0} + \dots \right), & \gamma \ll 2\omega_0 \\ \frac{\hbar}{\pi m \omega_0}, & \gamma = 2\omega_0 \\ \frac{2\hbar}{\pi m \gamma} \ln(\gamma/\omega_0) + \dots, & \gamma \gg 2\omega_0 \end{cases}$$

В отсутствие диссипации $\gamma = 0$ для средней потенциальной энергии имеем обычный квантовомеханический ответ $m\omega_0^2 \langle x^2 \rangle / 2 = \hbar\omega_0/4$. Для сильнодиссипативного аperiодического $\gamma \gg \omega_0$ характера движения средняя потенциальная энергия гораздо меньше: $\sim (\hbar\omega_0^2/\gamma) \ln(\gamma/\omega_0)$.

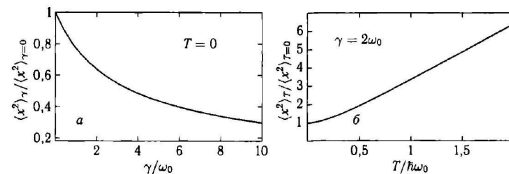


Рис. 3.1. Уменьшение среднего квадрата положения частицы с ростом коэффициента трения при нулевой температуре (а) и рост среднего квадрата положения частицы с увеличением температуры (б)

При высоких температурах поправку к классическому значению легко получить, используя разложение

$$\operatorname{cth} x = 1/x + x/3 + \dots \quad \text{при} \quad x \ll 1$$

Действительно, предполагая $T \gg \hbar\omega_0$, мы можем найти

$$\langle x^2 \rangle \approx \frac{1}{m} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{\gamma \hbar \omega}{(\omega^2 - \omega_0^2)^2 + \gamma^2 \omega^2} \left(\frac{2T}{\hbar \omega} + \frac{1}{3} \frac{\hbar \omega}{2T} \right) = \frac{T}{m \omega_0^2} \left(1 + \frac{\hbar^2 \omega_0^2}{12 T^2} \right)$$

Следующие члены разложения по обратной температуре будут зависеть и от коэффициента γ .

Низкотемпературное разложение можно получить интегрированием по частям исходного выражения для $\langle x^2 \rangle$. Итак, вводя функцию

$$F(\omega) = \frac{1}{m} \int_0^{\omega} \frac{d\omega}{\pi} \frac{\gamma \hbar \omega}{(\omega^2 - \omega_0^2)^2 + \gamma^2 \omega^2}$$

и в дальнейшем делая замену $x = \hbar\omega/2T$, мы найдем

$$\langle x^2 \rangle = F(\omega) \operatorname{cth} \frac{\hbar \omega}{2T} \Big|_0^{\infty} + \int_0^{\infty} \frac{F(\omega)}{\operatorname{sh}^2(\hbar\omega/2T)} d\left(\frac{\hbar \omega}{2T}\right) = \langle x^2 \rangle_{T=0} + \int_0^{\infty} \frac{F(2Tx/\hbar)}{\operatorname{sh}^2 x} dx$$

Раскладывая подынтегральную функцию F в ряд Тейлора и учитывая, что функция $F(0)$ и ее нечетные производные в нуле обращаются тождественно в ноль, приходим к следующим первым двум членам низкотемпературного $T \ll \hbar\omega_0$ разложения

$$\begin{aligned} \langle x^2 \rangle - \langle x^2 \rangle_{T=0} &= \left(\frac{2T}{\hbar} \right)^2 \frac{F''(0)}{2} \int_0^{\infty} \frac{x^2 dx}{\operatorname{sh}^2 x} + \left(\frac{2T}{\hbar} \right)^4 \frac{F''''(0)}{24} \int_0^{\infty} \frac{x^4 dx}{\operatorname{sh}^2 x} = \\ &= \left(\frac{2\pi T}{\hbar} \right)^2 \frac{F''(0)}{12} + \left(\frac{2\pi T}{\hbar} \right)^4 \frac{F''''(0)}{720} = \\ &= \frac{2\hbar\gamma}{3\pi m \omega_0^2} \left(\frac{\pi T}{\hbar \omega_0} \right)^2 \left(1 + \frac{2\omega_0^2 - \gamma^2}{5\omega_0^2} \left(\frac{\pi T}{\hbar \omega_0} \right)^2 \right) \end{aligned}$$

На правом рисунке 3.1 для примера показана температурная зависимость среднего квадрата положения частицы $\langle x^2 \rangle$ при $\gamma = 2\omega_0$.

Белан-ВШЭ-л5.1

Динамика координаты частицы описывается следующим уравнением

$$\frac{dx(t)}{dt} = \xi(t)$$

где $\xi(t)$ - это Гауссов белый шум с нулевым средним $\langle \xi(t) \rangle = 0$ и парным коррелятором $\langle \xi(t_1) \xi(t_2) \rangle = 2D\delta(t_1 - t_2)$. Обозначим через T момент времени, когда частица впервые достигнет любой из точек $x = 0$ или $x = L > 0$. Полагая, что $x(0) = l$, где $0 < l < L$, вычислите

- вероятность выживания $p_{surv}(t)$;
- плотность распределения $P(T)$;
- среднее время первого достижения $\langle T \rangle$;
- вероятность p_L , что первое достижение произойдет в точке $x = 0$.

Solution задачи 1

Поместим в точку $x = L$ поглощающую стенку. Плотность распределения координаты частицы является решением следующей начально-краевой задачи

$$\begin{cases} \partial_t n = D \partial_x^2 n \\ n(x, 0) = \delta(x - l) \\ n(0, t) = n(L, t) = 0 \end{cases}$$

С учетом нулевых граничных условий ряд Фурье функции $n(x; t)$ имеет вид

$$n(x; t) = \sum_{k=1}^{+\infty} \tilde{n}_k(t) \sin \left[\frac{\pi k}{L} x \right]$$

где

$$n_k(t) = \frac{2}{L} \int_0^L n(x; t) \sin \left[\frac{\pi k}{L} x \right] dx.$$

Умножив уравнение диффузии на $\frac{2}{L} \sin \left[\frac{\pi k}{L} x \right]$ и проинтегрировав по x от 0 до L , получаем обыкновенное дифференциальное уравнение на эволюцию коэффициентов ряда Фурье

$$\frac{d\tilde{n}_k(t)}{dt} = -D \frac{\pi^2 k^2}{L^2} \tilde{n}_k(t)$$

решение которого имеет вид

$$\tilde{n}_k(t) = \tilde{n}_k(0) e^{-Dk^2 t} = \frac{2}{L} \exp \left(-\frac{\pi^2 k^2 D}{L^2} t \right) \sin \left(\frac{\pi k}{L} l \right),$$

где мы учли начальное условие $\tilde{n}_k(0) = \frac{2}{L} \int_0^L n(x; 0) \sin \left[\frac{\pi k}{L} x \right] dx = \frac{2}{L} \sin \left(\frac{\pi k}{L} l \right)$. Значит

$$n(x; t) = \frac{2}{L} \sum_{k=1}^{\infty} \exp \left(-\frac{\pi^2 k^2 D}{L^2} t \right) \sin \left(\frac{\pi k}{L} l \right) \sin \left(\frac{\pi k}{L} x \right).$$

Тогда вероятность выживания равна

$$p_{\text{surv}}(t) = \int_0^L n(x; t) dx = \frac{2}{\pi} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1 - (-1)^k}{k} \sin \frac{\pi k l}{L} e^{-\frac{\pi^2 k^2 D}{L^2} t}$$

а плотность распределения случайного времени первого достижения имеет вид

$$\begin{aligned} P(T) &= - \left. \frac{dp_{\text{surv}}(t)}{dt} \right|_{t=T} = \\ &= \frac{2\pi D}{L^2} \sum_{k=1}^{\infty} (1 - (-1)^k) k \sin \frac{\pi k l}{L} \exp \left(-\frac{\pi^2 k^2 D}{L^2} T \right) \end{aligned}$$

Далее вычисляем среднее время первого достижения

$$\langle T \rangle = \int_0^{\infty} P(T) T dT = \frac{2}{\pi^3} \frac{L^2}{D} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1 - (-1)^k}{k^3} \sin \frac{\pi k l}{L} = \frac{l(L-l)}{2D}$$

Наконец, вероятность того, что частица будет поглощена именно левой стенкой равна интегралу по времени от потока вероятности в точке $x = 0$. Для потока имеем

$$J_L(t) = D \partial_x n(x; t)|_{x=0} = \frac{2\pi D}{L^2} \sum_{k=1}^{\infty} k \exp \left(-\frac{\pi^2 k^2 D}{L^2} t \right) \sin \left(\frac{\pi k}{L} l \right)$$

и, следовательно,

$$p_L = \int_0^{\infty} J_L(t) dt = \frac{2}{\pi} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k} \sin \left(\frac{\pi k}{L} l \right) = \frac{L-l}{L}$$

Белан-ВШЭ-л5.2

Рассмотрим одномерное броуновское движение в области $x > 0$ с непроницаемой стенкой в точке $x = 0$. Обозначим через T момент времени, когда частица впервые окажется в точке $x = L > 0$. Вычислите математическое ожидание времени первого достижения $\langle T \rangle$, если в нулевой момент времени частица находится в точке $x(0) = l$, где $0 < l < L$, а ее коэффициент диффузии равен D .

Сolution задачи 2

Поставим в точке $x = L$ поглощающую стенку и воспользуемся методом изображений. А именно, можно утверждать, что плотность распределения координаты частицы $n(x; t)$ в нашей задаче (то есть на интервале $x \in [0, L]$ с непроницаемой стенкой в $x = 0$ и поглощающей стенкой в $x = L$) дается решением следующей начально-краевой задачи

$$\begin{cases} \partial_t n = D \partial_x^2 n, \\ n(x, 0) = \delta(x - l) + \delta(x + l), \\ n(-L; t) = n(L; t) = 0. \end{cases}$$

Словом, мы доопределили задачу на область $[-L, 0]$, введя вторую поглощающую стенку в точке $x = -L$, и подобрали начальное условие таким образом, чтобы задачи равенство нулю потока вероятности в точке $x = 0$ было гарантировано по построению. Используя результаты предыдущей задачи, получаем

$$\begin{aligned} n(x; t) &= \frac{1}{L} \sum_{k=1}^{\infty} e^{-\frac{\pi^2 k^2 D}{4L^2} t} \left[\sin\left(\frac{\pi k}{2L}(L+l)\right) + \sin\left(\frac{\pi k}{2L}(L-l)\right) \right] \sin\left(\frac{\pi k}{2L}(x+L)\right) = \\ &= \frac{2}{L} \sum_{k=1}^{\infty} e^{-\frac{\pi^2 k^2 D}{4L^2} t} \sin\left(\frac{\pi k}{2}\right) \cos\left(\frac{\pi k l}{2L}\right) \sin\left(\frac{\pi k}{2L}(x+L)\right). \end{aligned}$$

Значит

$$\begin{aligned} \langle T \rangle &= \int_0^{\infty} p_{\text{surv}}(t) dt = \int_0^{\infty} \int_0^L n(x; t) dt dx = \\ &= \frac{16L^2}{\pi^3 D} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m}{(2m+1)^3} \cos\left(\frac{(2m+1)\pi l}{2L}\right) = \frac{L^2 - l^2}{2D} \end{aligned}$$

Белан-ВШЭ-л5.3

Рассмотрим одномерное броуновское движение на интервале $[0, L]$, концы которого стартующей в точке $x = l$, для того чтобы побывать в каждой точке указанного интервала. Найдите среднее $\langle T_{\text{cover}} \rangle$, если коэффициент диффузии частицы равен D .

Белан-ВШЭ-л5.4

Две одинаковые броуновские частицы, коэффициент диффузии каждой из которых равен D , начинают одномерное движение, находясь на расстоянии L друг от друга. Обозначим через T случайное время, спустя которое они впервые встретятся. Найдите среднее гармоническое значение $\langle T^{-1} \rangle^{-1}$.

Белан-ВШЭ-л5.5

Броуновская частица с коэффициентом диффузии D в начальный момент времени находилась на расстоянии L от поверхности шара, радиус которого равен $R < L$. Определите вероятность того, что частица никогда не столкнется с шаром.

18.1.2 Problems about Main Laws of Kinetics

(по идее тут вокруг книги Ландау, задачи, которые его книгой в принципе решатся)

МФТИ-з.5. распределение Максвелла обращает в нуль интеграл столкновений

Доказать, что локально-равновесное распределение Максвелла обращает в нуль интеграл столкновений. Проверить это утверждение для электрон-электронного и электрон-фононного интегралов столкновений.

МФТИ-з.6. Доказать и проверить Н-теорему Больцмана

Доказать Н-теорему Больцмана для газа сталкивающихся молекул. Проверить, что Н-теорема Больцмана справедлива в τ -приближении.

МФТИ-з.7. уравнение Эйлера из уравнения Навье–Стокса

Вывести уравнение Эйлера из уравнения Навье–Стокса.

МФТИ-3.8. при локально-равновесном распределении нет теплопроводности

Доказать, что при локально-равновесном распределении отсутствует теплопроводность.

МФТИ-3.9. диффузия легкого газа в тяжелом

Вычислить коэффициент диффузии легкого газа в тяжелом. Получить соотношение Эйнштейна между подвижностью и коэффициентом диффузии.

МФТИ-3.10. Элементарные свойства уравнения Паули (????)

Доказать, что уравнение кинетического баланса Паули сохраняет нормировку вероятности. Доказать, что уравнение Паули приводит к возрастанию энтропии. Решить уравнение Паули для двухуровневой системы.

МФТИ-3.11.*

Вычислить коэффициент теплопроводности диэлектрика в различных областях температуры. Качественно исследовать температурную зависимость коэффициентов переноса в металлах (рассмотреть электрон-электронные, электрон-примесные и электрон-фононное рассеяния).

18.1.3 Problems about Kinetics of Quantum Gases**МФТИ-дз1.8 Влияние фермионов на движущуюся стенку в них (!?!?!?)**

Имеется плоская стенка, которая с небольшой скоростью движется через равновесный газ фермионов. Столкновения фермионов со стенкой носят зеркальный характер. Найти силу сопротивления, испытываемую стенкой. Тоже самое сделать для бозонов. Рекомендуется перед решением этих задач вспомнить определение тензора плотности потока импульса и обсудить его физический смысл. Как изменится решение задачи, если стенка является полупроницаемой мембраной, т.е., с вероятностью $D < 1$ частица может проходить сквозь стенку? Обсудить случай диффузного отражения от стенки.

Solution (????)

(очень крутая задача, пока не знаю как решать, но буду скоро смотреть.)

18.1.4 Problems about Kinetics in Hydrodynamics

(!!! тут крутые задачи на оценку интеграла столкновений, подготовлюсь к ним!)

Колоколов.34.1) Колмогоровские спектры для поверхностных капиллярных волн

Найти колмогоровские стационарные спектры для поверхностных капиллярных волн на мелкой и глубокой воде.

(??? в теорию мб перенесу это.)

Solution

Кинетическое уравнение для трехволнового взаимодействия имеет вид

$$\frac{\partial}{\partial t} n_{\mathbf{k}} = I[n_{\mathbf{k}}] \equiv \pi \int \frac{d\mathbf{k}_1 d\mathbf{k}_2}{(2\pi)^d} (R_{\mathbf{k};\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2} - R_{\mathbf{k}_1;\mathbf{k},\mathbf{k}_2} - R_{\mathbf{k}_2;\mathbf{k},\mathbf{k}_1}),$$

где

$$R_{\mathbf{k};\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2} = |V_{\mathbf{k};\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2}|^2 [n_1 n_2 - n_{\mathbf{k}} (n_1 + n_2)] \delta(\omega_{\mathbf{k}} - \omega_1 - \omega_2) \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2),$$

а $V_{\mathbf{k};\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2}$ - матричный элемент трехволнового взаимодействия.

Для теплового равновесного спектра $n_{\mathbf{k}}^0 = T/\omega_{\mathbf{k}}$ в интеграле столкновений $I[n_{\mathbf{k}}]$ зануляется каждый R -член, поскольку

$$R_{\mathbf{k};\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2} \sim (\omega_{\mathbf{k}} - \omega_1 - \omega_2) \delta(\omega_{\mathbf{k}} - \omega_1 - \omega_2).$$

Кинетическое уравнение сохраняет полную энергию E :

$$\frac{dE}{dt} = \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^d} \omega_{\mathbf{k}} \dot{n}_{\mathbf{k}} = \pi \int \frac{d\mathbf{k} d\mathbf{k}_1 d\mathbf{k}_2}{(2\pi)^{2d}} \omega_{\mathbf{k}} (R_{\mathbf{k};\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2} - R_{\mathbf{k}_1;\mathbf{k},\mathbf{k}_2} - R_{\mathbf{k}_2;\mathbf{k},\mathbf{k}_1}).$$

После переобозначения переменных интегрирования во втором ($\mathbf{k} \leftrightarrow \mathbf{k}_1$) и третьем ($\mathbf{k} \leftrightarrow \mathbf{k}_2$) R -членах получим, что

$$\frac{dE}{dt} = \pi \int \frac{d\mathbf{k} d\mathbf{k}_1 d\mathbf{k}_2}{(2\pi)^{2d}} (\omega_{\mathbf{k}} - \omega_1 - \omega_2) R_{\mathbf{k};\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2} = 0$$

поскольку R -член содержит $\delta(\omega_{\mathbf{k}} - \omega_1 - \omega_2)$. Локальное условие сохранения энергии запишем в виде

$$\frac{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}}{\partial t} = -\text{div}_{\mathbf{k}} \mathbf{p}$$

где $\varepsilon_{\mathbf{k}} = \omega_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}}$ - плотность энергии, а $\mathbf{p}$ - плотность потока энергии. Для изотропной системы $\mathbf{p} \parallel \mathbf{k}$, так что для двумерной системы $d = 2$ получим:

$$\text{div}_{\mathbf{k}} \mathbf{p} = \frac{1}{k} \frac{\partial}{\partial k} (kp)$$

откуда

$$p = -\frac{1}{k} \int_0^k \omega_{\mathbf{q}} \dot{n}_{\mathbf{q}} q dq,$$

а полный поток энергии в пространстве волновых векторов $P = \int dS_{\mathbf{k}} p$ равен

$$P_{d=2} = -2\pi \int_0^k \omega_{\mathbf{q}} I_{\mathbf{q}} q dq$$

Для трехмерной системы аналогично находим

$$P_{d=3} = -4\pi \int_0^k \omega_{\mathbf{q}} I_{\mathbf{q}} q^2 dq$$

Колоколов-? Конкретные системы

Найдем теперь для некоторых конкретных систем колмогоровские стационарные спектры вида $n_{\mathbf{k}} \sim 1/k^b$ с постоянным потоком энергии P по спектру.

1а) Поверхностные капиллярные волны на мелкой воде.

В этом случае

$$d = 2, \omega_k \sim k^2, V_{k,12} \sim k_1 k_2.$$

Тогда

$$[n_1 n_2 - n_k (n_1 + n_2)] \sim 1/k^{2b}, \delta(\omega_k - \omega_1 - \omega_2) \sim 1/k^2, |V|^2 \sim k^4,$$

так что

$$I_q \sim \int_0^q d^2 k_1 \frac{1}{k_1^2} \frac{1}{k_1^{2b}} k_1^4 \sim q^{4-2b}$$

Поэтому

$$P_{d=2} \sim \int_0^k q^2 I_{\mathbf{q}} q dq \sim k^{8-2b} = \text{Const} \rightarrow b = 4.$$

Таким образом, стационарный спектр для поверхностных капиллярных волн на мелкой воде имеет вид

$$n_k = \frac{\text{Const}}{k^4} \sim \frac{1}{\omega_k^2},$$

называющийся спектром Каца-Контровича.

16) Поверхностные капиллярные волны на глубокой воде.

В это случае

$$d = 2, \omega_k \sim k^{3/2}, \quad V_{k,12} \sim (k_1 k_2 / k)^{1/4} k_1 k_2 \sim k^{9/4}.$$

Тогда

$$[n_1 n_2 - n_k (n_1 + n_2)] \sim 1/k^{2b}, \delta(\omega_k - \omega_1 - \omega_2) \sim 1/k^{3/2}, |V|^2 \sim k^{9/2},$$

так что

$$I_q \sim \int_0^q d^2 k_1 \frac{1}{k_1^{3/2}} \frac{1}{k_1^{2b}} k_1^{9/2} \sim q^{5-2b}$$

Поэтому

$$P_{d=2} \sim \int_0^k q^{3/2} I_q q dq \sim k^{17/2-2b} = \text{Const} \rightarrow b = 17/4.$$

Таким образом, стационарный спектр для поверхностных капиллярных волн на глубокой воде имеет вид

$$n_k = \frac{\text{Const}}{k^{17/4}}$$

- спектр Захарова-Филоненко.

18.2 Problems about Kinetics of Solids

(очень даже мб это буду писать в записи про твердое тело.)

18.2.1 Problems about Typical Kinetics of Electrons

БРМ-3.

Для рассеяния электронов на упругих немагнитных примесях найти в борновском приближении интеграл столкновений. Используя кинетическое уравнение Больцмана, вычислить время столкновений, транспортное время столкновений и определить электрическую проводимость. Считать спектр электронов, равным $\varepsilon(\rho) = \rho^2/2m$, а концентрацию примесей, равной n_i . Рассмотреть следующие потенциалы взаимодействия электрона с примесью:

- точечный потенциал $u(\mathbf{r}) = u_0 \delta(\mathbf{r})$;
- экранированный кулоновский потенциал $u(\mathbf{r}) = (Ze^2/r) \exp(-\kappa r)$.

Developing a general formalism

Пусть f_p - функция распределения электронов с фиксированной проекцией спина. Процессы рассеяния меняют число электронов с импульсом $\mathbf{p}$. В силу принципа Паули рассеяние электрона может произойти лишь в том случае, когда начальное состояние с импульсом ρ занято электроном, а конечное состояние с импульсом ρ' свободно. Поэтому вероятность рассеяния $W_{pp'}$ или вероятность перехода электрона из состояния ρ' в состояние $\mathbf{p}$ для члена с приходом в интеграле столкновений $\text{St}[f]$ должна быть записана как

$$(1 - f_p) W_{pp'} f_{p'}$$

а для члена с уходом вероятность рассеяния $W_{\rho'p}$ из состояния $\mathbf{p}$ в состояние $\mathbf{p}'$ как

$$(1 - f_{p'}) W_{p'\rho} f_p$$

Суммируя вероятности по произвольному импульсу $\mathbf{p}'$ и объему V , получим интеграл столкновений в виде разности членов с приходом и уходом частиц:

$$\text{St}[f] = \int [(1 - f_p) W_{pp'} f_{p'} - (1 - f_{p'}) W_{p'\rho} f_p] \frac{V d^3 p'}{(2\pi\hbar)^3}$$

Пусть $u(\mathbf{r})$ - потенциал взаимодействия электрона с отдельной примесью. Тогда потенциал взаимодействия $U(\mathbf{r})$ электрона со всеми примесями, расположенными в точках $\mathbf{R}_a$, равен сумме

$$U(\mathbf{r}) = \sum_a u(\mathbf{r} - \mathbf{R}_a)$$

В борновском приближении вероятность упругого перехода, отнесенная к единице времени и единице объема, дается формулой

$$W_{p'p} = \frac{2\pi}{\hbar} |U_{p'\rho}|^2 \delta(\varepsilon_{p'} - \varepsilon_p)$$

Матричный элемент $U_{p'p}$ в волновых функциях свободного движения электрона с импульсом $\mathbf{p}$

$$\psi_p(r) = \frac{e^{i\mathbf{p}r/\hbar}}{\sqrt{V}}$$

где множитель $V^{-1/2}$ подразумевает нормировку на один электрон в объеме V , имеет вид

$$U_{\mathbf{p}'\mathbf{p}} = \int \psi_{\mathbf{p}'}^*(\mathbf{r}) U(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) d^3r = \frac{u_{\mathbf{p}'\rho}}{V} \sum_a e^{-i(\mathbf{p}'-\mathbf{p})\mathbf{R}_a/\hbar}$$

Здесь $u_{\mathbf{p}'\rho}$ представляет собой фурье-компоненту потенциала взаимодействия $u(\mathbf{r})$, зависящую от разности импульсов $\mathbf{p}' - \mathbf{p}$:

$$u_{\mathbf{p}'\rho} = u(\rho' - \rho) = \int u(r) e^{-i(\rho' - \rho)r/\hbar} d^3r$$

Далее при вычислении квадрата модуля $|U_{p'p}|^2$ мы учтем, что примеси распределены равномерно и случайно по объему, и разобьем двойную сумму по положениям примесей на две части: одна содержит совпадающие положения, а вторая - несовпадающие, т. е.

$$|U_{\mathbf{p}'\rho}|^2 = \frac{|u_{\rho'}|^2}{V^2} \left(\sum_{a=b} 1 + \sum_{a \neq b} e^{-i(\rho' - \rho)(\mathbf{R}_a - \mathbf{R}_b)/\hbar} \right)$$

Вторая сумма, состоящая из макроскопически большого числа осциллирующих знакопеременных функций со случайным и отличным от нуля аргументом $(\mathbf{R}_a - \mathbf{R}_b)$, высредняется и обращается в ноль, не давая вклад в окончательный ответ. Первая сумма по совпадающим положениям примесей дает их полное число $N_i = n_i V$, и в результате после усреднения по положениям примесей получим:

$$|U_{p'p}|_{ycp}^2 = \frac{N_i}{V^2} |u_{\rho'}|^2 = \frac{N_i}{V^2} |u_{p'-\rho}|^2$$

Соответственно, вероятность рассеяния $W_{pp'}$ в интеграле столкновений примет вид

$$W_{pp'}^{(ycp)} = \frac{2\pi}{\hbar} n_i \frac{|u_{p'-\rho}|^2}{V} \delta(\varepsilon_{p'} - \varepsilon_p)$$

Для центрально-симметричного потенциала взаимодействия $u(\mathbf{r}) = u(-r)$ очевидно, что

$$W_{pp'}^{(yc)} = W_{p'\rho}^{(ycp)}$$

и интеграл столкновений упрощается:

$$\text{St}[f] = \int W_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}^{(ycp)} (f_{\mathbf{p}'} - f_{\mathbf{p}}) \frac{V d^3p'}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{2\pi}{\hbar} n_i \int |u_{\mathbf{p}'-\mathbf{p}}|^2 \delta(\varepsilon_{\mathbf{p}'} - \varepsilon_{\mathbf{p}}) (f_{\mathbf{p}'} - f_{\mathbf{p}}) \frac{d^3p'}{(2\pi\hbar)^3}.$$

Запишем кинетическое уравнение Больцмана в однородном постоянном поле $\mathbf{E}$

$$e\mathbf{E} \cdot \frac{\partial f_p}{\partial \mathbf{p}} = \text{St}[f]$$

которое будем решать в линейном приближении $f(\mathbf{p}) = f_0(\varepsilon_p) + f_1(\mathbf{p})$ по полю $\mathbf{E}$. Тогда находим

$$e\mathbf{E} \cdot \frac{\partial f_0(\varepsilon_p)}{\partial \mathbf{p}} = \frac{2\pi}{\hbar} n_i \int |u_{\mathbf{p}'-\mathbf{p}}|^2 \delta(\varepsilon_{\mathbf{p}'} - \varepsilon_p) [f_1(\rho') - f_1(p)] \frac{d^3p'}{(2\pi\hbar)^3}$$

Для равновесной функции распределения $f_0(\varepsilon_p)$ очевидно, что интеграл столкновений зануляется $\text{St}[f_0] = 0$ в силу равенства

$$\delta(\varepsilon_{p'} - \varepsilon_p) (f_0(\varepsilon_{p'}) - f_0(\varepsilon_p)) = 0$$

С учетом того, что $\partial f_0 / \partial \mathbf{p} = \mathbf{v} \partial f_0 / \partial \varepsilon$, где $\mathbf{v} = \partial \varepsilon / \partial \mathbf{p}$ - скорость электрона, решение кинетического уравнения ищем в виде

$$f_1(p) = v E_\chi(\varepsilon)$$

Затем после подстановки получим

$$\begin{aligned}
e\mathbf{v} \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} &= \frac{2\pi n_i}{\hbar} \int |u_{\rho' - \rho}|^2 \delta(\varepsilon_{\rho'} - \varepsilon_{\rho}) [\mathbf{v}' \mathbf{E} \chi(\varepsilon') - \mathbf{v} E_{\chi}(\varepsilon)] \frac{p'^2 dp' d\Omega}{(2\pi\hbar)^3} = \\
&= \frac{\pi n_i}{\hbar} \int |u(\vartheta)|^2 \delta(\varepsilon' - \varepsilon) [\mathbf{v}' \mathbf{E} \chi(\varepsilon') - \mathbf{v} E_{\chi}(\varepsilon)] \nu(\varepsilon') d\varepsilon' \frac{d\Omega}{4\pi} = \\
&= \frac{\pi n_i}{\hbar} \nu(\varepsilon) \chi(\varepsilon) \int |u(\vartheta)|^2 [\mathbf{v}' \mathbf{E} - \mathbf{v}] \frac{d\Omega}{4\pi}, \quad \nu(\varepsilon) = \frac{mp(\varepsilon)}{\pi^2 \hbar^3} = \frac{m\sqrt{2m\varepsilon}}{\pi^2 \hbar^3}
\end{aligned}$$

Здесь $\nu(\varepsilon)$ - плотность состояний и для краткости обозначено $u(\vartheta) \equiv u(2p \sin(\vartheta/2))$, где ϑ - угол между векторами $\mathbf{p}'$ и $\mathbf{p}$, а также учтено, что для упругого рассеяния $|\mathbf{p}'| = |\mathbf{p}|$.

Чтобы проинтегрировать по телесному углу Ω , мы направим полярную ось вдоль вектора $\mathbf{p}$ и затем введем сферические углы ϑ и φ , которые определяют направление вектора $\mathbf{p}'$, и сферические углы ϑ_1 и φ_1 , которые определяют направление электрического поля $\mathbf{E}$. Тогда для угла α между двумя направлениями векторов $\mathbf{p}'$ и $\mathbf{E}$ имеем

$$\cos \alpha = \cos \vartheta \cos \vartheta_1 + \sin \vartheta \sin \vartheta_1 \cos(\varphi - \varphi_1)$$

Подставляя это значение для скалярного произведения в интеграл, получим

$$e\mathbf{v} E \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \cos \vartheta_1 = \frac{\pi n_i}{\hbar} \nu(\varepsilon) \chi(\varepsilon) \frac{1}{4\pi} \int_0^\pi \sin \vartheta d\vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi |u(\vartheta)|^2 v E [\cos \vartheta \cos \vartheta_1 + \sin \vartheta \sin \vartheta_1 \cos(\varphi - \varphi_1) - \cos \theta_1].$$

Средний член $\cos(\varphi - \varphi_1)$ после интегрирования по углу φ даст нулевой вклад в ответ, а после сокращения на общий множитель $v E \cos \vartheta_1$ в левой и правой частях уравнения мы найдем $\chi(\varepsilon)$ и $f_1(\mathbf{p})$

$$\chi(\varepsilon) = -e\tau_{\text{tr}}(\varepsilon) \frac{\partial f_0(\varepsilon)}{\partial \varepsilon}, \quad f_1(\mathbf{p}) = e(\mathbf{v}\mathbf{v})\tau_{\text{tr}}(\varepsilon) \left(-\frac{\partial f_0(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right)$$

Здесь мы ввели транспортное время рассеяния τ_{tr} , определив его согласно соотношения

$$\frac{1}{\tau_{\text{tr}}(\varepsilon)} = \frac{\pi n_i}{\hbar} \nu(\varepsilon) \int |u(\vartheta)|^2 (1 - \cos \theta) \frac{d\Omega}{4\pi}$$

Интеграл столкновений при этом можно представить в форме

$$\text{St}[f] = -\frac{f - f_0}{\tau_{\text{tr}}}$$

о которой говорят как о релаксационном (или тау) приближении. Обычное время столкновений определяется следующим выражением:

$$\frac{1}{\tau(\varepsilon)} = \frac{\pi n_i}{\hbar} \nu(\varepsilon) \int |u(\vartheta)|^2 \frac{d\Omega}{4\pi}$$

Чтобы вычислить электропроводность σ , запишем выражение для тока

$$\mathbf{j} = \int e\mathbf{v} f(\mathbf{p}) \frac{2d^3p}{(2\pi\hbar)^3} = \int e\mathbf{v} f_0(\mathbf{p}) \frac{2d^3p}{(2\pi\hbar)^3} + \int e\mathbf{v} f_1(\mathbf{p}) \frac{2d^3p}{(2\pi\hbar)^3}$$

Первый интеграл не зависит от электрического поля и, очевидно, равен нулю. Для второго интеграла найдем

Определяя электропроводность σ соотношением $\mathbf{j} = \sigma \mathbf{E}$ и учитывая, что $\epsilon = mv^2/2$, найдем

$$\sigma = \frac{2e^2}{3m} \int \varepsilon \tau_{\text{tr}}(\varepsilon) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \frac{2d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \sim \frac{1}{n_i}$$

Соответственно, примесное электрическое сопротивление σ^{-1} пропорционально концентрации примеси.

Если время $\tau_{\text{tr}}(\varepsilon)$ не зависит от энергии, то его можно вынести из под знака интеграла и для упрощения ответа воспользоваться соотношением

$$\int \varepsilon \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \frac{2d^3p}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{3}{2} \int f_0(\varepsilon) \frac{2d^3p}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{3}{2} n$$

которое доказывается интегрированием по частям. В результате проводимость и сопротивление даются формулами

$$\sigma = \frac{ne^2}{m} \tau_{\text{tr}}, \quad \rho = \sigma^{-1} = \frac{m}{ne^2} \frac{1}{\tau_{\text{tr}}} \sim n_i$$

где n - концентрация электронов. Такой вид ответа сохраняется и при нулевой температуре, поскольку в этом случае $f'_0(\varepsilon) = -\delta(\varepsilon - \varepsilon_F)$ и время $\tau = \tau(\varepsilon_F)$ также может быть вынесено из-под знака интеграла, но взятое при значении энергии, равной энергии Ферми. В любом случае примесное сопротивление будет пропорционально концентрации примесей.

Solution to a)

Фурье-образ $u(q)$ точечного потенциала $u(\mathbf{r}) = u_0\delta(\mathbf{r})$ не зависит от импульса: $u(q) = u_0$. Транспортное время рассеяния и обычное время рассеяния просто совпадают:

$$\tau_{\text{tr}}^{-1} = \tau^{-1} = \pi n_i \nu(\varepsilon) |u_0|^2 / \hbar$$

Solution to b)

Фурье-образ $u(q)$ экранированного кулоновского потенциала равен выражению

$$u(q) = \frac{4\pi Ze^2}{(q/\hbar)^2 + \kappa^2} = \frac{4\pi Ze^2 \hbar^2}{q^2 + (\hbar\kappa)^2}$$

Для дальнейшего интегрирования по углам удобно ввести переменную $q = 2p \sin \theta/2$ и, соответственно, $d\Omega/4\pi = qdq/(2p^2)$. В результате:

$$\begin{aligned} \frac{\hbar}{\tau} &= \pi n_i \nu \int_0^{2p} \frac{q dq}{2p^2} \left(\frac{4\pi Ze^2 \hbar^2}{q^2 + (\hbar\kappa)^2} \right)^2 \\ \frac{\hbar}{\tau_{\text{tr}}} &= \pi n_i \nu \int_0^{2p} \frac{q dq}{2p^2} \frac{q^2}{2p^2} \left(\frac{4\pi Ze^2 \hbar^2}{q^2 + (\hbar\kappa)^2} \right)^2 \end{aligned}$$

Далее после подстановки $x = (q/2p)^2$ находим, что

$$\begin{aligned} \frac{\hbar}{\tau} &= \pi n_i \nu \left(\frac{\pi Ze^2 \hbar^2}{p^2} \right)^2 \int_0^1 \frac{dx}{(x + \hbar^2 \kappa^2 / 4p^2)^2} = \pi n_i \nu \frac{(4\pi Ze^2 \hbar^2)^2}{\kappa^2 (\hbar^2 \kappa^2 + 4p^2)} \\ \frac{\hbar}{\tau_{\text{tr}}} &= \pi n_i \nu \left(\frac{\pi Ze^2 \hbar^2}{p^2} \right)^2 \int_0^1 \frac{2x dx}{(x + \hbar^2 \kappa^2 / 4p^2)^2} = \\ &= 2\pi n_i \nu \left(\frac{\pi Ze^2 \hbar^2}{p^2} \right)^2 \left[\ln \frac{\hbar^2 \kappa^2 + 4p^2}{\hbar^2 \kappa^2} - \frac{4p^2}{\hbar^2 \kappa^2 + 4p^2} \right] \end{aligned}$$

Отношение транспортного времени к обычному времени равно

$$\frac{\tau}{\tau_{\text{tr}}} = 2a \left((1+a) \ln \frac{1+a}{a} - 1 \right) \approx \begin{cases} 1, & \hbar\kappa \gg p \\ (\hbar\kappa/p)^2 \ln(2p/\hbar\kappa), & \hbar\kappa \ll p \end{cases}$$

где величина a равна $a = (\hbar\kappa/2p)^2$. При $\hbar\kappa \ll p$ или когда характерный радиус действия потенциала заметно превышает прицельное расстояние $\kappa^{-1} \gg \hbar/p$, транспортное время существенно превышает обычное время рассеяния $\tau_{\text{tr}} \gg \tau$. Физически это связано с преимущественным рассеянием на малые углы $\theta \sim \hbar\kappa/p \ll 1$ и, соответственно, существенно меньшим вкладом в $1/\tau_{\text{tr}}$ благодаря неравенству $1 - \cos \theta \approx \theta^2/2 \ll 1$.

БРМ-4. Термоэлектрика

В качестве простейшей модели для описания термоэлектрических явлений можно использовать кинетическое уравнение Больцмана в приближении времени релаксации (τ -приближение) и изотропную модель свободных электронов с дисперсией $\varepsilon(\rho) = p^2/2m$. Для простоты считать, что время столкновений зависит только от энергии электрона $\tau = \tau(\varepsilon)$.

а) Найти выражения для коэффициентов электропроводности σ , Зеебека S (дифференциальной термо-ЭДС), Пельтье Π и теплопроводности κ .

б) Определить поток энергии $\mathbf{Q}$, поток энтропии $\mathbf{F}$ и диссипативную функцию R .з требования положительной определенности диссипативной функции показать положительность коэффициентов электропроводности σ и теплопроводности κ .

4.

а) Пусть в проводнике имеются постоянное электрическое поле напряженностью $\mathbf{E}$ и постоянный градиент температуры ∇T . Запишем в τ -приближении кинетическое уравнение Больцмана для стационарной функции распределения $f = f(\mathbf{r}, \mathbf{p})$

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

где $f_0(\varepsilon)$ - равновесная функция распределения со свойствами

$$f_0(\varepsilon) = f_0\left(\frac{\varepsilon - \mu}{T}\right), \quad \frac{\partial f_0}{\partial \mu} = - \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}, \quad \frac{\partial f_0}{\partial T} = - \frac{\varepsilon - \mu}{T} \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}, \quad \varepsilon = \frac{p^2}{2m}$$

и $\mu = \mu(T)$ - химический потенциал, зависящий от температуры. В линейном приближении по $\mathbf{E}$ и ∇T имеем уравнение

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

для нахождения функции распределения f . Далее находим изменение функции распределения $\delta f = f - f_0$

$$\delta f = e (v \mathbf{E}') \tau \left(- \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) - (v \nabla T) \frac{\varepsilon - \mu}{T} \tau \left(- \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right), \quad \mathbf{E}' = \mathbf{E} - \frac{\nabla \mu}{e}$$

где мы для краткости ввели поле $\mathbf{E}'$ как величину отклонения от условия равновесия во внешнем электрическом потенциале $\Phi(\mathbf{r})$

$$e\Phi(\mathbf{r}) + \mu = \text{const}$$

Определим плотность электрического тока j и диссипативный поток тепла $\mathbf{q}$ следующими интегралами:

$$j = \int e v f d\Gamma_p \quad \text{и} \quad q = \int v(\varepsilon - \mu) f d\Gamma_p$$

где $d\Gamma_p = 2d^3p/(2\pi\hbar)^3$ - элемент объема в p -пространстве с учетом двух проекций спина. В силу изотропности спектра электронов равновесная часть функции распределения f_0 не дает вклада в ток и поток тепла. Поэтому имеем

$$j = \int e^2 v (v \mathbf{E}') \tau \left(- \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) d\Gamma_p - \int e v (v \nabla T) \frac{\varepsilon - \mu}{T} \tau \left(- \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) d\Gamma_p$$

$$\mathbf{q} = \int e v (v \mathbf{E}') (\varepsilon - \mu) \tau \left(- \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) d\Gamma_p - \int v (v \nabla T) \frac{(\varepsilon - \mu)^2}{T} \tau \left(- \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) d\Gamma_p$$

Изотропность электронного спектра позволяет упростить интегрирование по углам, согласно,

$$\int v(v \mathbf{A}) d\Gamma_p = \frac{\mathbf{A}}{3} \int v^2 d\Gamma_p$$

и получить соотношения

$$j = \frac{\mathbf{E}'}{3} \int e^2 v^2 \tau \left(- \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) d\Gamma_p - \frac{\nabla T}{3} \int e v^2 \frac{\varepsilon - \mu}{T} \tau \left(- \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) d\Gamma_p$$

$$\mathbf{q} = \frac{\mathbf{E}'}{3} \int e v^2 (\varepsilon - \mu) \tau \left(- \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) d\Gamma_p - \frac{\nabla T}{3} \int v^2 \frac{(\varepsilon - \mu)^2}{T} \tau \left(- \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) d\Gamma_p$$

Эти соотношения с помощью кинетических коэффициентов выражают линейную связь между диссипативными потоками $j, \mathbf{q}$ и малыми возмущениями $\mathbf{E}', \nabla T$ равновесного состояния системы

$$j = \sigma (\mathbf{E}' - S \nabla T), \quad \text{или} \quad \mathbf{E}' = \frac{1}{\sigma} j + S \nabla T, \quad \text{и} \quad \kappa_E = \kappa + \sigma S.$$

$$\mathbf{q} = \sigma \mathbf{E}' - \kappa_E \nabla T$$

$$\mathbf{q} = \Pi j - \kappa \nabla T$$

Коэффициент σ называется электропроводность; S - коэффициент Зеебека или дифференциальная термо-ЭДС; Π - коэффициент Пельтье. Коэффициент теплопроводности κ вводится при условии отсутствия электрического тока. Легко видеть, что перекрестные коэффициенты S и Π связаны соотношением Томсона

$$\Pi = ST$$

представляющим собой частный случай принципа симметрии кинетических коэффициентов или принципа Онсагера.

Следствием этих соотношений являются следующие законы и эффекты. При $\nabla T = 0$ имеем $\nabla \mu = 0$ и возникает закон Ома $j = \sigma E$. При $j = 0$ получим закон Фурье $q = -\kappa \nabla T$. При контакте двух разных металлов возникает контактная разность потенциалов. Действительно, при $j = 0$ и $\nabla T = 0$ имеем $E' = 0$ или $\nabla \mu / e = E = -\nabla \Phi$. Если два контактирующих металла имеют разные химические потенциалы μ_1 и μ_2 , то из $-\nabla \Phi = \nabla \mu / e$ найдем контактную разность потенциалов $\Phi_{12} = \Phi_2 - \Phi_1 = -(\mu_2 - \mu_1) / e$.

Взаимодействие между электрическим током и потоком тепла приводит к термоэлектрическим эффектам. Если поддерживать два конца разомкнутого проводника при разных температурах T_1 и T_2 , то между концами возникает разность потенциалов или термо-ЭДС. Действительно, при $j = 0$ находим $E' = S \nabla T$ и

$$-\nabla \Phi = E = S \nabla T + \nabla \mu / e = (S + e^{-1} \partial \mu / \partial T) \nabla T = S' \nabla T$$

Возникающая разность потенциалов $\Phi_{12} = \Phi_2 - \Phi_1 = -S' (T_2 - T_1)$ и представляет собой эффект Зеебека.

Эффект Пельтье заключается в появлении потока тепла линейного по электрическому току в отсутствие градиента температуры. При $\nabla T = 0$ имеется дополнительный поток тепла $q = \Pi j$, направление которого зависит от направления электрического тока.

б)

В дифференциальной форме закон сохранения энергии записывается в виде

$$\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial t} + \operatorname{div} Q = 0$$

где $\mathcal{E}$ - энергия единицы объема, а Q - поток энергии. Уравнение, определяющее скорость возрастания энтропии единицы объема S , имеет вид

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \operatorname{div} F = \frac{R}{T}$$

где F - поток энтропии и R - диссипативная функция Рэлея, которая определяет скорость возрастания энтропии и должна быть всегда положительно определенной $R \geq 0$. Воспользуемся для энергии $\mathcal{E}$ тождеством

$$d\mathcal{E} = T dS + \mu d\rho$$

в котором для простоты считаем плотность ρ постоянной. Далее найдем связь между производными по времени

$$\dot{\mathcal{E}} = T \dot{S} \quad \text{и} \quad T \dot{S} = -\operatorname{div} Q$$

Определим поток энергии согласно

$$\begin{aligned} Q(r) &= \int v (\varepsilon_p + e \Phi(r)) f d\Gamma_p = \\ &= \int v (\varepsilon_p - \mu(r)) f d\Gamma_p + \int v \left(\Phi(r) + \frac{\mu(r)}{e} \right) e f d\Gamma_p = q + \left(\Phi(r) + \frac{\mu(r)}{e} \right) j \end{aligned}$$

где q - диссипативный поток тепла, j - плотность электрического тока и $\Phi(r)$ - электрический потенциал. Далее имеем

$$\begin{aligned} -\dot{S} &= \frac{1}{T} \operatorname{div} Q = \frac{1}{T} \operatorname{div} q + \frac{1}{T} \operatorname{div} \left[\left(\Phi + \frac{\mu}{e} \right) j \right] = \\ &= \operatorname{div} \left(\frac{q}{T} \right) - q \cdot \nabla \frac{1}{T} + \frac{\Phi + \mu/e}{T} \operatorname{div} j + \frac{1}{T} j \cdot \nabla \left(\Phi + \frac{\mu}{e} \right) \end{aligned}$$

Уравнение непрерывности для электрического тока с учетом независимости плотности зарядов от времени дает $\operatorname{div} j = 0$. Тогда получим

$$\dot{S} = -\operatorname{div} \left(\frac{q}{T} \right) - \frac{q \cdot \nabla T}{T^2} + \frac{j}{T} \left(E - \frac{\nabla \mu}{e} \right) = -\operatorname{div} \left(\frac{q}{T} \right) - \frac{q \cdot \nabla T}{T^2} + \frac{j E'}{T}$$

Подставляя соотношения для q и E' , найдем

$$\begin{aligned} \frac{\partial S}{\partial t} + \operatorname{div} \left(\frac{q}{T} \right) &= -\frac{\Pi j - \kappa \nabla T}{T^2} \nabla T + \frac{j}{T} \left(\frac{i}{\sigma} + S \nabla T \right) = \\ &= \kappa \frac{(\nabla T)^2}{T^2} + \frac{j^2}{\sigma T} + \left(S - \frac{\Pi}{T} \right) \frac{j \cdot \nabla T}{T}. \end{aligned}$$

Знакопеременный член $j \cdot \nabla T$ зануляется в силу принципа Онсагера симметрии кинетических коэффициентов $S = \Pi/T$. Окончательно получаем уравнение для роста энтропии

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{F} = \frac{R}{T}$$

в котором плотность потока энтропии равна $\mathbf{F} = \mathbf{q}/T$, а диссипативная функция R определена выражением

$$R = \kappa \frac{(\nabla T)^2}{T} + \frac{j^2}{\sigma}$$

и имеет смысл мощности диссипации энергии в единице объема в результате процессов тепло и электропроводности. Требование положительной определенности диссипативной функции приводит к требованию положительности коэффициентов теплопроводности $\kappa > 0$ и электропроводимости $\sigma > 0$.

Скорость изменения энергии единицы объема $\mathcal{E}$ можно выразить соотношением

$$\dot{\mathcal{E}} = -\operatorname{div} \mathbf{Q} = \frac{j^2}{\sigma} + \operatorname{div}(\kappa \nabla T) - \mu_T j \cdot \nabla T, \quad \mu_T = T \frac{d}{dT} \left(\frac{\Pi}{T} \right) = T \frac{dS}{dT}$$

Коэффициент μ_T называется коэффициентом Томсона, а последний член представляет собой тепло Томсона. В стационарных $\dot{\mathcal{E}} = 0$ условиях будет

$$\operatorname{div}(-\kappa \nabla T) = j^2/\sigma - \mu_T j \cdot \nabla T$$

и выделение тепла складывается из джоулева тепла и тепла Томсона. Изменение направления тока меняет выделение тепла Томсона на его поглощение.

БРМ-5.

Пользуясь результатами предыдущей задачи, вычислить коэффициенты электропроводности σ , Зеебека S , Пельтье Π и теплопроводности κ для двух случаев:

- металла (вырожденный электронный газ) и
 - полупроводника (невырожденный бoльцмановский электронный газ).
- Найти коэффициент эффективности термоэлектрических явлений ZT

$$ZT = \frac{S^2 \sigma T}{\kappa}$$

и число Лоренца L

$$L = \frac{\kappa}{\sigma T}.$$

Считать, что время рассеяния τ зависит от энергии степенным образом $\tau(\varepsilon) \sim \varepsilon^{r-1/2}$.

5.

а) Для нижеследующих вычислений удобно ввести плотность состояний $\nu(\varepsilon)$ и перейти к интегрированию по энергии:

$$\nu(\varepsilon) = \frac{m\sqrt{2m\varepsilon}}{\pi^2 \hbar^3}, \quad d\Gamma_p = \nu(\varepsilon) d\varepsilon$$

Коэффициент электропроводности дается интегралом

$$\sigma = \frac{1}{3} \int e^2 v^2(\varepsilon) \tau(\varepsilon) \nu(\varepsilon) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) d\varepsilon, \quad -\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} = \frac{1}{4T} \frac{1}{\operatorname{ch}^2(\varepsilon - \mu)/2T}$$

В металле, как вырожденной ферми-жидкости $T \ll \mu$, все интегралы набираются вблизи ферми-поверхности, т.е. в области $|\varepsilon - \mu| \lesssim T$. Поэтому медленно меняющиеся функции можно вынести из-под знака интеграла и пренебречь экспоненциально малыми членами порядка $\exp(-\mu/T)$ по сравнению с единицей. В результате получим

$$\sigma = \frac{1}{3} e^2 (v^2 \tau \nu)_{\varepsilon=\mu} = (e^2 D \nu)_{\mu} = \frac{n e^2}{m} \tau(\mu), \quad D = \frac{1}{3} v^2 \tau$$

Здесь D - коэффициент диффузии, ν - плотность состояний, взятая на поверхности Ферми, и n - концентрация электронов.

Коэффициент теплопроводности в отсутствие электрического поля κ_E равен

$$\begin{aligned}\kappa_E &= \frac{1}{3} \int_0^\infty v^2(\varepsilon) \tau(\varepsilon) \nu(\varepsilon) \frac{(\varepsilon - \mu)^2}{T} \frac{d\varepsilon}{4T \operatorname{ch}^2 \frac{\varepsilon - \mu}{2T}} \approx \frac{1}{3} (v^2 \tau \nu)_{\varepsilon=\mu} \times \\ &\times \int_{-\infty}^\infty \frac{\xi^2}{4T^2 \operatorname{ch}^2 \frac{\xi}{2T}} d\xi = \frac{1}{3} (v^2 \tau \nu)_\mu 2T \int_{-\infty}^\infty \frac{x^2 dx}{\operatorname{ch}^2 x} = \frac{\pi^2 T}{9} (v^2 \tau \nu)_\mu = C(T) D(\mu)\end{aligned}$$

Здесь $C(T) = \pi^2 T \nu(\mu)/3$ - электронная теплоемкость металла, а $D(\mu)$ - коэффициент диффузии. Перейдем к вычислению коэффициента Пельтье. Рассмотрим интеграл

$$\sigma \Pi = \frac{1}{3} \int_0^\infty e (v^2 \tau \nu)_\varepsilon (\varepsilon - \mu) \frac{d\varepsilon}{4T \operatorname{ch}^2 \frac{\varepsilon - \mu}{2T}} \approx \frac{e}{3} \int_{-\mu}^\infty (v^2 \tau \nu)_{\xi+\mu} \frac{\xi}{4T} \frac{d\xi}{\operatorname{ch}^2 \frac{\xi}{2T}}$$

Если $(v^2 \tau \nu)_\varepsilon = \text{const}$ и не зависит от ε , то интеграл для $\sigma \Pi$ экспоненциально мал. Поэтому мы воспользуемся разложением

$$(v^2 \tau \nu)_{\xi+\mu} = (v^2 \tau \nu)_\mu + (v^2 \tau \nu)'_\mu \xi + \dots$$

и последний член даст ненулевой степенной вклад. Далее, распространяя нижний предел интегрирования от $-\mu$ до $-\infty$, получим

$$\sigma \Pi \approx \frac{e}{3} (v^2 \tau \nu)'_\mu \int_{-\infty}^\infty \frac{\xi^2}{4T} \frac{d\xi}{\operatorname{ch}^2 \frac{\xi}{2T}} = \frac{e}{3} (v^2 \tau \nu)'_\mu 2T^2 \frac{\pi^2}{6} = \frac{\pi^2}{9} e T^2 (v^2 \tau \nu)'_\mu$$

Отсюда коэффициент Пельтье равен

$$\Pi(T) = \frac{\pi^2 T^2}{3e} \frac{(v^2 \tau \nu)'_\mu}{(v^2 \tau \nu)_\mu} = \frac{\pi^2 T^2}{3e} \frac{d}{d\mu} [\ln (v^2 \tau \nu)_\mu] = \frac{\pi^2 T^2}{3e} \frac{d}{d\mu} [\ln \sigma(\mu)]$$

Выражение для коэффициента Зеебека в терминах проводимости называется формулой Мотта

$$S(T) = \frac{\pi^2 T}{3e} \frac{d}{d\mu} [\ln \sigma(\mu)]$$

С учетом $\tau \sim \varepsilon^{r-1/2}$ получим

$$S(T) = (r+1) \frac{\pi^2 T}{3e \mu}$$

Величина и знак коэффициентов Зеебека и Пельтье зависят от механизма рассеяния.

В металлах можно не различать коэффициенты теплопроводности κ и κ_E с точностью до $T^2/\mu^2 \ll 1$ и считать $\kappa \approx \kappa_E$. Действительно, можно увидеть, что

$$\frac{\kappa_E - \kappa}{\kappa_E} = \frac{S^2 \sigma T}{\kappa_E} \sim \frac{T^2}{\mu^2} \ll 1$$

Коэффициент эффективности термоэлектричества ZT_E определяется как отношение потока тепла Пельтье Πj к потоку тепла $-\kappa \nabla T$, переносимого посредством теплопроводности, в условиях отсутствия электрического поля:

$$ZT_E = \left(\frac{\Pi j}{-\kappa \nabla T} \right)_{E'=0} = \frac{-\Pi \sigma \nabla T}{-\kappa \nabla T} = \frac{S^2 \sigma T}{\kappa}$$

В условиях, когда нет электрического тока $j = 0$, коэффициент эффективности термоэлектричества ZT вводится как

$$ZT = \frac{S^2 \sigma T}{\kappa_E}$$

В металле коэффициент ZT очень мал:

$$ZT = \frac{S^2 \sigma T}{\kappa_E} = (r+1) \frac{\pi^2 T^2}{3 \mu^2} \ll 1$$

Малость ZT связана с большой плотностью электрических носителей в металлах. Число Лоренца легко вычисляется:

$$L = \frac{\kappa}{\sigma T} \approx \frac{\kappa_E}{\sigma T} = \frac{\pi^2}{3e^2}$$

Если число Лоренца оказывается температурно-независимым, то в этом случае говорят о справедливости закона Видемана-Франца.

б)

Случай невырожденного полупроводника. В больцмановской статистике носителей заряда равновесное распределение будет равным $f_0 = \exp[(\mu - \varepsilon)/T]$. Для удобства вычислений введем плотность электронов n и μ^* , равное отношению химического потенциала μ к температуре T

$$n = \int_0^\infty f_0(\varepsilon) \nu(\varepsilon) d\varepsilon = e^{\frac{\mu}{T}} \int_0^\infty e^{-\frac{\varepsilon}{T}} \nu(\varepsilon) d\varepsilon, \quad \mu^* = \frac{\mu}{T} = \ln \left[\frac{n}{2} \left(\frac{2\pi\hbar^2}{mT} \right)^{3/2} \right]$$

Ниже всюду учитываем, что для больцмановской функции распределения верно следующее:

$$-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} = \frac{f_0}{T}$$

Электростатическая проводимость σ дается интегралом

$$\sigma = \frac{e^2}{3T} \int_0^\infty v^2 \tau \nu f_0 d\varepsilon = \frac{2ne^2}{3mT} \frac{\int_0^\infty \varepsilon \tau \nu e^{-\frac{\varepsilon}{T}} d\varepsilon}{\int_0^\infty \nu e^{-\frac{\varepsilon}{T}} d\varepsilon} = \frac{2ne^2}{3mT} \langle \varepsilon \tau \nu \rangle$$

где для краткости угловые скобки означают отношение интегралов следующего типа:

$$\langle \varepsilon^k \rangle = \frac{\int_0^\infty \varepsilon^k f_0 \nu d\varepsilon}{\int_0^\infty f_0 \nu d\varepsilon} = \frac{\int_0^\infty \varepsilon^k \nu e^{-\frac{\varepsilon}{T}} d\varepsilon}{\int_0^\infty \nu e^{-\frac{\varepsilon}{T}} d\varepsilon} = T^k \frac{\Gamma(k+3/2)}{\Gamma(3/2)}$$

и $\Gamma(x)$ - гамма-функция. Вспоминая, что $\tau(\varepsilon) \sim \varepsilon^{r-1/2}$, мы окончательно найдем

$$\sigma = \frac{ne^2}{m} \tau(T) \frac{\Gamma(r+2)}{\Gamma(5/2)}$$

Перейдем к определению коэффициента Пельтье:

$$\sigma \Pi = \frac{e}{3T} \int_0^\infty v^2 \tau \nu (\varepsilon - \mu) f_0 d\varepsilon = \frac{ne}{3T} [\langle \varepsilon v^2 \tau \nu \rangle - \mu \langle v^2 \tau \nu \rangle]$$

После несложных вычислений получим для коэффициентов Пельтье и Зеебека:

$$\Pi = \frac{T}{e} (r+2 - \mu^*) \quad \text{и} \quad S = \frac{1}{e} (r+2 - \mu^*)$$

Рассмотрим теперь коэффициент теплопроводности в нулевом электрическом поле

$$\kappa_E = \frac{1}{3T^2} \int_0^\infty v^2 \tau \nu (\varepsilon - \mu)^2 f_0 d\varepsilon = \frac{n}{3T^2} [\langle \varepsilon^2 v^2 \tau \nu \rangle - 2\mu \langle \varepsilon v^2 \tau \nu \rangle + \mu^2 \langle v^2 \tau \nu \rangle]$$

Несложные вычисления дают

$$\kappa_E = \frac{nT}{m} \tau(T) \frac{\Gamma(r+2)}{\Gamma(5/2)} [(r+2) + (r+2 - \mu^*)^2]$$

И далее находим теплопроводность при нулевом электрическом токе

$$\kappa = \kappa_E - \sigma \Pi S = \frac{nT}{m} \tau(T) \frac{\Gamma(r+2)}{\Gamma(5/2)} (r+2) = \frac{nT}{m} \tau(T) \frac{\Gamma(r+3)}{\Gamma(5/2)}$$

Отметим, что в полупроводниках коэффициенты κ и κ_E заметно отличаются друг от друга. В отличие от металлов число Лоренца L в полупроводниках уже зависит от типа рассеяния и равно

$$L = \frac{\kappa}{\sigma T} = \frac{r+2}{e^2}$$

Термоэлектрический коэффициент эффективности ZT в полупроводнике существенно больше, чем в металле,

$$ZT = \frac{S^2 \sigma T}{\kappa_E} = \frac{(r+2-\mu^*)^2}{(r+2) + (r+2-\mu^*)^2}$$

и может достигать значений, близких к единице.

18.2.2 Problems about Kinetics of Magnetic Materials 1

(??? это пока не смотрел, что-то много всего, статфиз подучить к этому нужно и пока не актуально.)

Колоколов.3.2 Гамильтониан трехволнового взаимодействия спиновых волн

Найти гамильтониан трехволнового дипольного взаимодействия для спиновых волн.

Reminder: (??? write what is known about this???)

Solution

(???? суть решения в чем??? оно большое, важно написать это.)

Сперва соображениями про магнитный момент находим полный гамильтониан (какими???), дальше долго выделяем части 2-го и 3-го порядка, дальше долго диагонализуем. (В целом задача жесть большая какая)

В узлах кристаллической решетки расположены магнитные моменты $\mathbf{S}$, которые взаимодействуют друг с другом и внешним магнитным полем. Микроскопический модельный гамильтониан имеет вид

$$H = - \sum_i \mathbf{B}_0(\mathbf{r}_i) \cdot \mathbf{S}(\mathbf{r}_i) - \sum_{ij} J_{ij} \mathbf{S}(\mathbf{r}_i) \cdot \mathbf{S}(\mathbf{r}_j) - \frac{1}{2} \sum_{ij} \mathbf{h}_j(\mathbf{r}_i) \cdot \mathbf{S}(\mathbf{r}_i).$$

Первый член описывает взаимодействие спина в i -м узле решетки с координатой $\mathbf{r}_i$ с внешним магнитным полем, второй член - так называемое обменное взаимодействие, приводящее при положительном знаке J к ферромагнитному упорядочиванию при температуре ниже критической, третий член описывает слабое диполь-дипольное взаимодействие между спинами, где $\mathbf{h}_j(\mathbf{r}_i)$ - магнитное поле, создаваемое j -м спином в i -м узле решетки.

Нас будут интересовать длинноволновые возбуждения намагниченности, поэтому перейдем к непрерывному описанию, вводя плотность намагниченности $\mathbf{M}(\mathbf{r})$, так, чтобы полные магнитные моменты совпадали:

$$\int \mathbf{M}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \sum_i \mathbf{S}(\mathbf{r}_i)$$

Тогда первый член в гамильтониане записывается как

$$H_0 = - \int \mathbf{B}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{M}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}$$

Второй член -

$$H_{ex} = J \int (\nabla \mathbf{M}(\mathbf{r}))^2 d\mathbf{r}.$$

В третьем члене магнитное поле диполя $\mathbf{h}$ представим как $\mathbf{h} = -\nabla \phi$, где

$$\phi(\mathbf{r}_1) = \frac{\mathbf{M}(\mathbf{r}_2) \cdot \mathbf{r}}{r^3} = -\mathbf{M}(\mathbf{r}_2) \cdot \nabla \frac{1}{r} = -4\pi i \int \frac{\mathbf{M}(\mathbf{r}_2) \cdot \mathbf{q}}{q^2} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \frac{d^3 q}{(2\pi)^3}$$

и $\mathbf{r} \equiv \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$. Тогда третий член равен

$$H_{dd} = 2\pi \int d\mathbf{r}_1 \int d\mathbf{r}_2 \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \cdot \frac{(\mathbf{M}(\mathbf{r}_1) \cdot \mathbf{q})(\mathbf{M}(\mathbf{r}_2) \cdot \mathbf{q})}{q^2} e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)}.$$

Интеграл по q дает вклад, пропорциональный $\delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$, однако для длинноволновых спиновых волн это несущественно, поскольку для учета диполь-дипольного взаимодействия мы должны ограничить область

интегрирования условием $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| > a$ - размера решетки, чтобы исключить самовоздействие. Разлагая $\mathbf{M}(\mathbf{r})$ в ряд Фурье,

$$\mathbf{M}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{M}_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$$

получим

$$H_{dd} = 2\pi \sum_{\mathbf{k}} (\mathbf{M}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{n}) (\mathbf{M}_{-\mathbf{k}} \cdot \mathbf{n}), \quad \mathbf{n} = \frac{\mathbf{k}}{|\mathbf{k}|}, \quad |\mathbf{k}| < \frac{1}{a}.$$

Теперь следует выбрать канонические переменные и записать в гамильтоновой форме феноменологические уравнения движения Ландау - Лифшица:

$$\partial_t \mathbf{M}(\mathbf{r}, t) = g \left[\frac{\delta H}{\delta \mathbf{M}} \times \mathbf{M}(\mathbf{r}, t) \right]$$

которые описывают прецессию вектора намагниченности $\mathbf{M}$ вокруг эффективного магнитного поля $\delta H / \delta \mathbf{M}$.

Отметим, что квадрат намагниченности есть сохраняющаяся величина, поскольку

$$\partial_t M^2 = 2\mathbf{M} \cdot \partial_t \mathbf{M} = 2g\mathbf{M} \cdot \left[\frac{\delta H}{\delta \mathbf{M}} \times \mathbf{M} \right] = 0.$$

В достаточно сильном внешнем магнитном поле (или при низких температурах), направление которого выберем вдоль оси z , вектор намагниченности $\mathbf{M}$ под действием внешних возмущений или теплового движения лишь слабо отклоняется от оси z , т. е. $M_x \sim M_y \ll M_z$, так что уравнения движения принимают вид

$$\partial_t M_x = gM_z \frac{\delta H}{\delta M_y}, \quad \partial_t M_y = -gM_z \frac{\delta H}{\delta M_x}.$$

Удобно перейти к циркулярным переменным $M_{\pm} = M_x \pm iM_y$, тогда

$$\partial_t M_+ = -2igM_z \frac{\delta H}{\delta M_-}, \quad \partial_t M_- = 2igM_z \frac{\delta H}{\delta M_+}.$$

В линейном приближении, когда $M_z \approx M_0 = \text{Const}$, определим новые канонические переменные из соотношений $M_+(\mathbf{r}, t) = \sqrt{2gM_0}a(\mathbf{r}, t)$, $M_-(\mathbf{r}, t) = \sqrt{2gM_0}a^*(\mathbf{r}, t)$ и получим канонические уравнения:

$$\partial_t a = -i \frac{\delta H}{\delta a^*}, \quad \partial_t a^* = i \frac{\delta H}{\delta a}.$$

Поскольку $M_z = \sqrt{M_0^2 - M_+ M_-}$ зависит только от произведения aa^* , будем искать точные преобразования к новым каноническим переменным в виде $M_+ = \sqrt{2gM_0}af(aa^*)$, $M_- = \sqrt{2gM_0}a^*f(aa^*)$.

Находя неизвестную функцию f из условия сохранения канонического вида уравнений движения, получим $f = \sqrt{1 - gaa^*/2M_0}$. Для наших целей достаточно знать, что поправка к $M_{\pm}$ имеет третий порядок по переменным a . Из равенства $M^2 = M_0^2 = M_z^2 + M_+ M_-$ находим $M_z \approx M_0 - gaa^*$ с точностью до членов 4-го порядка.

Если пренебречь H_{dd} , то после перехода к фурье-компонентам получим

$$H = \int gB_0 a(\mathbf{r})a^*(\mathbf{r})d\mathbf{r} + 2gM_0J \int (\nabla a(\mathbf{r})) (\nabla a^*(\mathbf{r})) d\mathbf{r} = \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^* a_{\mathbf{k}},$$

где $\omega_{\mathbf{k}} = gB_0 + 2gM_0Jk^2 \equiv \omega_H + \omega_{ex}(kb)^2$, здесь b - расстояние между узлами решетки, а B_0 - внешнее магнитное поле, направленное вдоль оси z .

Члены второго H_2 и третьего H_3 порядка

Теперь извлечем из H_{dd} члены второго H_2 и третьего H_3 порядка по новым каноническим переменным a, a^* . Запишем члены $\mathbf{M}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{n}$ через циркулярные переменные:

$$\mathbf{M}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{n} = M_z(\mathbf{k})n_z + \frac{1}{2} [M_+(\mathbf{k})n_- + M_-(\mathbf{k})n_+]$$

M_z содержит члены второго порядка по $a, a^*, M_{\pm}$ - члены первого и третьего порядка. Поэтому вклад в H_2 дадут произведения $M_{\pm} \cdot M_{\mp}$, а в H_3 - произведения $M_z \cdot M_{\pm}$:

$$\begin{aligned} H_{dd}^{(2)} &= \frac{\pi}{2} \sum_{\mathbf{k}} [M_+(\mathbf{k})n_- + M_-(\mathbf{k})n_+] [M_+(-\mathbf{k})n_- + M_-(-\mathbf{k})n_+] = \\ &= \frac{\pi}{2} \sum_{\mathbf{k}} [n_-^2 M_+(\mathbf{k})M_+(-\mathbf{k}) + n_+^2 M_-(\mathbf{k})M_-(-\mathbf{k})] + \\ &+ \frac{\pi}{2} \sum_{\mathbf{k}} n_- n_+ (M_+(\mathbf{k})M_-(-\mathbf{k}) + M_-(\mathbf{k})M_+(-\mathbf{k})). \end{aligned}$$

Подставляя $M_+(\mathbf{k}) = \sqrt{2gM_0}a(\mathbf{k})$, $M_-(\mathbf{k}) = \sqrt{2gM_0}a^*(\mathbf{k})$, получаем:

$$\begin{aligned} H_{dd}^{(2)} &= \pi g M_0 \sum_{\mathbf{k}} [n_-^2 a(\mathbf{k})a(-\mathbf{k}) + n_+^2 a^*(\mathbf{k})a^*(-\mathbf{k})] + \\ &+ \pi g M_0 \sum_{\mathbf{k}} n_- n_+ (a(\mathbf{k})a^*(-\mathbf{k}) + a^*(\mathbf{k})a(-\mathbf{k})). \end{aligned}$$

Из вещественности

$$M_{x,y}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} M_{x,y}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$$

следует $M_{x,y}^*(\mathbf{k}) = M_{x,y}(-\mathbf{k})$, откуда $M_+(-\mathbf{k}) = M_-^*(\mathbf{k})$, т. е. $a(-\mathbf{k}) = a(\mathbf{k})$. Таким образом,

$$H_{dd}^{(2)} = \pi g M_0 \sum_{\mathbf{k}} [n_-^2 a(\mathbf{k})a(\mathbf{k}) + n_+^2 a^*(\mathbf{k})a^*(\mathbf{k}) + 2n_- n_+ a(\mathbf{k})a^*(\mathbf{k})].$$

Собирая все квадратичные вклады, получим:

$$\begin{aligned} H^{(2)} &= \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^* a_{\mathbf{k}} (\omega_H + \omega_{ex} k^2 b^2 + 2\pi g M_0 n_- n_+) + \\ &+ \sum_{\mathbf{k}} \pi g M_0 (a_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} n_-^2 + a_{\mathbf{k}}^* a_{\mathbf{k}}^* n_+^2) \equiv \\ &\equiv \sum_{\mathbf{k}} [A_k a_{\mathbf{k}}^* a_{\mathbf{k}} + B_k a_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} n_-^2 + B_k^* a_{\mathbf{k}}^* a_{\mathbf{k}}^* n_+^2]. \end{aligned}$$

Обычно $\omega_H + \omega_{ex} k^2 b^2 \gg \pi g M_0 \equiv \omega_m/4$, т. е. $A_k \gg |B_k|$.

Диагонализация

Осталось диагонализировать $H^{(2)}$, используя $(u - v)$ -преобразования Боголюбова, вводя новые канонические переменные b_k, b_k^* :

$$a_{\mathbf{k}} = u_k b_{\mathbf{k}} + v_k b_{\mathbf{k}}^*, \quad a_{\mathbf{k}}^* = u_k b_{\mathbf{k}}^* + v_k^* b_{\mathbf{k}}.$$

Чтобы уравнения сохранили свой канонический вид

$$\partial_t a_{\mathbf{k}} = -i \frac{\delta H}{\delta a_{\mathbf{k}}^*} \rightarrow \partial_t b_{\mathbf{k}} = -i \frac{\delta H}{\delta b_{\mathbf{k}}^*}$$

следует выбрать $u_k^2 - |v_k|^2 = 1$, а чтобы недиагональные члены занулились - надо выбрать

$$u_k^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{A_k}{\omega_k} \right), \quad |v_k|^2 = \frac{1}{2} \left(\frac{A_k}{\omega_k} - 1 \right).$$

В результате получим:

$$H^{(2)} = \sum_{\mathbf{k}} \omega_k b_{\mathbf{k}}^* b_{\mathbf{k}}, \quad \text{где } \omega_k = \sqrt{A_k^2 + B_k^2}.$$

Таким образом, вклад от членов B_k в ω_k имеет второй порядок малости, и в пределе $A_k \gg |B_k|$ их можно просто отбросить. Для нахождения $H^{(3)}$ следует подставить

$$\begin{aligned} M_z(\mathbf{k}) &= \frac{1}{\sqrt{V}} \int (M_z(\mathbf{r}) - M_0) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} d\mathbf{r} = \frac{1}{\sqrt{V}} \int (-g) a^*(\mathbf{r}) a(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} d\mathbf{r} = \\ &= \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} (-g) a_{\mathbf{k}_1} a_{\mathbf{k}_2}^* \Delta(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}). \end{aligned}$$

Получим

$$H_{dd}^{(3)} = \pi \sum_{\mathbf{k}} [n_z n_+ (M_z(\mathbf{k}) M_-(-\mathbf{k}) + M_z(-\mathbf{k}) M_-(\mathbf{k})) + \text{c.c.}].$$

Переходя к каноническим переменным a, a^* , имеем:

$$H_{dd}^{(3)} = \frac{\pi(-g)\sqrt{8gM_0}}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \sin \theta_k \cos \theta_k e^{i\phi_k} a_{\mathbf{k}_1} a_{\mathbf{k}_2}^* a_{\mathbf{k}}^* \Delta(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}) + \text{c.c.}$$

После симметризации по $\mathbf{k}, \mathbf{k}_2$ получаем:

$$\begin{aligned} H_{dd}^{(3)} &= -\sqrt{\frac{g\omega_m^2}{32M_0V}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} (\sin 2\theta_k e^{i\phi_k} + \sin 2\theta_{k_2} e^{i\phi_{k_2}}) a_{\mathbf{k}_1} a_{\mathbf{k}_2}^* a_{\mathbf{k}}^* \Delta(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}) \\ &+ \text{c.c.} \equiv \frac{1}{2\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} V_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}} a_{\mathbf{k}_1} a_{\mathbf{k}_2}^* a_{\mathbf{k}}^* \Delta(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}) + \text{c.c.} \end{aligned}$$

Колоколовл.3.3 Декремент затухания спиновых волн за счет трехволнового взаимодействия

Найти декремент затухания спиновых волн за счет трехволнового взаимодействия для:

1) длинных волн ($\omega_{ex} k^2 a^2 \ll \omega_H$);

2) вблизи порога распада.

Reminder: (??? write what is known about this???)

Solution

Рассмотрим затухание спиновых волн за счет взаимодействия с тепловыми магнонами. Закон дисперсии спиновых волн имеет вид $\omega_{\mathbf{k}} = \omega_H + \omega_{ex} a^2 k^2$. 1. Затухание длинных волн ($\omega_{ex} k^2 a^2 \ll \omega_H$) В этом случае возможно только слияние волны с тепловыми магнонами, поскольку процесс распада запрещен (см. ниже). Рассмотрим спиновую волну с волновым вектором $\mathbf{k}$, распространяющуюся перпендикулярно внешнему магнитному полю. Выберем систему координат с осью z вдоль внешнего магнитного поля и осью x вдоль волнового вектора $\mathbf{k}$ спиновой волны, считая ее начальную амплитуду много большей теплового фона (рис. 13). В выбранной системе координат $\theta_k = \pi/2$, так что $\sin 2\theta_k = 0$ и квадрат матричного элемента трехволнового взаимодействия для процесса слияния имеет вид

$$|V_{\mathbf{k}+\mathbf{q}; \mathbf{k}, \mathbf{q}}|^2 = \frac{\omega_m^2 g}{8M_0} \sin^2 2\theta_q$$

Кинетическое уравнение для процесса слияния

$$\dot{n}_{\mathbf{k}} = 2\pi \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} |V_{\mathbf{k}+\mathbf{q}; \mathbf{k}, \mathbf{q}}|^2 [-n_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{q}} + n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} (n_{\mathbf{k}} + n_{\mathbf{q}})] \delta(\omega_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \omega_{\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{q}})$$

в случае $n_{\mathbf{k}} \gg n_{\mathbf{q}}, n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}$ имеет решение вида $n_{\mathbf{k}}(t) \sim \exp(-2\gamma_{\mathbf{k}} t)$, где декремент затухания спиновой волны равен

$$\gamma_{\mathbf{k}} = \frac{g\omega_m^2 T \omega_{\mathbf{k}}}{64\pi^2 M_0} \int \frac{d\mathbf{q} \sin^2 2\theta_q}{\omega_{\mathbf{q}} \omega_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}} \delta(\omega_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \omega_{\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{q}})$$

Здесь было использовано, что $n_{\mathbf{q}} \approx n_{\mathbf{q}}^0 = T/\omega_{\mathbf{q}}, n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \approx n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^0 = T/\omega_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}$

Из сохранения энергии $\omega_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} = \omega_{\mathbf{k}} + \omega_{\mathbf{q}}$ следует

$$\omega_H + \omega_{ex} a^2 (\mathbf{k} + \mathbf{q})^2 = 2\omega_H + \omega_{ex} a^2 (\mathbf{k}^2 + \mathbf{q}^2),$$

откуда

$$q = \frac{\omega_H}{2k\omega_{ex}a^2 \sin \theta_{\mathbf{q}} \cos \phi_{\mathbf{q}}}$$

где $\theta_{\mathbf{q}}, \phi_{\mathbf{q}}$ - полярный и азимутальный углы в выбранной системе координат. Это равенство означает, в частности, что $\cos \phi_{\mathbf{q}} > 0$. Поскольку $\sin \theta_{\mathbf{q}} \cos \phi_{\mathbf{q}} \leq 1$, то

$$\omega_{ex}q^2a^2 \geq \frac{\omega_{ex}a^2\omega_H^2}{4k^2\omega_{ex}^2a^4} \gg \omega_H,$$

т. е. $q \gg k$ и, следовательно, $\omega_{\mathbf{q}} \approx \omega_{ex}q^2a^2 \approx \omega_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}$. Удобно дельтафункцию $\delta(\omega_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \omega_{\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{q}})$ переписать в виде

$$\delta(\omega_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \omega_{\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{q}}) = \delta(\omega_H - \alpha q) = \frac{1}{\alpha} \delta(q - \omega_H/\alpha),$$

где $\alpha = 2k\omega_{ex}a^2 \sin \theta_{\mathbf{q}} \cos \phi_{\mathbf{q}}$. Тогда

$$\begin{aligned} \gamma_{\mathbf{k}} &= \frac{g\omega_m^2 T \omega_{\mathbf{k}}}{64\pi^2 M_0} \int d\Omega_{\mathbf{q}} \int \frac{q^2 dq \sin^2 2\theta_q}{\omega_{ex}^2 a^4 q^4} \delta(\omega_H - \alpha q) = \\ &= \frac{g\omega_m^2 T \omega_{\mathbf{k}} k}{32\pi^2 M_0 \omega_H^2 \omega_{ex} a^2} \int d\Omega_{\mathbf{q}} \sin^2 2\theta_q \sin \theta_q \cos \phi_q. \end{aligned}$$

Угловой интеграл $I_q = \int d\Omega_{\mathbf{q}} \sin^2 2\theta_q \sin \theta_q \cos \phi_q$ равен

$$\begin{aligned} I_q &= \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \cos \phi_q d\phi_q \int_0^{\pi} \sin^2 2\theta_q \sin \theta_q d\theta_q = \\ &= \int_0^{\pi} \sin^2 2\theta_q (1 - \cos 2\theta_q) d\theta_q = \frac{\pi}{2}. \end{aligned}$$

Окончательно

$$\gamma_{\mathbf{k}} = \frac{g\omega_m^2 T \omega_{\mathbf{k}} k}{64\pi M_0 \omega_H^2 \omega_{ex} a^2}$$

2. Затухание спиновых волн вблизи порога распада

Найдем вклад в декремент затухания спиновых волн от процесса распада вблизи его порога. Минимальная частота спиновой волны с законом дисперсии $\omega_{\mathbf{k}} = \omega_H + \alpha k^2$ ($\alpha \equiv \omega_{ex}a^2$), при которой возможен ее распад на две другие, находится из сохранения частоты и волнового вектора

$$\omega_{\mathbf{k}} = \omega_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} + \omega_{\mathbf{q}}$$

Удобно представить

$$\mathbf{q} = \frac{\mathbf{k}}{2} + \delta\mathbf{q}, \quad \mathbf{k} - \mathbf{q} = \frac{\mathbf{k}}{2} - \delta\mathbf{q}$$

Тогда, подставляя в уравнение сохранения частоты, получим:

$$2\alpha\delta q^2 = \frac{\alpha k^2}{2} - \omega_H$$

следовательно, $\alpha k^2 > 2\omega_H$ и $(\omega_{\mathbf{k}})_{\min} = 3\omega_H$.

Пусть $\omega_{\mathbf{k}} = 3\omega_H + \varepsilon$. Тогда

$$\delta(\omega_{\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \omega_{\mathbf{q}}) = \delta(2\alpha\delta q^2 - \varepsilon/2)$$

Таким образом, вблизи порога распада $\delta q \sim \sqrt{\varepsilon} \ll k$, следовательно, $\mathbf{k} - \mathbf{q} \approx \mathbf{q} \approx \mathbf{k}/2$. Значит, все вектора направлены в одну сторону и поэтому

$$|V_{\mathbf{k};\mathbf{k}-\mathbf{q},\mathbf{q}}|^2 \approx \frac{\omega_m^2 g}{2M_0} \sin^2 2\theta_k$$

Кинетическое уравнение для распада:

$$\dot{n}_{\mathbf{k}} = \pi \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} |V_{\mathbf{k};\mathbf{k}-\mathbf{q},\mathbf{q}}|^2 [n_{\mathbf{q}} n_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - n_{\mathbf{k}} (n_{\mathbf{q}} + n_{\mathbf{k}-\mathbf{q}})] \delta(\omega_{\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \omega_{\mathbf{q}}).$$

Поэтому вклад в декремент затухания от распада равен

$$\gamma_{\mathbf{k}} = \frac{\pi}{2} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} |V_{\mathbf{k};\mathbf{k}-\mathbf{q},\mathbf{q}}|^2 [n_{\mathbf{q}} + n_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}] \delta(\omega_{\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \omega_{\mathbf{q}}).$$

Учитывая малую величину ε только в аргументе дельта-функции, получим:

$$[n_{\mathbf{q}} + n_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}] \delta(\omega_{\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \omega_{\mathbf{q}}) \approx \frac{4T}{3\omega_H} \delta(2\alpha\delta q^2 - \varepsilon/2).$$

Тогда

$$\gamma_{\mathbf{k}} = \frac{g\omega_m^2 T \sin^2 2\theta_{\mathbf{k}}}{24\pi^2 \omega_H} \int d^3 q \delta(2\alpha\delta q^2 - \varepsilon/2)$$

Так как $\mathbf{q} = \mathbf{k}/2 + \delta\mathbf{q}$, то $d\mathbf{q} = d\delta\mathbf{q}$, и поэтому

$$\int d^3 q \delta(2\alpha\delta q^2 - \varepsilon/2) = \int d^3 \delta q \frac{1}{2\alpha} \delta(\delta q^2 - \varepsilon/4\alpha) = \frac{\pi}{\alpha} \sqrt{\frac{\varepsilon}{4\alpha}}$$

Окончательно

$$\gamma_{\mathbf{k}} = \frac{\sqrt{\omega_k - 3\omega_H} g\omega_m^2 T \sin^2 2\theta_{\mathbf{k}}}{48\pi\omega_H (\omega_{ex} a^2)^{3/2}}$$

Зависимость вида $\sqrt{\omega_k - 3\omega_H}$ неаналитична и характерна почти для всех пороговых явлений. Вклад слияния в этой области может быть больше, но он не имеет особенностей по k , и поэтому распадный вклад хорошо различим.

Колоколов.34.2) колмогоровские стационарные спектры для спиновых волн

Найти колмогоровские стационарные спектры для поверхностных спиновых волн.

Solution

Для случая $\omega_{ex} k^2 a^2 \gg \omega_H$ закон дисперсии имеет вид $\omega_k \sim k^2$, а матричный элемент от k не зависит. Оказывается, что угловая зависимость у всех трех членов в I_k одинакова, $\sim (1 + 2\cos^2 \theta - 3\cos^4 \theta)$, поэтому

$$I_q \sim \int_0^q d^3 k_1 \frac{1}{k_1^2} \frac{1}{k_1^{2b}} \sim q^{1-2b}$$

Таким образом,

$$P_{d=3} \sim \int_0^k q^2 q^{1-2b} q^2 dq \sim k^{6-2b} = \text{Const} \rightarrow b = 3.$$

Стационарный спектр для спиновых волн имеет вид

$$n_k = \frac{\text{Const}}{k^3}.$$

3) Звуковые волны в трехмерном пространстве. В это случае $d = 3$, $\omega_k \sim k$, $V_{k,12} \sim k^{3/2}$. Тогда $[n_1 n_2 - n_k (n_1 + n_2)] \sim 1/k^{2b}$, $\delta(\omega_k - \omega_1 - \omega_2) \sim 1/k$, $|V|^2 \sim k^3$, так что

$$I_q \sim \int_0^q d^3 k_1 \frac{1}{k_1} \frac{1}{k_1^{2b}} k_1^3 \sim q^{5-2b}.$$

Поэтому

$$P_{d=3} \sim \int_0^k q q^{5-2b} q^2 dq \sim k^{9-2b} = \text{Const} \rightarrow b = 9/2.$$

Таким образом, стационарный спектр для звуковых волн в трехмерном пространстве имеет вид

$$n_k = \frac{\text{Const}}{k^{9/2}} \sim \frac{1}{\omega_k^{9/2}}$$

- спектр Захарова - Сагдеева.

18.2.3 Problems about Kinetics of Magnetic Materials 2

БРМ-6 Термогальваномагнитные явления

В качестве простейшей модели для описания термогальваномагнитных явлений в магнитном поле можно использовать кинетическое уравнение Больцмана в приближении времени релаксации (τ -приближение) и изотропную модель свободных электронов с дисперсией $\varepsilon(p) = p^2/2m$. Для простоты считать, что время столкновений зависит только от энергии электрона $\tau = \tau(\varepsilon)$, а магнитное поле достаточно слабое $(eH/mc)\tau = \Omega\tau \ll 1$ чтобы можно было ограничиться линейным по полю приближением.

- а) Найти выражения для плотности электрического тока j и для диссипативного потока энергии q .
- б) Вычислить коэффициенты Холла R , Нернста N и Ледюка-Риги L для случая металла (вырожденный электронный газ).

Solution

Пусть в проводнике имеются слабые и постоянные: электрическое поле $\mathbf{E}$, магнитное поле $\mathbf{H}$ и градиент температуры ∇T . Запишем в τ -приближении стационарное кинетическое уравнение Больцмана для функции распределения $f = f(\mathbf{r}, \mathbf{p})$

$$\mathbf{v} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + e \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} [\mathbf{v} \times \mathbf{H}] \right) \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = - \frac{f - f_0}{\tau(\varepsilon)}$$

где $f_0(\varepsilon)$ - равновесная функция распределения со свойствами

$$f_0(\varepsilon) = f_0\left(\frac{\varepsilon - \mu}{T}\right), \quad \frac{\partial f_0}{\partial \mu} = - \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}, \quad \frac{\partial f_0}{\partial T} = - \frac{\varepsilon - \mu}{T} \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}, \quad \varepsilon = \frac{p^2}{2m}$$

и $\mu = \mu(T)$ - химический потенциал, зависящий от температуры.

Представим неравновесную функцию распределения в следующем виде:

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = f_0(\varepsilon) + \delta f(\mathbf{r}, \mathbf{p})$$

В линейном приближении по возмущениям мы должны учесть в δf только члены, пропорциональные $\mathbf{E}$, $\mathbf{H}$ и ∇T . Для определения линейного вклада в δf от $\mathbf{E}$ и ∇T достаточно в левую часть кинетического уравнения подставить $f = f_0$. Для члена с магнитным полем дело обстоит сложнее. В силу $\partial f_0 / \partial \mathbf{p} = \mathbf{v} f'_0$ и $[\mathbf{v} \times \mathbf{H}] \mathbf{v} = 0$ вклад от магнитного поля в этом приближении просто выпадает. Таким образом, чтобы учесть вклад магнитного поля в δf , надо аккуратнее учесть производную $\partial(\delta f) / \partial \mathbf{p}$. В результате получим следующее уравнение для определения δf

$$\mathbf{v} \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{r}} + e \mathbf{E} \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{p}} + \frac{e}{c} [\mathbf{v} \times \mathbf{H}] \frac{\partial(\delta f)}{\partial \mathbf{p}} = - \frac{\delta f}{\tau(\varepsilon)}$$

Используя вышеприведенные соотношения для производных от f_0 , приходим к уравнению

$$\left(e (\mathbf{v} \mathbf{E}') - \frac{\varepsilon - \mu}{T} (\mathbf{v} \nabla T) \right) \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} + \frac{e}{c} [\mathbf{v} \times \mathbf{H}] \frac{\partial(\delta f)}{\partial \mathbf{p}} = - \frac{\delta f}{\tau(\varepsilon)}$$

которое необходимо решать. Для краткости мы ввели величину $\mathbf{E}' = \mathbf{E} - \nabla \mu /$ как отклонение от условия равновесия

$$e\Phi(\mathbf{r}) + \mu = \text{const}$$

во внешнем электрическом потенциале $\Phi(\mathbf{r})$.

Решение кинетического уравнения ищем в виде $\delta f = v\chi(\varepsilon)$, который сохраняет структуру свободного члена. После подстановки в уравнение воспользуемся соотношением

$$m \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} (v\chi(\varepsilon_p)) = \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} (p\chi(\varepsilon_p)) = \chi(\varepsilon_p) + v \left(p \frac{\partial \chi(\varepsilon_p)}{\partial \varepsilon_p} \right) = \chi + v(p\chi')$$

и учтем, что $[\mathbf{v} \times \mathbf{H}] \cdot \mathbf{v} = 0$ и $[\mathbf{v} \times \mathbf{H}] \cdot \chi = \mathbf{v} \cdot [\mathbf{H} \times \chi]$. В результате придем к уравнению

$$\left(e (\mathbf{v} \mathbf{E}') - \frac{\varepsilon - \mu}{T} (\mathbf{v} \nabla T) \right) \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} + \frac{e}{mc} \mathbf{v} \cdot [\mathbf{H} \times \chi] = - \frac{\mathbf{v} \chi}{\tau(\varepsilon)}$$

Таким образом, функция χ удовлетворяет уравнению

$$\left(e \mathbf{E}' - \frac{\varepsilon - \mu}{T} \nabla T \right) \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} + \frac{e}{mc} [\mathbf{H} \times \chi] = - \frac{\chi}{\tau(\varepsilon)}$$

Отсюда в линейном по полю H приближении уже найдем χ и δf

$$\chi \approx \left(e\mathbf{E}' - \frac{\varepsilon - \mu}{T} \nabla T - \frac{e\tau}{mc} \left[\mathbf{H} \times \left(e\mathbf{E}' - \frac{\varepsilon - \mu}{T} \nabla T \right) \right] \right) \tau \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right),$$

$$\delta f \approx v \left(e\mathbf{E}' - \frac{\varepsilon - \mu}{T} \nabla T - \frac{e\tau}{mc} \left[\mathbf{H} \times \left(e\mathbf{E}' - \frac{\varepsilon - \mu}{T} \nabla T \right) \right] \right) \tau \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right).$$

Малость второго слагаемого по сравнению с первым слагаемым дает критерий малости магнитного поля и линейного приближения:

$$\Omega\tau \ll 1 \text{ или } R_L = v/\Omega \gg l = v\tau; \quad \Omega = eH/mc,$$

где Ω - циклотронная частота. Второе неравенство означает, что ларморовский радиус орбиты электрона в магнитном поле R_L много больше длины свободного пробега l .

Как и выше, определяем плотность электрического тока $\mathbf{j}$ и диссипативный поток тепла $\mathbf{q}$ следующими интегралами:

$$\mathbf{j} = \int e v f d\Gamma_p \quad \text{и} \quad \mathbf{q} = \int v(\varepsilon - \mu) f d\Gamma_p,$$

где $d\Gamma_p = 2d^3p/(2\pi\hbar)^3$ - элемент объема в p -пространстве с учетом двух проекций спина. В силу изотропности спектра электронов равновесная часть функции распределения f_0 не дает вклада в ток и поток тепла. Изотропность спектра позволяет также упростить интегрирование по углам, согласно,

$$\int \mathbf{v}(\mathbf{v} \mathbf{A}) d\Gamma_p = \frac{\mathbf{A}}{3} \int v^2 d\Gamma_p$$

Члены, независимые от магнитного поля, дают известные вклады в ток $\mathbf{j}$ и поток тепла $\mathbf{q}$, рассмотренные в предыдущих задачах. Эти вклады выражаются через коэффициенты проводимости σ , Зеебека S , Пельтье Π и теплопроводности κ_E , которые были введены в предыдущих задачах. В результате получим

$$\mathbf{j} = \sigma (\mathbf{E}' - S \nabla T) - [\mathbf{H} \times \mathbf{E}'] \frac{1}{3} \int \frac{e^3 v^2 \tau^2}{mc} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) d\Gamma_p + [\mathbf{H} \times \nabla T] \frac{1}{3} \int \frac{e^2 v^2 \tau^2}{mc} \frac{(\varepsilon - \mu)}{T} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) d\Gamma_p$$

$$\mathbf{q} = \sigma \Pi \mathbf{E}' - \kappa_E \nabla T - [\mathbf{H} \times \mathbf{E}'] \frac{1}{3} \int \frac{e^2 v^2 \tau^2 (\varepsilon - \mu)}{mc} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) d\Gamma_p + [\mathbf{H} \times \nabla T] \frac{1}{3} \int \frac{e v^2 \tau^2}{mc} \frac{(\varepsilon - \mu)^2}{T} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) d\Gamma_p$$

Эти соотношения через кинетические коэффициенты выражают линейную связь между диссипативными потоками $\mathbf{j}, \mathbf{q}$ и малыми возмущениями $\mathbf{E}', \nabla T$ равновесного состояния системы:

$$\mathbf{j} = \sigma (\mathbf{E}' - S \nabla T) - \sigma^2 R [\mathbf{H} \times \mathbf{E}'] - \sigma N_E [\mathbf{H} \times \nabla T]$$

$$\mathbf{q} = \sigma \Pi \mathbf{E}' - \kappa_E \nabla T + \sigma M_E [\mathbf{H} \times \mathbf{E}'] + L_E [\mathbf{H} \times \nabla T]$$

Ограничиваясь только линейными членами по H , можно представить эти выражения в эквивалентном виде

$$\mathbf{E}' = \sigma^{-1} \mathbf{j} + S \nabla T + R [\mathbf{H} \times \mathbf{j}] + N [\mathbf{H} \times \nabla T], \quad N = N_E + \sigma S R$$

$$\mathbf{q} = \Pi \mathbf{j} - \kappa \nabla T + M [\mathbf{H} \times \mathbf{j}] + L [\mathbf{H} \times \nabla T], \quad M = M_E + \sigma \Pi R$$

$$L = L_E + \sigma \Pi N_E + \sigma S M_E + \sigma^2 \Pi S R, \quad \kappa \kappa_E - \sigma \Pi S$$

Легко видеть, что перекрестные коэффициенты N_E и M_E связаны соотношением

$$M_E = N_E T$$

а с учетом соотношения Томсона $\Pi = S T$ подобное соотношение, представляющее собой принцип Онсагера для симметрии кинетических коэффициентов, сохраняется и для коэффициентов N и M

$$M = N T$$

С помощью коэффициентов Холла R , Нернста N , и Ледюка-Риги L описывают термомагнитные явления и, соответственно, эффекты Холла, Нернста-Эттингсхаузена, и Ледюка-Риги.

Вычисление кинетических коэффициентов

Интегралы, определяющие коэффициенты R, N_E, L_E , аналогичны интегралам, возникающим в термоэлектрических явлениях. Поэтому также удобно ввести плотность состояний $\nu(\varepsilon)$ и перейти к интегрированию по энергии:

$$\nu(\varepsilon) = \frac{m\sqrt{2m\varepsilon}}{\pi^2\hbar^3}, \quad d\Gamma_p = \nu(\varepsilon)d\varepsilon$$

Коэффициент Холла определяется из выражения

$$\sigma^2 R = \frac{1}{3} \int \frac{e^3 v^2(\varepsilon) \tau^2(\varepsilon)}{mc} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \nu(\varepsilon) d\varepsilon = \frac{e^3}{3mc} (v^2 \tau^2 \nu)_\mu$$

Здесь $(\dots)_\mu$ означает, что выражение взято при значении энергии ε , равной химическому потенциалу μ . С учетом того, что $\sigma = e^2 (v^2 \tau \nu)_\mu / 3 = ne^2 \tau_\mu / m$, где n - плотность электронов, находим значение коэффициента Холла

$$R = \frac{1}{ne\sigma}$$

Коэффициент Нернста N_E , определяемый в отсутствие электрического поля, вводится следующей формулой:

$$\sigma N_E = -\frac{1}{3} \int \frac{e^2 v^2 \tau^2}{mc} \frac{\varepsilon - \mu}{T} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \nu(\varepsilon) d\varepsilon = -\frac{\pi^2}{9} \frac{e^2 T}{mc} (v^2 \tau^2 \nu)_\mu'$$

Отсюда мы найдем

$$N_E = -\frac{\pi^2 T}{3mc} \frac{(v^2 \tau^2 \nu)_\mu'}{(v^2 \tau \nu)_\mu}$$

При $\tau(\varepsilon) = \text{const}$ имеем

$$N_E = -\frac{\pi^2 \tau T}{3mc} \frac{(v^2 \nu)_\mu'}{(v^2 \nu)_\mu} = -\frac{\pi^2 \tau}{2mc} \frac{T}{\mu} = -\frac{\tau}{mcn} s(T)$$

$$s(T) = \frac{\pi^2}{3} T \nu(\mu) = \frac{\pi^2}{2} \frac{nT}{\mu}$$

где $s(T)$ - плотность энтропии вырожденного электронного газа.

Далее рассмотрим коэффициент Нернста N , согласно $N = N_E + \sigma S R$. Подставляя следующие соотношения:

$$\sigma S = \frac{\pi^2}{9} eT (v^2 \tau \nu)_\mu', \quad \sigma^2 R = \frac{e^3}{3mc} (v^2 \tau^2 \nu)_\mu, \quad \sigma = \frac{1}{3} e^2 (v^2 \tau \nu)_\mu$$

в выражение для N , мы находим, что

$$N = N_E + \sigma S \frac{\sigma^2 R}{\sigma^2} = -\frac{\pi^2 T}{3mc} \frac{(v^2 \tau^2 \nu)_\mu'}{(v^2 \tau \nu)_\mu} + \frac{\pi^2 T}{3mc} (v^2 \tau \nu)_\mu' \frac{(v^2 \tau^2 \nu)_\mu}{(v^2 \tau \nu)_\mu^2} = -\frac{\pi^2 T}{3mc} \frac{\tau_\mu \tau_\mu' (v^2 \nu)_\mu}{(v^2 \tau \nu)_\mu} = -\frac{\pi^2 T}{3mc} \frac{\partial \tau(\mu)}{\partial \mu}.$$

Последнее выражение представляет собой формулу Зондхеймера. Для постоянного времени релаксации $\tau(\varepsilon) = \text{const}$ коэффициент Нернста N оказался равным нулю.

Перейдем к вычислению коэффициента Ледюка-Риги L_E , который был определен при условии отсутствия электрического поля:

$$L_E = \frac{1}{3} \int \frac{ev^2 \tau^2}{mc} \frac{(\varepsilon - \mu)^2}{T} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \nu(\varepsilon) d\varepsilon = \frac{\pi^2}{9} \frac{eT}{mc} (v^2 \tau^2 \nu)_\mu = \frac{\pi^2 T}{3} \frac{(\sigma \tau)_\mu}{e\tau c}$$

В отличие от коэффициентов Нернста N и N_E в металлах, где выполняется условие вырожденности электронов $T \ll \mu$, можно не различать коэффициенты Ледюка-Риги L и L_E с точностью до $T^2/\mu^2 \ll 1$ и считать $L \approx L_E$. Действительно,

$$L - L_E = 2\sigma S T N_E + \sigma^2 S^2 T R = -\frac{\pi^4}{27} \frac{eT^3}{mc} \left[2 \frac{(v^2 \tau \nu)_\mu' (v^2 \tau^2 \nu)_\mu'}{(v^2 \tau \nu)_\mu} - (v^2 \tau \nu)_\mu'^2 \frac{(v^2 \tau^2 \nu)_\mu}{(v^2 \tau \nu)_\mu^2} \right].$$

Тогда сразу находим

$$\frac{L - L_E}{L_E} = -\frac{\pi^2 T^2}{3} \frac{(v^2 \tau \nu)_\mu'}{(v^2 \tau \nu)_\mu} \left[\frac{2 (v^2 \tau^2 \nu)_\mu' - (v^2 \tau \nu)_\mu' \tau_\mu}{(v^2 \tau^2 \nu)_\mu} \right] \sim \left(\frac{T}{\mu} \right)^2 \ll 1.$$

БРМ-7. Тензор электропроводности металла

Найти тензор электропроводности металла $\sigma_{\alpha\beta}$ в постоянном однородном магнитном поле $\mathbf{H}$, считая что функция распределения электронов $n(\mathbf{p})$ подчиняется кинетическому уравнению Больцмана в приближении времени релаксации $\tau = \tau(\varepsilon)$, и предполагая простой электронный спектр $\varepsilon(\mathbf{p}) = \mathbf{p}^2/2m$.

Solution

Запишем уравнение на функцию распределения электронов, подверженных действию силы Лоренца,

$$e \left(\mathbf{E} + \frac{e}{c} [\mathbf{v} \times \mathbf{H}] \right) \frac{\partial n}{\partial \mathbf{p}} = - \frac{n - n_0}{\tau(\varepsilon_p)}$$

Здесь $n_0 = n_0(\varepsilon_p)$ - равновесная функция распределения. Чтобы найти электропроводность, нам достаточно удержать в уравнении только линейные по полю $\mathbf{E}$ члены. Кроме того, в члене с магнитным полем мы вычтем такой же член, но с равновесной функцией распределения n_0 , воспользовавшись тем, что $[\mathbf{v} \times \mathbf{H}] \partial n_0 / \partial \mathbf{p} \equiv 0$. Тогда получим

$$e(v\mathbf{E}) \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon_p} + \frac{e}{c} [\mathbf{v} \times \mathbf{H}] \frac{\partial (n - n_0)}{\partial \mathbf{p}} = - \frac{n - n_0}{\tau(\varepsilon_p)}$$

Ищем решение уравнения в виде $n - n_0 = v\chi(\varepsilon_p) \partial n_0 / \partial \varepsilon_p$. Подстановка дает

$$e(v\mathbf{E}) + \frac{e}{mc} [\mathbf{v} \times \mathbf{H}] \chi(\varepsilon_p) = - \frac{v\chi(\varepsilon_p)}{\tau(\varepsilon_p)}$$

Здесь мы учли, что $v = \mathbf{p}/m$ и члены от производной по импульсу, пропорциональные скорости, тождественно зануляются в результате смешанного произведения.

Заметив, что $[\mathbf{v} \times \mathbf{H}] \chi = [\mathbf{H} \times \chi] \mathbf{v}$, мы сравним коэффициенты при $\mathbf{v}$ и затем получим

$$e\mathbf{E} + [\boldsymbol{\Omega} \times \chi] = - \frac{\chi}{\tau}, \quad \boldsymbol{\Omega} = \frac{e\mathbf{H}}{mc}$$

где $\Omega = eH/mc$ - циклотронная частота. Чтобы найти вектор χ , умножим обе части уравнения на вектор $\boldsymbol{\Omega}$, один раз скалярно, а другой раз - векторно, получим:

$$e(\boldsymbol{\Omega} \mathbf{E}) = -(\boldsymbol{\Omega} \chi)/\tau$$

$$e[\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{E}] + \boldsymbol{\Omega}(\boldsymbol{\Omega} \chi) - \Omega^2 \chi = -[\boldsymbol{\Omega} \times \chi]/\tau$$

Из последних трех уравнений находим χ и затем функцию распределения $n(\mathbf{p})$

$$\chi = - \frac{e\tau}{1 + \Omega^2 \tau^2} (\mathbf{E} + [\mathbf{E} \times \boldsymbol{\Omega}] \tau + \boldsymbol{\Omega}(\mathbf{E} \boldsymbol{\Omega}) \tau^2)$$

$$n = n_0 + \frac{e\tau}{1 + \Omega^2 \tau^2} (\mathbf{v} + [\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{v}] \tau + \boldsymbol{\Omega}(\boldsymbol{\Omega} \mathbf{v}) \tau^2) \cdot \mathbf{E} \left(- \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} \right)$$

Плотность тока j с учетом двух проекций спина определяется выражением

$$j = \int e v n(\mathbf{p}) \frac{2d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} = \int \frac{e^2 \tau}{1 + \Omega^2 \tau^2} v (\mathbf{v} + [\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{v}] \tau + \boldsymbol{\Omega}(\boldsymbol{\Omega} \mathbf{v}) \tau^2) \cdot \mathbf{E} \left(- \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} \right) \frac{2d^3 p}{(2\pi\hbar)^3}.$$

Далее мы учитываем, что равновесная функция распределения n_0 вклада в ток не дает. В результате тензор проводимости $\sigma_{\alpha\beta}$, который мы определим согласно соотношению $j_\alpha = \sigma_{\alpha\beta} E_\beta$, будет равен

$$\sigma_{\alpha\beta} = \frac{e^2}{3} \int \frac{v^2 \tau}{1 + \Omega^2 \tau^2} (\delta_{\alpha\beta} + e_{\alpha\gamma\beta} \Omega_\gamma \tau + \Omega_\alpha \Omega_\beta \tau^2) \left(- \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} \right) \frac{2d^3 p}{(2\pi\hbar)^3}$$

Здесь мы уже воспользовались сферической симметрией электронного спектра для усреднения по пространственному углу вектора импульса $\mathbf{p}$

$$\langle v_\alpha v_\beta \rangle = (v^2/3) \delta_{\alpha\beta}$$

и обозначили через $e_{\alpha\beta\gamma}$ совершенно антисимметричный единичный тензор.

В металле, как вырожденной ферми-жидкости, интеграл набирается в области энергий, близких к химическому потенциалу $\varepsilon_p = \mu$, и можно положить, что производная равновесной функции распределения по энергии примерно равна $n'_0 \approx -\delta(\varepsilon - \mu)$. Окончательно, имеем

$$\sigma_{\alpha\beta} = \frac{ne^2}{m} \frac{\tau(\mu)}{1 + \Omega^2 \tau^2(\mu)} [\delta_{\alpha\beta} + e_{\alpha\gamma\beta} \Omega_\gamma \tau(\mu) + \Omega_\alpha \Omega_\beta \tau^2(\mu)]$$

где n - концентрация электронов. Такой тензор проводимости соответствует следующему соотношению между током и электрическим полем:

$$\mathbf{j} = \frac{ne^2}{m} \frac{\tau}{1 + \Omega^2 \tau^2} [\mathbf{E} + [\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{E}] \tau + \boldsymbol{\Omega}(\boldsymbol{\Omega} \mathbf{E}) \tau^2]$$

Выпишем теперь матрицу электропроводности $\sigma_{\alpha\beta}$ и обратную к ней матрицу сопротивления $\rho_{\alpha\beta} = \sigma_{\alpha\beta}^{-1}$, когда магнитное поле направлено вдоль оси z

$$\sigma_{\alpha\beta} = \begin{pmatrix} \frac{\sigma_0}{1+\Omega^2\tau^2} & -\frac{\sigma_0\Omega\tau}{1+\Omega^2\tau^2} & 0 \\ \frac{\sigma_0\Omega\tau}{1+\Omega^2\tau^2} & \frac{\sigma_0}{1+\Omega^2\tau^2} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_0 \end{pmatrix}, \quad \rho_{\alpha\beta} = \begin{pmatrix} \sigma_0^{-1} & -RH & 0 \\ RH & \sigma_0^{-1} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_0^{-1} \end{pmatrix}$$

Здесь были введены обозначения $\sigma_0 = ne^2\tau/m$, $RH = -\Omega\tau/\sigma_0$ и $R = -1/(nec)$ - постоянная Холла.

Зависимость электрического поля $\mathbf{E}$ от плотности тока $\mathbf{j}$ выражается с помощью матрицы сопротивления. В векторном виде эта зависимость может быть представлена как

$$\mathbf{E} = \sigma_0^{-1} \mathbf{j} + R[\mathbf{H} \times \mathbf{j}]$$

В заключение отметим, что в двумерном металле (металлической пленке) сопротивление принято измерять в единицах кванта сопротивления фон Клитцинга $R_K = h/e^2 \approx 25,8$ кОм ($h = 2\pi\hbar$), а холловское сопротивление записывают в виде $\rho_{xy} = -\text{sgn}(e)R_K/\nu$, где безразмерный параметр $\nu = 2\pi n l_H^2$ называется фактор заполнения уровней Ландау и определяется произведением поверхностной плотности зарядов n и магнитной длиной $l_H = \sqrt{\hbar c/|e|\hbar}$.

18.2.4 Problems about Kinetics in Metals and in Normal Fermi Liquid

БРМ-8. Collision integrals in Fermi liquid

Определить в борновском приближении интеграл столкновений для вырожденной ферми-жидкости. Матричный элемент взаимодействия двух фермионов считать равным $U(q)$, где q - переданный импульс в результате столкновения двух фермионов. Найти зависимость времени релаксации τ от энергии и температуры в области унергий возбуждений и температур, малых по сравнению с энергией Ферми ε_F .

8

Интеграл столкновений обычно представляют в виде разности двух членов. Первый член отвечает за число актов прихода частиц (in), а второй - за число актов ухода частиц (out). Приход всех частиц из состояния с некоторым импульсом $\mathbf{p}'$ в состояние с импульсом $\mathbf{p}$ запишем в следующем виде ($\mathbf{p}' \rightarrow \mathbf{p}$):

$$\text{St}[n_p]_{\text{in}} = \sum_{\mathbf{p}'} W_{\mathbf{p},\mathbf{p}'} n_{\mathbf{p}'} (1 - n_p),$$

где $W_{\mathbf{p},\mathbf{p}'}$ - вероятность перехода частицы из состояния с импульсом $\mathbf{p}'$ в состояние с импульсом $\mathbf{p}$ и n_p - функция распределения частиц. Появление дополнительного множителя $(1 - n_p)$ по сравнению с множителем $n_{\mathbf{p}'}$, отражающем просто число исходных состояний, связано со статистикой Ферми, согласно которой переход частицы после столкновения возможен только в незанятое состояние.

Член с уходом частиц из состояния с импульсом $\mathbf{p}$ в некоторое состояние с импульсом $\mathbf{p}'$ представим в аналогичном виде ($\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p}'$):

$$\text{St}[n_p]_{\text{out}} = \sum_{\mathbf{p}'} W_{\mathbf{p}',\mathbf{p}} n_p (1 - n_{\mathbf{p}'})$$

где $W_{\mathbf{p}',\mathbf{p}}$ - вероятность перехода частицы из состояния с импульсом $\mathbf{p}$ в состояние с импульсом $\mathbf{p}'$. Дополнительный множитель $(1 - n_{\mathbf{p}'})$, связанный со статистикой Ферми, характеризует число незаполненных конечных состояний.

Вероятности переходов $\mathbf{p}' \rightarrow \mathbf{p}$ и $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p}'$ мы определим, воспользовавшись борновским приближением и статистикой Ферми:

$$W_{\mathbf{p},\mathbf{p}'} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2} |U_{\mathbf{p},\mathbf{p}'}|^2 n_{\mathbf{p}_1} (1 - n_{\mathbf{p}_2}) \delta(\varepsilon_{\mathbf{p}} + \varepsilon_{\mathbf{p}_2} - \varepsilon_{\mathbf{p}'} - \varepsilon_{\mathbf{p}_1}) \delta(\mathbf{p} + \mathbf{p}_2 - \mathbf{p}' - \mathbf{p}_1)$$

$$W_{\mathbf{p}',\mathbf{p}} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2} |U_{\mathbf{p}',\mathbf{p}}|^2 n_{\mathbf{p}_2} (1 - n_{\mathbf{p}_1}) \delta(\varepsilon_{\mathbf{p}'} + \varepsilon_{\mathbf{p}_1} - \varepsilon_{\mathbf{p}} - \varepsilon_{\mathbf{p}_2}) \delta(\mathbf{p}' + \mathbf{p}_1 - \mathbf{p} - \mathbf{p}_2)$$

Здесь $U_{\rho', \mathbf{p}} = U_{\mathbf{p}' - \mathbf{p}} = \int d^3 r U(\mathbf{r}) e^{-i(\rho' - \rho)r}$ - фурье-компонента потенциала двухчастичного взаимодействия $U(\mathbf{r})$. Множители типа n_p и $1 - n_p$ отвечают занятым начальным и незанятым конечным состояниям. На рис. 3.2 изображены диаграммы, иллюстрирующие процессы рассеяния двух фермионов и формулы для двух вкладов в интеграл столкновений. Две δ -функции выражают законы сохранения энергии и импульса при столкновении частиц.

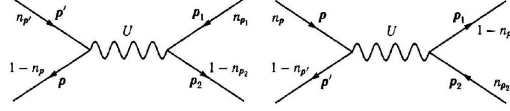


Рис. 3.2. Две возможные диаграммы рассеяния двух фермионов. Сплошная линия отвечает фермиону, а волнистая - взаимодействию. Входящей линии сопоставляется множитель n , а выходящей линии - множитель $1 - n$

Интеграл столкновений определяется разностью двух вкладов приходом и уходом:

$$\text{St}[n_p] = \text{St}[n_p]_{\text{in}} - \text{St}[n_p]_{\text{out}}.$$

Для дальнейших вычислений удобно ввести следующие обозначения для импульсов и энергий:

$$\mathbf{p} = \mathbf{k}, \quad \mathbf{p}_1 = \mathbf{k}', \quad \mathbf{p}_2 = \mathbf{k}' + \mathbf{q}, \quad \mathbf{p}' = \mathbf{p} + \mathbf{q} = \mathbf{k} + \mathbf{q}, \quad \omega = \varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k} + \mathbf{q}}$$

Далее с учетом интегрирования по импульсу $\mathbf{p}_2$, которое снимает одну δ -функцию, мы приходим к следующему выражению, в котором остается интегрирование только по двум импульсам:

$$\text{St}[n_k] = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{q}} |U_{\mathbf{q}}|^2 [n_{\mathbf{k} + \mathbf{q}} (1 - n_{\mathbf{k}}) n_{\mathbf{k}'} (1 - n_{\mathbf{k}' + \mathbf{q}}) - n_{\mathbf{k}} (1 - n_{\mathbf{k} + \mathbf{q}}) n_{\mathbf{k}' + \mathbf{q}} (1 - n_{\mathbf{k}'})] \delta(\varepsilon_{\mathbf{k} + \mathbf{q}} + \varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}' + \mathbf{q}})$$

При выводе мы учли, что $|U_{\mathbf{q}}|^2 = U_{\mathbf{q}} U_{-\mathbf{q}} = |U_{-\mathbf{q}}|^2$ в силу вещественности потенциала взаимодействия $U(\mathbf{r})$. Диаграммы, иллюстрирующие процессы рассеяния двух фермионов и запись формулы для интеграла столкновений в новых обозначениях, показаны на рис. 3.3.

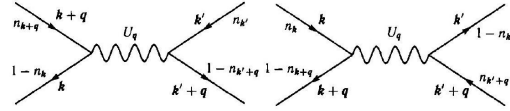


Рис. 3.3. Две возможные диаграммы рассеяния двух фермионов. Сплошная линия отвечает фермиону, а волнистая - взаимодействию. Передача импульса в процессе рассеяния равна $\mathbf{q}$. Входящей линии сопоставляется множитель n , а выходящей линии - множитель $1 - n$

Для дальнейшего преобразования $\text{St}[n_k]$ мы воспользуемся следующим приемом, а именно введем два дополнительных интегрирования по энергии с помощью двух δ -функций: $\delta(\varepsilon_{\mathbf{k} + \mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \omega)$ и $\delta(\varepsilon' - \varepsilon_{\mathbf{k}'})$, каждая из которых после интегрирования по ω и ε' дает по тождественной единице. Импульс $\mathbf{q}$ и энергия ω имеют смысл изменения импульса и энергии в результате рассеяния частицы на другой частице. Обозначая для краткости $\varepsilon = \varepsilon_{\mathbf{k}}$, мы запишем интеграл столкновений $\text{St}[n_k]$ в виде:

$$\begin{aligned} \text{St}[n_k] = & \int d\omega \int d\varepsilon' \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{q}} |U_{\mathbf{q}}|^2 \times \\ & \times [n_{\mathbf{k} + \mathbf{q}} (1 - n_{\mathbf{k}}) n_{\mathbf{k}'} (1 - n_{\mathbf{k}' + \mathbf{q}}) - n_{\mathbf{k}} (1 - n_{\mathbf{k} + \mathbf{q}}) n_{\mathbf{k}' + \mathbf{q}} (1 - n_{\mathbf{k}'})] \times \\ & \times \delta(\varepsilon_{\mathbf{k} + \mathbf{q}} + \varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}' + \mathbf{q}}) \delta(\varepsilon' - \varepsilon_{\mathbf{k}'}) \delta(\varepsilon_{\mathbf{k} + \mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \omega) \end{aligned}$$

или с учетом наличия δ -функций

$$\begin{aligned} \text{St}[n_{\varepsilon}] = & \int d\omega \int d\varepsilon' \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{q}} |U_{\mathbf{q}}|^2 \times \\ & \times [n_{\varepsilon + \omega} (1 - n_{\varepsilon}) n_{\varepsilon'} (1 - n_{\varepsilon' + \omega}) - n_{\varepsilon} (1 - n_{\varepsilon + \omega}) n_{\varepsilon' + \omega} (1 - n_{\varepsilon'})] \times \\ & \times \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}' + \mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'} - \omega) \delta(\varepsilon' - \varepsilon_{\mathbf{k}'}) \delta(\varepsilon_{\mathbf{k} + \mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \omega). \end{aligned}$$

Вводя спектральную плотность ($\varepsilon = \varepsilon_{\mathbf{k}}$):

$$K(\varepsilon, \varepsilon', \omega) = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{q}} |U_{\mathbf{q}}|^2 \delta(\varepsilon_{\mathbf{k} + \mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \omega) \delta(\varepsilon' - \varepsilon_{\mathbf{k}'}) \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}' + \mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'} - \omega)$$

мы запишем интеграл столкновений в следующем наглядном виде:

$$\begin{aligned} \text{St}[n_{\varepsilon}] = & \int d\omega \int d\varepsilon' K(\varepsilon, \varepsilon', \omega) \times \\ & \times [n_{\varepsilon + \omega} (1 - n_{\varepsilon}) n_{\varepsilon'} (1 - n_{\varepsilon' + \omega}) - n_{\varepsilon} (1 - n_{\varepsilon + \omega}) n_{\varepsilon' + \omega} (1 - n_{\varepsilon'})] \end{aligned}$$

Порядок величины спектральной плотности $K(\varepsilon, \varepsilon', \omega)$ оценим сначала из размерных соображений. Действительно, каждая из трех δ -функций имеет размерность $1/\varepsilon$, а два интегрирования по импульсам $\mathbf{k}'$ и $\mathbf{q}$ дадут размерный вклад порядка $(\nu(\varepsilon)\varepsilon)^2$, где $\nu(\varepsilon)$ - плотность состояний. В результате получим

$$K \sim \frac{(\nu(\varepsilon)\varepsilon)^2}{\varepsilon^3} \frac{|U|^2}{\hbar} \sim \frac{g^2}{\hbar\varepsilon}, \quad g = \nu|U|$$

где так введенная безразмерная величина g представляет собой константу фермион-фермионного взаимодействия. Поскольку в вырожденной ферми-жидкости все характерные энергии порядка энергии Ферми ε_F , то можно положить для оценки $\varepsilon \sim \varepsilon_F$ и, соответственно, $\nu \sim \nu(\varepsilon_F) \sim \varepsilon_F^{-1}a^{-3}$ и $|U_q| \sim \varepsilon_F a^3$, где a - порядка среднего расстояния между частицами. Тогда получим оценку

$$K \sim \frac{g^2}{\hbar\varepsilon_F} \quad \text{и} \quad g \sim 1$$

Обсудим вычисление $K(\varepsilon, \varepsilon', \omega)$ подробнее. Нас будут интересовать энергии $\varepsilon, \varepsilon'$, близкие к энергии Ферми ε_F , и малые передачи энергии $|\omega| \ll \varepsilon_F$. В подынтегральном выражении наибольший интерес представляет область малых передач импульсов $q \ll p_F$, в которой подынтегральное выражение расходится наиболее сильно благодаря совпадению аргументов в δ -функциях. При малых q имеем разложение:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} &\approx \varepsilon_{\mathbf{k}} + qv_{\mathbf{k}}\mathbf{e}_q\mathbf{e}_{\mathbf{k}} = \varepsilon_{\mathbf{k}} + qv_F \cos \vartheta, & v_{\mathbf{k}} &\sim v_F \\ \varepsilon_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}} &\approx \varepsilon_{\mathbf{k}'} + qv_{\mathbf{k}'}\mathbf{e}_q\mathbf{e}_{\mathbf{k}'} = \varepsilon_{\mathbf{k}'} + qv_F \cos \vartheta', & v_{\mathbf{k}'} &\sim v_F \end{aligned}$$

где $\mathbf{e}_q, \mathbf{e}_{\mathbf{k}}, \mathbf{e}_{\mathbf{k}'}$ - единичные векторы, направленные вдоль векторов $\mathbf{q}, \mathbf{k}, \mathbf{k}'$, соответственно. Итак, требуется вычислить интеграл

$$\begin{aligned} K = \frac{2\pi}{\hbar} \int_0^\infty \frac{4\pi q^2 dq}{(2\pi\hbar)^3} |U_q|^2 \int d\varepsilon' \delta(\varepsilon' - \varepsilon_{\mathbf{k}'}) \nu(\varepsilon_{\mathbf{k}'}) d\varepsilon_{\mathbf{k}'} \times \\ \times \int \frac{d\Omega_q}{4\pi} \int \frac{d\Omega_{\mathbf{k}'}}{4\pi} \delta(qv_F \cos \vartheta - \omega) \delta(qv_F \cos \vartheta' - \omega) \end{aligned}$$

После вычисления по двум пространственным углам интеграл приводится к виду

$$K = \frac{2\pi}{\hbar} \int_0^\infty \frac{q^2 dq}{2\pi^2 \hbar^3} |U_q|^2 \nu(\varepsilon') \frac{\theta(qv_F - |\omega|)}{(2qv_F)^2} = \frac{2\pi}{\hbar} \nu(\varepsilon') \int_{|\omega|/v_F}^\infty \frac{dq}{8\pi^2 \hbar^3} \frac{|U_q|^2}{v_F^2}$$

Мы видим, что расходимость $1/q^2$ при малых импульсах q в трехмерном случае полностью компенсируется, и следовательно подынтегральная функция оказывается неособой при малых передачах энергии $\omega \rightarrow 0$ и импульса $q \rightarrow 0$. Таким образом, зависимость K от ω - несущественна, и для приближенной оценки мы можем положить нижний предел интегрирования, равным нулю. Отметим, что в двумерной ферми-жидкости это не так, поскольку расходимость $1/q^2$ не компенсируется числителем, который в этом случае будет пропорционален только q в первой степени. В результате спектральная функция K уже будет существенно зависеть от ω .

Верхний предел интегрирования по импульсу $q_{\max}$ можно приближенно ограничить импульсом порядка $\sim 2p_F$. Действительно, рассмотрим аргумент $\varepsilon_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'} - \omega$ в δ -функции. Как мы видели, можно положить $\omega = 0$, и ненулевой вклад от δ -функции возможен только в области импульсов q , удовлетворяющих равенству $\varepsilon_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}} = \varepsilon_{\mathbf{k}'}$. В области больших импульсов q , очевидно, это равенство можно удовлетворить при $\mathbf{q} = -2\mathbf{k}'$, т. е. $q = 2k'$. Для спектра $\varepsilon_{\mathbf{k}} = k^2/2m$ точный результат был бы просто $q \leq q_{\max} = 2k'$. С учетом того, что мы интересуемся областью значений $\varepsilon' \sim \varepsilon_F$ и $k' \sim p_F$, будем приближенно считать, что $q_{\max} \sim 2p_F$. Итак,

$$\begin{aligned} K &\approx \frac{2\pi}{\hbar} \nu(\varepsilon_F) \int_0^{2p_F} \frac{dq}{2\pi^2 \hbar^3} \frac{|U_q|^2}{(2v_F)^2} \sim \frac{\pi \nu^2(\varepsilon_F)}{\hbar} \frac{|U_0|^2}{p_F v_F} \sim \frac{g^2}{\hbar\varepsilon_F} \\ \nu(\varepsilon_F) &= \frac{p_F^2}{2\pi^2 \hbar^3 v_F}, \quad g = \nu(\varepsilon_F) |U_0| \end{aligned}$$

где $\nu(\varepsilon_F)$ - плотность состояний на поверхности Ферми с фиксированной проекцией спина, g - безразмерная константа взаимодействия. Также мы предположили, что радиус потенциала взаимодействия $U(r)$ не превышает среднего расстояния между частицами $\sim \hbar/p_F$, и поэтому мы можем принять для оценки: $U(q \lesssim 2p_F) \approx U_0$.

Вернемся к интегралу столкновений, который запишем в следующем виде:

St $[n_\varepsilon] = K \int d\omega d\varepsilon' [n_{\varepsilon+\omega} (1 - n_\varepsilon) n_{\varepsilon'} (1 - n_{\varepsilon'+\omega}) - n_\varepsilon (1 - n_{\varepsilon+\omega}) n_{\varepsilon'+\omega} (1 - n_{\varepsilon'})]$.

Как и должно быть, интеграл столкновений обращается в нуль при равновесной функции распределения Ферми $n = n_0(\varepsilon)$. Это легко видеть из равенства

$$\frac{n_{\varepsilon+\omega}}{1 - n_{\varepsilon+\omega}} \frac{n_{\varepsilon'}}{1 - n_{\varepsilon'}} = \frac{n_{\varepsilon'+\omega}}{1 - n_{\varepsilon'+\omega}} \frac{n_\varepsilon}{1 - n_\varepsilon}$$

которое тождественно выполняется при $n = n_0(\varepsilon)$ в силу:

$$\frac{n_0}{1 - n_0} = \exp\left(-\frac{\varepsilon - \mu}{T}\right)$$

Определим время релаксации или время столкновений τ_ε согласно соотношению:

$$\text{St}[n_0 + \delta n_\varepsilon] - \text{St}[n_0] = -\frac{\delta n_\varepsilon}{\tau_\varepsilon}, \quad \text{или} \quad \frac{1}{\tau_\varepsilon} = -\frac{\delta}{\delta n_\varepsilon} (\text{St}[n_\varepsilon]) \Big|_{n_\varepsilon = n_0}$$

где δn_ε - малое отклонение от равновесия. Тогда мы находим

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau_\varepsilon} &= K \int d\omega d\varepsilon' [n_{\varepsilon+\omega} n_{\varepsilon'} (1 - n_{\varepsilon'+\omega}) + (1 - n_{\varepsilon+\omega}) (1 - n_{\varepsilon'}) n_{\varepsilon'+\omega}] = \\ &= K \int d\omega d\varepsilon' [n_{\varepsilon+\omega} (n_{\varepsilon'} - n_{\varepsilon'+\omega}) + n_{\varepsilon'+\omega} (1 - n_{\varepsilon'})] \end{aligned}$$

причем в качестве функций n мы возьмем равновесные функции распределения $n = n_0$. Воспользовавшись значениями следующих интегралов:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon' [n_0(\varepsilon') - n_0(\varepsilon' + \omega)] &= -T \ln \frac{1 + e^{-(\varepsilon' - \mu)/T}}{1 + e^{-(\varepsilon' - \mu + \omega)/T}} \Big|_{-\infty}^{\infty} = \omega \\ \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon' n_0(\varepsilon' + \omega) [1 - n_0(\varepsilon')] &= \frac{T}{e^{\omega/T} - 1} \ln \frac{1 + e^{-(\varepsilon' - \mu + \omega)/T}}{1 + e^{-(\varepsilon' - \mu)/T}} \Big|_{-\infty}^{\infty} = \frac{\omega}{e^{\omega/T} - 1}, \end{aligned}$$

мы получим

$$\frac{1}{\tau_\varepsilon} = K \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \left(\frac{\omega}{e^{(\varepsilon + \omega - \mu)/T} + 1} + \frac{\omega}{e^{\omega/T} - 1} \right) = \frac{K}{2} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \omega \left(\text{cth} \frac{\omega}{2T} - \text{th} \frac{\varepsilon + \omega - \mu}{2T} \right)$$

Вычисляя интеграл с помощью формулы

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx x (\text{cth} x - \text{th}(x + a)) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{x^2}{2} \left(\frac{1}{\text{sh}^2 x} + \frac{1}{\text{ch}^2(x + a)} \right) = \frac{\pi^2}{4} + a^2$$

мы найдем окончательный ответ для времени релаксации:

$$\frac{1}{\tau_\varepsilon(T)} = \frac{K}{2} [(\pi T)^2 + (\varepsilon - \mu)^2] \sim g^2 \frac{(\pi T)^2 + (\varepsilon - \mu)^2}{\hbar \varepsilon_F}$$

Как отсюда видно, величина затухания элементарных возбуждений или квазичастиц $\hbar/\tau$ будет мала по сравнению с их характерной энергией возбуждения порядка $|\varepsilon - \mu|$ или T до тех пор, пока выполняются неравенства: T и $|\varepsilon - \mu| \ll \mu \sim \varepsilon_F$. В обычных металлах это условие предполагает температуру $T \ll T_F \sim 10^4 \div 10^5$ K, а в нейтральной ферми-жидкости изотопа гелия ^3He - температуру $T < 0,3$ K.

БРМ-9. Collision integrals in 2D Fermi liquid

Определить в борновском приближении интеграл столкновений в случае двумерного вырожденного ферми-газа. Матричный элемент взаимодействия двух фермионов считать равным $U(\mathbf{q})$, где $\mathbf{q}$ - переданный импульс в результате столкновения двух фермионов. Найти зависимость времени релаксации τ от энергии и температуры в области энергий возбуждений и температур, малых по сравнению с энергией Ферми ε_F .

9.

Воспользуемся результатами предыдущей задачи для трехмерного случая и запишем интеграл столкновений в том же виде:

$$\begin{aligned} \text{St}[n_k] &= \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{k', \mathbf{q}} |U_{\mathbf{q}}|^2 [n_{k+\mathbf{q}} (1 - n_k) n_{k'} (1 - n_{k'+\mathbf{q}}) - n_k (1 - n_{k+\mathbf{q}}) n_{k'+\mathbf{q}} (1 - n_{k'})] \times \\ &\quad \times \delta(\varepsilon_{k+\mathbf{q}} + \varepsilon_{k'} - \varepsilon_k - \varepsilon_{k'+\mathbf{q}}) \end{aligned}$$

где теперь все импульсы являются двухмерными векторами. Мы определим время релаксации или время столкновений τ_k согласно прежнему соотношению:

$$\text{St}[n_0 + \delta n_k] - \text{St}[n_0] = -\frac{\delta n_k}{\tau_k}, \quad \text{или} \quad \frac{1}{\tau_k} = -\frac{\delta}{\delta n_k} (\text{St}[n_k]) \Big|_{n_k=n_0}$$

где δn_k - малое отклонение от равновесия. Тогда мы находим

$$\frac{1}{\tau_k} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{q}} |U_{\mathbf{q}}|^2 [n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} n_{\mathbf{k}'} (1 - n_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}) + (1 - n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) (1 - n_{\mathbf{k}'}) n_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}] \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}})$$

причем в качестве всех функций n мы подставляем равновесные функции Ферми $n = n_0(\varepsilon_k) = (\exp[(\varepsilon_k - \mu)/T] + 1)^{-1}$. Для дальнейшего преобразования $1/\tau_k$ мы воспользуемся следующими двумя формулами для равновесных функций распределения Ферми $n = n_0$:

$$n_{\mathbf{k}'} (1 - n_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}) = \frac{n_{\mathbf{k}'} - n_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}}{1 - e^{-(\varepsilon_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'})/T}}$$

$$(1 - n_{\mathbf{k}'}) n_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}} = \frac{n_{\mathbf{k}'} - n_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}}{e^{(\varepsilon_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'})/T} - 1}$$

и с помощью δ -функции введем одно дополнительное интегрирование. В результате мы получим

$$\frac{1}{\tau_k} = \frac{2\pi}{\hbar} \int d\omega \sum_{\mathbf{q}} |U_{\mathbf{q}}|^2 \left[\frac{n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}{1 - e^{-\omega/T}} + \frac{1 - n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}{e^{\omega/T} - 1} \right] \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \omega) \sum_{\mathbf{k}'} (n_{\mathbf{k}'} - n_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}) \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'} - \omega)$$

или с учетом обозначения $\varepsilon = \varepsilon_k$:

$$\frac{1}{\tau_\varepsilon} = \frac{2\pi}{\hbar} \int d\omega \sum_{\mathbf{q}} |U_{\mathbf{q}}|^2 \left[\frac{n_{\varepsilon+\omega}}{1 - e^{-\omega/T}} + \frac{1 - n_{\varepsilon+\omega}}{e^{\omega/T} - 1} \right] \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \omega) \sum_{\mathbf{k}'} (n_{\varepsilon'} - n_{\varepsilon'+\omega}) \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'} - \omega)$$

Далее мы воспользуемся соотношением, которое справедливо для равновесных функций $n_\varepsilon = n_0(\varepsilon)$:

$$\frac{n_{\varepsilon+\omega}}{1 - e^{-\omega/T}} + \frac{1 - n_{\varepsilon+\omega}}{e^{\omega/T} - 1} = \frac{1}{2} \left[\text{cth} \frac{\omega}{2T} - \text{th} \frac{\varepsilon - \mu + \omega}{2T} \right]$$

а также введем функцию $\chi(\mathbf{q}, \omega)$ согласно определению:

$$\chi(\mathbf{q}, \omega) = \pi \sum_{\mathbf{k}'} (n_{\varepsilon'} - n_{\varepsilon'+\omega}) \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'} - \omega), \quad \varepsilon' = \varepsilon_{\mathbf{k}'}$$

Тогда время релаксации запишется в следующем наглядном виде:

$$\frac{1}{\tau_\varepsilon} = \frac{1}{\hbar} \int d\omega \sum_{\mathbf{q}} |U_{\mathbf{q}}|^2 \left[\text{cth} \frac{\omega}{2T} - \text{th} \frac{\varepsilon - \mu + \omega}{2T} \right] \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \omega) \chi(\mathbf{q}, \omega)$$

В дальнейшем нас будут интересовать малые энергии возбуждений $|\varepsilon - \mu| \ll \mu$ и низкие температуры $T \ll \mu$. В соответствии с этим мы рассматриваем $\varepsilon_k \sim \mu$ и область импульсов k порядка импульса Ферми p_F . Как будет видно ниже, области значений переменных ω , q и k' , которые существенны и вносят основной вклад при интегрировании, определяются следующими неравенствами: $\omega \ll \mu$, $\omega/v_F \lesssim q \lesssim p_F$ и $k' \sim p_F$.

Рассмотрим поведение $\chi(q, \omega)$ при малых импульсах $q \ll p_F$ и энергиях $\omega \lesssim qv_F \ll \mu$. При малых значениях $q \ll k' \sim p_F$, положив приближенно

$$\varepsilon_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'} \approx qv_{k'} \cos \varphi, \quad v_{k'} \sim v_F$$

мы будем иметь

$$\chi(q, \omega) = \pi \int_0^\infty \frac{k' dk'}{(2\pi\hbar)^2} (n_{\varepsilon'} - n_{\varepsilon'+\omega}) \int_0^{2\pi} d\varphi' \delta(qv_F \cos \varphi' - \omega)$$

Интегрирование по углу φ' между векторами $\mathbf{k}'$ и $\mathbf{q}$ дает

$$\frac{2\vartheta(qv_F - |\omega|)}{\sqrt{q^2 v_F^2 - \omega^2}} \approx \frac{2}{qv_F} \vartheta(qv_F - |\omega|) \quad \text{при} \quad qv_F \gtrsim |\omega|$$

В интегрировании по k' удобно перейти к переменной $\xi' = \varepsilon' - \mu$. Существенная область, в которой набирается интеграл, отвечает неравенству $|\xi'| \ll \mu$. Также ввиду быстрой сходимости можно распространить пределы интегрирования от $-\infty$ до $+\infty$ и заменить $k'dk'$ на $(p_F/v_F)d\xi'$. В результате найдем

$$\begin{aligned}\chi(q \gtrsim |\omega|v_F^{-1}, \omega) &= \frac{\pi}{(2\pi\hbar)^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\xi'}{2} \left[\text{th} \frac{\xi' + \omega}{2T} - \text{th} \frac{\xi'}{2T} \right] \frac{2}{qv_F} \vartheta(qv_F - |\omega|) = \\ &= \frac{p_F}{2\pi\hbar^2 v_F} \frac{\omega}{qv_F} \vartheta(qv_F - |\omega|) = \nu(\varepsilon_F) \frac{\omega}{qv_F} \vartheta(qv_F - |\omega|)\end{aligned}$$

где $\nu(\varepsilon_F) = p_F / (2\pi\hbar^2 v_F)$ - плотность состояний на поверхности Ферми с фиксированной проекцией спина.

Перейдем к интегрированию по импульсу q . Мы будем предполагать взаимодействие между частицами $U(r)$ изотропным, т.е. считать $\bar{U}(\mathbf{q}) = \bar{U}(q)$. Интегрирование по углу φ между векторами $\mathbf{k}$ и $\mathbf{q}$ проведем аналогично интегрированию по углу φ' . Тогда получим следующую оценку:

$$\begin{aligned}\frac{\hbar}{\tau_\varepsilon} &\approx \int d\omega \left[\text{cth} \frac{\omega}{2T} - \text{th} \frac{\varepsilon - \mu + \omega}{2T} \right] \int_0^\infty \frac{q dq}{(2\pi\hbar)^2} |U_q|^2 \frac{2\vartheta(qv_F - |\omega|)}{qv_F} \chi(q, \omega) = \\ &= \frac{2\nu(\varepsilon_F)}{(2\pi\hbar)^2 v_F^2} \int \left[\text{cth} \frac{\omega}{2T} - \text{th} \frac{\varepsilon - \mu + \omega}{2T} \right] \omega d\omega \int_0^\infty |U_q|^2 \frac{dq}{q} \vartheta(qv_F - |\omega|)\end{aligned}$$

Как и в предыдущей задаче считаем, что радиус потенциала взаимодействия $U(r)$ не превышает среднего расстояния между частицами $\sim \hbar/p_F$, и для оценки мы положим $U(q \lesssim p_F) \approx U_0$. Подчеркнем, что в интеграле по q оценка подынтегрального выражения, строго говоря, справедлива только в области импульсов $q \gtrsim |\omega|/v_F$. С другой стороны, интеграл имеет логарифмический характер и с логарифмической точностью не чувствителен к точным пределам интегрирования. Обрезая интеграл снизу на $q = |\omega|/v_F$ и сверху на $q \sim p_F$, мы получим

$$\frac{\hbar}{\tau_\varepsilon} \approx \frac{\nu(\varepsilon_F) |U_0|^2 p_F}{2\pi\hbar^2 v_F} \frac{1}{\pi p_F v_F} \int d\omega \left[\text{cth} \frac{\omega}{2T} - \text{th} \frac{\varepsilon - \mu + \omega}{2T} \right] \omega \ln \frac{p_F v_F}{|\omega|}$$

В качестве простой оценки мы положим $p_F v_F \sim \varepsilon_F$, а также определим безразмерную константу взаимодействия g согласно $g = |U_0| \nu(\varepsilon_F)$. Тогда выражение для оценки времени релаксации примет вид

$$\frac{1}{\tau_\varepsilon} \approx \frac{g^2}{\hbar \varepsilon_F} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \left[\text{cth} \frac{\omega}{2T} - \text{th} \frac{\varepsilon - \mu + \omega}{2T} \right] \omega \ln \frac{\varepsilon_F}{|\omega|}$$

По сравнению с трехмерным случаем мы видим в подынтегральном выражении логарифмическое усиление на малых ω . Поскольку логарифмическая функция достаточно медленная, то вклад от нее можно оценить, просто положив ω , равной $\omega_0 \sim T$ или $\varepsilon - \mu$ в зависимости от размера той области, в которой остальная часть подынтегральной функции заметно отличается от нуля. При $T = 0$ с логарифмической точностью мы найдем

$$\frac{1}{\tau_\varepsilon} \sim \frac{g^2}{\hbar \varepsilon_F} |\varepsilon - \mu|^2 \ln \frac{\varepsilon_F}{|\varepsilon - \mu|}, \quad |\varepsilon - \mu| \ll \mu$$

При конечных температурах и $|\varepsilon - \mu| \ll T$ нетрудно видеть, что

$$\frac{1}{\tau_\varepsilon} \sim \frac{g^2}{\hbar \varepsilon_F} (\pi T)^2 \ln \frac{\varepsilon_F}{T}, \quad |\varepsilon - \mu| \ll T \ll \mu$$

Таким образом, по сравнению с трехмерным случаем в двумерной ферми-жидкости величина затухания $\hbar/\tau_\varepsilon$ элементарных возбуждений или квазичастиц умножается на большой логарифмический множитель порядка

$$\ln \frac{\varepsilon_F}{\max\{T, |\varepsilon - \mu|\}}$$

В одномерной ферми-жидкости величина затухания даже слабозбужденных состояний становится сравнимой с их характерной энергией $|\varepsilon - \mu|$ или T , и тем самым общая картина представлений о существовании слабозатухающих элементарных возбуждений в случае одномерной ферми-жидкости становится не вполне адекватной.

БРМ-10. Zero sound

Неравновесные состояния ферми-жидкости описываются функцией распределения квазичастиц, зависящей от координат, импульсов и времени $n = n(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$. При нулевой температуре или при достаточно низких температурах столкновения между квазичастицами становятся настолько редкими, что ими можно полностью пренебречь. В отсутствие столкновений между частицами справедлива теорема Лиувилля о тождественном обращении в нуль полной производной по времени от функции распределения

$$\frac{dn}{dt} = \frac{\partial n}{\partial t} + \{H, n\} = 0,$$

где $\{H, n\}$ - скобки Пуассона для гамильтониана H и функции распределения n . Используя следующее кинетическое уравнение

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} \frac{\partial n}{\partial \mathbf{r}} - \frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial n}{\partial \mathbf{p}} = 0,$$

рассмотреть малые колебания функции распределения при $T = 0$. Найти условия, когда возможно распространение незатухающих волн, получивших название нуль-звук. Считать, что функция взаимодействия квазичастиц не зависит от импульсов $f(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = f_0$.

10.

Рассмотрим малые отклонения функции распределения $\delta n = n - n_0$ от равновесной функции n_0 . Тогда также изменяется и энергия квазичастиц $H = H(\mathbf{p}, \mathbf{r})$

$$n = n_0(\mathbf{p}) + \delta n(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) \quad \text{и} \quad H = \varepsilon_0(\mathbf{p}) + \delta \varepsilon[n(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)]$$

В линейном приближении по δn и $\delta \varepsilon$ из уравнения Лиувилля найдем

$$\frac{\partial \delta n}{\partial t} + \frac{\partial \delta n}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial \varepsilon_0}{\partial \mathbf{p}} - \frac{\partial n_0}{\partial \mathbf{p}} \frac{\partial \delta \varepsilon}{\partial \mathbf{r}} = 0$$

Скорость квазичастиц равна $v = \partial \varepsilon_0 / \partial \mathbf{p}$ и производная функции распределения имеет вид $\partial n_0 / \partial \mathbf{p} = v \partial n_0 / \partial \varepsilon$. Решение ищем в виде бегущей волны

$$\delta n(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = \delta n(\mathbf{p}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r} - i\omega t}$$

где $\mathbf{k}$ - волновой вектор и ω - частота колебаний. Изменение энергии квазичастиц через функцию взаимодействия $f(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$ дается выражением

$$\delta \varepsilon = \int f(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \delta n(\mathbf{p}') e^{i\mathbf{k}\mathbf{r} - i\omega t} d\tau_{p'}, \quad d\tau_{p'} = 2 \frac{d^3 p'}{(2\pi\hbar)^3}$$

Поэтому

$$(\omega - kv) \delta n(\mathbf{p}) = -(\mathbf{k}\mathbf{v}) \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} \int f(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \delta n(\mathbf{p}') d\tau_{p'}$$

Для упрощения анализа мы положим $f(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = f_0 = \text{const}$ и температуры $T = 0$. Тогда

$$(\omega - kv) \delta n(\mathbf{p}) = -(\mathbf{k}\mathbf{v}) \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} f_0 \int \delta n(\mathbf{p}') d\tau_{p'}$$

Из вида уравнения решение имеет форму $\delta n(\mathbf{p}) = n'_0(\varepsilon) \nu(\theta)$, где θ - угол между векторами $\mathbf{v}$ и $\mathbf{k}$. Поскольку $n'_0(\varepsilon) = -\delta(p - p_F) / v_F$, поправка $\delta n(\mathbf{p})$ отлична от нуля только на поверхности Ферми, т. е. при $|\mathbf{p}| = p_F$ и $|\mathbf{v}| = v_F$. Подставляя $\delta n(\mathbf{p})$, найдем

$$(\omega - kv) \nu(\theta) = kv F_0 \int \nu(\theta') \frac{d\Omega_{\theta'}}{4\pi}, \quad F_0 = \frac{p_F^2}{\pi^2 \hbar^3 v_F} f_0 = \frac{m^* p_F}{\pi^2 \hbar^3} f_0$$

Здесь F_0 - безразмерный параметр Ландау, $m^* p_F / \pi^2 \hbar^3$ - плотность состояний и $d\Omega = 2\pi \sin \theta d\theta$ - элемент телесного угла. Далее мы получим

$$\frac{\nu(\theta)}{F_0} = \frac{\cos \theta}{s - \cos \theta} \int \nu(\theta') \frac{d\Omega_{\theta'}}{4\pi} \quad \text{и} \quad s = \frac{\omega}{v_F k}.$$

Из условия самосогласования

$$\frac{1}{F_0} \int \nu(\theta) \frac{d\Omega_{\theta}}{4\pi} = \int \frac{\cos \theta}{s - \cos \theta} \frac{d\Omega_{\theta}}{4\pi} \left(\int \nu(\theta') \frac{d\Omega_{\theta'}}{4\pi} \right)$$

находим

$$\frac{1}{F_0} = \int_0^\pi \frac{\cos \theta}{s - \cos \theta} \frac{2\pi \sin \theta d\theta}{4\pi} = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \frac{xdx}{s - x}$$

Дисперсионное уравнение

$$\frac{1}{F_0} = \frac{s}{2} \ln \frac{s+1}{s-1} - 1$$

имеет действительные решения только при $F_0 > 0$, так как правая часть изменяется в пределах $(+\infty, 0)$ при изменении s от 1 до $+\infty$. Таким образом, при $F_0 > 0$, что отвечает отталкиванию квазичастиц на ферми-поверхности, дисперсионное уравнение имеет одно действительное решение $s = s(F_0)$, которое соответствует незатухающей волне со звуковым спектром

$$\omega(k) = s(F_0) v_F k$$

Такие звуковые волны в ферми-жидкости называются бесстолкновительным звуком или нуль-звуком. Если $F_0 \rightarrow +0$, то $s \rightarrow 1$. Для $F_0 \gg 1$, $s \approx \sqrt{F_0}/3$. Следовательно, незатухающие волновые процессы возможны только при условии, что скорость квазичастиц v_F не превышает фазовую скорость волны ω/k . В жидком ^3He значение $F_0 = 10,8$ и скорость нуль-звука примерно 197 м/с. В процессе распространения нуль-звука поверхность Ферми вытягивается в направлении распространения волны и сплющивается в противоположном направлении.

(?? what are physical effects with it?? discuss in theoretical sections...)

При $F_0 < 0$ действительных решений дисперсионного уравнения нет и моды колебаний ферми-поверхности - затухающие.

БРМ-11. Absorption of sound in Fermi liquid

Найти дисперсию и поглощение низкочастотного и высокочастотного звука в нормальной изотропной ферми-жидкости при низких температурах. Для расчета воспользоваться интегралом столкновений $\text{St}[n_p]$ в приближении эффективного времени релаксации $\tau = \tau(T)$ и в представлении, которое позволяет учесть законы сохранения полного числа частиц, импульса и энергии

$$\text{St}[n_p] = -\frac{1}{\tau} [\delta n_p - \langle \delta n_p \rangle - 3 \langle \delta n_p \cos \theta \rangle \cos \theta].$$

Здесь $\delta n_p = n_p - n_0(\varepsilon_p)$ - отклонение функции распределения квазичастиц от равновесной функции распределения $n_0(\varepsilon_p)$. Угловые скобки обозначают усреднение по всем возможным направлениям вектора $\mathbf{p}$, полярный и азимутальный углы которого, соответственно, равны θ и φ ,

$$\langle \dots \rangle = \int \dots \frac{d\Omega_p}{4\pi}, \quad \Omega_p = (\theta, \varphi).$$

Считать, что функция взаимодействия квазичастиц не зависит от импульсов и отвечает отталкиванию $f(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = f_0 > 0$.

11.

Запишем кинетическое уравнение для функции распределения $n_p(r, t)$:

$$\frac{\partial n_p}{\partial t} + \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} \frac{\partial n_p}{\partial \mathbf{r}} - \frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial n_p}{\partial \mathbf{p}} = -\frac{1}{\tau} [\delta n_p - \langle \delta n_p \rangle - 3 \langle \delta n_p \cos \theta \rangle \cos \theta]$$

Изменение функции распределения $\delta n = n - n_0$ приводит к изменению энергии квазичастиц H

$$H = \varepsilon_0(\mathbf{p}) + \delta \varepsilon [n_p(r, t)]$$

Изменение энергии квазичастиц, выраженное через функцию взаимодействия $f(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$, равно

$$\delta \varepsilon = \int f(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \delta n_{\mathbf{p}'}(\mathbf{r}, t) \frac{2d^3 p'}{(2\pi\hbar)^3} = f_0 \int \delta n_{\mathbf{p}'}(\mathbf{r}, t) \frac{2d^3 p'}{(2\pi\hbar)^3}$$

В линейном приближении по $\delta n = n - n_0$, найдем

$$\frac{\partial \delta n_p}{\partial t} + \frac{\partial \varepsilon_0}{\partial \mathbf{p}} \frac{\partial \delta n_p}{\partial \mathbf{r}} - \frac{\partial n_0}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial \delta \varepsilon}{\partial \mathbf{p}} = -\frac{1}{\tau} [\delta n_p - \langle \delta n_p \rangle - 3 \langle \delta n_p \cos \theta \rangle \cos \theta]$$

Решение уравнения ищем в виде бегущей волны

$$\delta n_p(r, t) = \delta n_p e^{ikr - i\omega t}$$

где $\mathbf{k}$ - волновой вектор и ω - частота колебаний. Учитывая, что $\mathbf{v} = \partial \varepsilon_0 / \partial \mathbf{p}$ и $\partial n_0 / \partial \mathbf{p} = \mathbf{v} \partial n_0 / \partial \varepsilon$, мы получим

$$(\omega - \mathbf{k}\mathbf{v})\delta n_p + \mathbf{k}\mathbf{v} \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} f_0 \int \delta n_{p'} \frac{2d^3 p'}{(2\pi\hbar)^3} = -\frac{1}{\tau} [\delta n_p - \langle \delta n_p \rangle - 3 \langle \delta n_p \cos \theta \rangle \cos \theta].$$

Здесь $\mathbf{k}\mathbf{v} = kv \cos \theta$ и θ - угол между векторами $\mathbf{p}$ и $\mathbf{k}$. Мы представим искомую функцию δn_p в виде

$$\delta n_p = \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} \nu(\theta)$$

после чего сразу найдем

$$(\omega - kv \cos \theta) \nu(\theta) + f_0 kv \cos \theta \int \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon'} \frac{p'^2 dp'}{\pi^2 \hbar^3} \nu(\theta') \frac{d\Omega'}{4\pi} = -\frac{1}{\tau} [\nu(\theta) - \langle \nu \rangle - 3 \langle \nu \cos \theta \rangle \cos \theta]$$

При интегрировании по модулю импульса p' существенна только область значений, близких к импульсу Ферми p_F . Другими словами, при низких температурах $\partial n_0 / \partial \varepsilon \approx -\delta(p - p_F) / v_F$, где v_F - скорость Ферми, связанная с импульсом Ферми через эффективную массу квазичастичных возбуждений m^* , согласно $v_F = p_F / m^*$.

Введем для удобства следующие обозначения:

$$\nu_0 = \langle \nu(\theta) \rangle, \quad \nu_1 = \langle \nu(\theta) \cos \theta \rangle \quad \text{и} \quad F_0 = \frac{p_F^2}{\pi^2 \hbar^3} f_0 = \frac{m^* p_F}{\pi^2 \hbar^3} f_0,$$

где последняя величина F_0 - представляет собой безразмерный параметр Ландау и $m^* p_F / (\pi^2 \hbar^3)$ - плотность состояний квазичастиц на поверхности Ферми. Затем, мы получим

$$(\omega - kv_F \cos \theta) \nu(\theta) - kv_F F_0 \nu_0 \cos \theta = -\frac{1}{\tau} (\nu(\theta) - \nu_0 - 3\nu_1 \cos \theta)$$

Обозначая

$$s = \frac{\omega}{kv_F}, \quad \sigma = \frac{1}{kv_F \tau} \quad \text{и} \quad \xi = s + i\sigma$$

мы найдем, что

$$\nu(\theta) = \frac{(F_0 \cos \theta + i\sigma) \nu_0 + 3i\sigma \nu_1 \cos \theta}{\xi - \cos \theta}$$

Чтобы решить полученное уравнение, мы вычислим

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \int_0^\pi \nu(\theta) \sin \theta d\theta &= \left[F_0 W(\xi) + i\sigma \frac{1 + W(\xi)}{\xi} \right] \nu_0 + 3i\sigma W(\xi) \nu_1 = \nu_0 \\ \frac{1}{2} \int_0^\pi \nu(\theta) \cos \theta \sin \theta d\theta &= [F_0 \xi W(\xi) + i\sigma W(\xi)] \nu_0 + 3i\sigma \xi W(\xi) \nu_1 = \nu_1 \end{aligned}$$

где $W(\xi) = \frac{\xi}{2} \ln \frac{\xi+1}{\xi-1} - 1$.

Условие совместности последних двух уравнений даст нам уравнение для определения дисперсионной зависимости $\omega = \omega(k)$ для собственных колебаний функции распределения

$$\frac{s}{s + i\sigma} - W(s + i\sigma) \left[F_0 + \frac{i\sigma}{s + i\sigma} + 3i\sigma s \right] = 0$$

Проанализируем сначала два предельных случая: низкочастотный и высокочастотный. Начнем с изучения низкочастотной $\omega\tau \ll 1$ части спектра колебаний. Этому пределу отвечает $\sigma \rightarrow \infty$. Воспользовавшись разложением $W(\xi)$ по степеням $1/\xi$

$$W(\xi \rightarrow \infty) \approx \frac{1}{3\xi^2} + \frac{1}{5\xi^4} + \dots$$

и учитывая, что $\sigma \gg s$, мы удержим в разложении дисперсионного уравнения только члены порядка $1/\sigma$. В результате мы получим

$$s^2 = \frac{1 + F_0}{3} - \frac{4}{15} \frac{i\sigma}{\sigma} \quad \text{или} \quad \left(\frac{\omega}{kv_F} \right)^2 = \frac{1 + F_0}{3} - \frac{4}{15} i\omega\tau$$

Вещественное слагаемое даст скорость низкочастотного обычного звука

$$u_0 = v_F \sqrt{\frac{1 + F_0}{3}}$$

а мнимое слагаемое приводит к затуханию и поглощению звука. (В жидком ^3He скорость звука u_0 около 187 м /с.) Коэффициент поглощения звука α_0 определяется как мнимая часть волнового вектора

$$\alpha_0(\omega) = \text{Im } k = \frac{2\omega^2 v_F^2 \tau}{15u^3}$$

Затухание звука мало, т. е. $\alpha_0 \ll \omega/u$, пока $\omega\tau \ll 1$.

Принимая во внимание, что при низких $T \ll \varepsilon_F$ температурах в ферми-жидкости затухание обычного звука в основном связано с коэффициентом кинематической вязкости η и в этом случае дается гидродинамической формулой

$$\alpha_0 = \frac{4}{3} \eta \frac{\omega^2}{2\rho u^3}$$

где ρ - плотность жидкости, мы можем оценить коэффициент кинематической вязкости η как

$$\eta = \frac{1}{5} \rho v_F^2 \tau$$

Очевидно, что наша оценка вязкости коррелирует с размерной оценкой, которую дает газокинетическая формула. В ферми-жидкости, как мы видели в предыдущих задачах, время столкновений квазичастичных

возбуждений быстро нарастает с понижением температуры согласно закону $\tau(T) \sim \varepsilon_F/T^2$ и, соответственно, коэффициент вязкости увеличивается по тому же закону $\eta(T) \sim 1/T^2$.

Затухание звука растет с понижением температуры и при достижении условия $\omega\tau \sim 1$ или, когда длина свободного пробега возбуждений $l = v_F\tau$ сравнима с длиной волны $\lambda = 2\pi/k$, звуковые колебания становятся сильно затухающими и звук перестает распространяться по ферми-жидкости. Тем не менее, при дальнейшем понижении температуры и достижении высокочастотного предела $\omega\tau \gg 1$ становится опять возможным распространение слабозатухающих волновых процессов, которые принято называть нулевым звуком.

Итак, рассмотрим дисперсионное уравнение в высокочастотном пределе $\omega\tau \gg 1$ и, соответственно, $\sigma \rightarrow 0$. При $\sigma = 0$ мы получим дисперсионное уравнение

$$1 - W(s)F_0 = 0$$

рассмотренное в предыдущей задаче. Его действительное решение, отвечающее незатухающим колебаниям, существует только при $F_0 > 0$ и дает звуковой спектр $\omega = s(F_0)v_F k$. Ниже мы найдем мнимую поправку к частоте ω линейную по $\sigma \ll 1$ из дисперсионного уравнения

$$y_\sigma(s) = \frac{s}{s + i\sigma} - W(s + i\sigma) \left[F_0 + \frac{i\sigma}{s + i\sigma} + 3i\sigma s \right] = 0$$

согласно формуле

$$s \approx s_0 - \sigma \frac{\frac{\partial y_\sigma(s)}{\partial \sigma} \Big|_{s=s_0}}{\frac{\partial y_0(s)}{\partial s} \Big|_{s=s_0}} = -i\sigma \left[1 + \frac{1 + (1 + 3s_0^2) W(s_0)}{s_0 F_0 W'(s_0)} \right]$$

где s_0 - корень уравнения $W(s_0) = 1/F_0$. Возвращаясь к обычным переменным и вводя обозначение $u_\infty = s_0 v_F$ для скорости нулевого звука, из дисперсионного уравнения

$$\omega = u_\infty k - \frac{i}{\tau} \left[1 + \frac{1 + (1 + 3s_0^2)/F_0}{s_0 F_0 W'(s_0)} \right]$$

мы можем найти коэффициент поглощения нулевого звука α_∞

$$\alpha_\infty(\omega) = \text{Im } k = \frac{1}{u_\infty \tau} \left[1 + \frac{1 + (1 + 3s_0^2)/F_0}{s_0 F_0 W'(s_0)} \right] = \frac{1}{u_\infty \tau} \begin{cases} 1 - 16F_0^{-2} e^{-2/F_0}, & F_0 \ll 1 \\ 1/2, & F_0 \gg 1 \end{cases}$$

Таким образом, в высокочастотном $\omega\tau \gg 1$ пределе или, когда длина свободного пробега возбуждений l гораздо больше длины волны λ , в ферми-жидкости снова становится возможным распространение слабозатухающих колебаний. В жидком ^3He скорость нулевого звука около 197 м /с. Коэффициент поглощения нулевого звука возрастает с увеличением температуры как $1/\tau$ и, следовательно, пропорционален T^2 .

Отношение скорости высокочастотного звука u_∞ к скорости низкочастотного звука u_0 всегда больше единицы при любом значении параметра Ландау $F_0 > 0$:

$$\frac{u_\infty}{u_0} = \begin{cases} \sqrt{3}, & F_0 \ll 1 \\ 1 + \frac{2}{5F_0}, & F_0 \gg 1 \end{cases}$$

Область $\omega\tau \sim 1$ между низкочастотным и высокочастотным звуками требует численного рассмотрения. Тем не менее, для описания коэффициента поглощения звука $\alpha(\omega)$ в ферми-жидкости во всей области частот можно воспользоваться простой интерполяционной формулой

$$\alpha(\omega) = \frac{B_0 \omega^2 \tau}{1 + (B_0/B_\infty)(\omega\tau)^2}$$

где B_0 и B_∞ - подгоночные параметры, независимые от частоты и температуры. С учетом зависимости $\tau \sim T^{-2}$ температура T_m , при которой достигается максимум поглощения звука, зависит от частоты как $T_m \sim \sqrt{\omega}$.

При выборе приближения эффективного времени релаксации для записи интеграла столкновений мы полностью пренебрегли возможной зависимостью частоты столкновений квазичастицных возбуждений τ^{-1} от их энергии. Строго говоря, это не так и, как мы видели в предыдущих задачах, частота столкновений квазичастиц в ферми-жидкости зависит также от энергии

$$\tau_\varepsilon^{-1}(T) \sim \frac{(\pi T)^2 + (\varepsilon - \mu)^2}{\varepsilon_F}$$

Здесь μ - химический потенциал, который можно не отличать от энергии Ферми ε_F при $T \ll \varepsilon_F$.

При столкновениях квазичастиц в поле звуковой волны с частотой ω их полная энергия, вообще говоря, не сохраняется и изменяется на величину порядка $\hbar\omega$. Поскольку при конечной температуре характерная энергия возбуждений уже есть порядка самой температуры, то такое неточное сохранение энергии квазичастиц не существенно пока $T \gg \hbar\omega$. В обратном $T \ll \hbar\omega$ пределе, который главным образом касается

са области существования нулевого звука, мы можем ожидать, что роль температурного разброса в энергии возбуждений будет играть величина $\hbar\omega$ и характерная частота столкновений квазичастиц будет вести себя как

$$\tau_\omega^{-1}(T) \sim \frac{(\hbar\omega)^2}{\varepsilon_F}$$

Это должно привести к тому, что затухание нулевого звука при сверхнизких $T \ll \hbar\omega$ температурах станет пропорциональным квадрату частоты, а не температуры

$$\alpha_\infty(\omega) \sim \omega^2 \quad \text{при} \quad T \ll \hbar\omega.$$

18.2.5 Problems about Kinetic Coefficients 1

БРМ-12 Functional and variation principle kinetics

Как правило, линеаризованное кинетическое уравнение сводится к неоднородному интегральному уравнению вида

$$\int d^3p' W(\mathbf{p}, \mathbf{p}') [\Phi(\mathbf{p}) - \Phi(\mathbf{p}')] = f(\mathbf{p})$$

с положительно определенным симметричным ядром $W(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = W(\mathbf{p}', \mathbf{p})$ и $W(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \geq 0$, неизвестной функцией $\Phi(\mathbf{p})$ и заданной функцией $f(\mathbf{p})$, зависящей от внешних полей. Область интегрирования распространяется на все импульсное $\mathbf{p}$ -пространство.

а) Показать, что интегральное уравнение может быть выведено из требования безусловного экстремума для следующего функционала

$$F[\Phi(\mathbf{p})] = \frac{1}{2} \iint W(\mathbf{p}, \mathbf{p}') [\Phi(\mathbf{p}) - \Phi(\mathbf{p}')]^2 d^3p d^3p' - \int d^3p f(\mathbf{p}) \Phi(\mathbf{p})$$

б) Доказать следующий вариационный принцип, который может быть использован для отыскания решения интегрального уравнения. Минимальное значение отношения

$$R[\Phi(\mathbf{p})] = \frac{\iint W(\mathbf{p}, \mathbf{p}') [\Phi(\mathbf{p}) - \Phi(\mathbf{p}')]^2 d^3p d^3p'}{[\int d^3p f(\mathbf{p}) \Phi(\mathbf{p})]^2}$$

дается функцией $\Phi(\mathbf{p})$, которая является решением интегрального уравнения. С помощью выбора разумных пробных функций вариационный принцип позволяет получать некоторое приближение к истинному решению интегрального уравнения.

12 а)

Варьирование по $\Phi(\mathbf{p})$ и условие $\delta F[\Phi(\mathbf{p})]/\delta\Phi(\mathbf{p}) = 0$ дает искомое уравнение.

б)

Введем для краткости операторное обозначение

$$\widehat{W}\Phi = \int d^3p' W(\mathbf{p}, \mathbf{p}') [\Phi(\mathbf{p}) - \Phi(\mathbf{p}')]]$$

и определим скалярное произведение как

$$(\Phi, \chi) = \int d^3p \Phi(\mathbf{p}) \chi(\mathbf{p})$$

Оператор $\widehat{W}$ - симметричен, т.е. для любых функций $\Phi(\mathbf{p})$ и $\chi(\mathbf{p})$ справедливо равенство $(\Phi, \widehat{W}\chi) = (\chi, \widehat{W}\Phi)$. Используя свойство $W(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = W(\mathbf{p}', \mathbf{p})$, нетрудно проверить, что

$$(\Phi, \widehat{W}\chi) = (\chi, \widehat{W}\Phi) = \frac{1}{2} \iint d^3p d^3p' W(\mathbf{p}, \mathbf{p}') [\Phi(\mathbf{p}) - \Phi(\mathbf{p}')] [\chi(\mathbf{p}) - \chi(\mathbf{p}')] d^3p d^3p'$$

Полагая $\chi = \Phi$ и учитывая $W(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \geq 0$, мы видим, что оператор $\widehat{W}$ положительно определен. Для всех функций $\Phi()$ выполняется неравенство

$$(\Phi, \widehat{W}\Phi) \geq 0$$

Пусть $\chi(\mathbf{p})$ - произвольная функция. Введем нормировочный множитель C , равный отношению

$$C = \frac{(\chi, f)}{(\chi, \widehat{W}f)}$$

и перейдем к функции $\tilde{\chi}(\mathbf{p}) = C\chi(\mathbf{p})$, уже удовлетворяющей соотношению

$$(\tilde{\chi}, \widehat{W}\tilde{\chi}) = (\tilde{\chi}, f)$$

Далее, пусть функция $\Phi(\mathbf{p})$ является решением интегрального уравнения, т. е. $\widehat{W}\Phi = f$. Рассмотрим скалярное произведение, которое очевидно больше или равно нулю

$$\begin{aligned} (\Phi - \tilde{\chi}, \widehat{W}(\Phi - \tilde{\chi})) &= (\Phi, \widehat{W}\Phi) + (\tilde{\chi}, \widehat{W}\tilde{\chi}) - (\tilde{\chi}, \widehat{W}\Phi) - (\Phi, \widehat{W}\tilde{\chi}) = \\ &= (\Phi, \widehat{W}\Phi) + (\tilde{\chi}, \widehat{W}\tilde{\chi}) - 2(\tilde{\chi}, \widehat{W}\Phi) = (\Phi, \widehat{W}\Phi) + (\tilde{\chi}, \widehat{W}\tilde{\chi}) - 2(\tilde{\chi}, f) = \\ &= (\Phi, \widehat{W}\Phi) - (\tilde{\chi}, \widehat{W}\tilde{\chi}) \geq 0, \quad \text{или} \quad (\Phi, \widehat{W}\Phi) \geq (\tilde{\chi}, \widehat{W}\tilde{\chi}) \end{aligned}$$

Соответственно, для обратных величин имеем

$$\frac{1}{(\Phi, \widehat{W}\Phi)} \leq \frac{1}{(\tilde{\chi}, \widehat{W}\tilde{\chi})} = \frac{1}{C(\chi, f)} = \frac{(\chi, \widehat{W}\chi)}{(\chi, f)^2} = R[\chi(\mathbf{p})]$$

что и требовалось доказать.

С помощью разумного выбора пробной функции $\chi(\mathbf{p})$ с несколькими вариационными параметрами можно с достаточной точностью оценить истинное решение кинетического уравнения, минимизируя отношение $R[\chi(\mathbf{p})]$.

БРМ-13. Рассеяние электронов

В идеальном периодическом кристалле электрон не рассеивается. Тепловые колебания атомов кристаллической решетки около положения равновесия, которые могут быть описаны как набор элементарных колебательных квантов - фононов, ведут к нарушению строгой периодичности и, как следствие, приводят к рассеянию электрона, которое обычно рассматривают как процесс поглощения или испускания фононов.

Найти коэффициент электропроводности металла σ и транспортное время рассеяния τ_{tr} электрона, взаимодействующего с тепловыми колебаниями кристаллической решетки. Дискретностью решетки ионов пренебречь и считать кристаллическую решетку непрерывной средой.

Указание. Рассмотреть модель металла, представляющего собой изотропную ферми-жидкость с квадратичным законом дисперсии электронов $\varepsilon_p = p^2/2m$. В качестве дополнительного упрощения

считать, что фононы представлены только одной акустической ветвью с дисперсией $\omega_k = sk$, где s - скорость звука. Фононный спектр ограничен максимальным волновым вектором $k_D \sim \pi/a$, означающим отсутствие колебаний с длиной волны меньше, чем межатомное расстояние a . При решении задачи учесть, что концентрация электронов в металле $n \sim 1/a^3$, импульс Ферми $p_F \sim \hbar/a$ и, следовательно, можно считать величины p_F и $\hbar k_D$ одного порядка $p_F \sim \hbar k_D$, не делая между ними количественного различия. Воспользоваться также условием малости отношения скорости звука к скорости Ферми $s/v_F \sim \sqrt{m/M} \ll 1$ в меру квадратного корня из отношения массы электрона m к массе иона M . Возможным отклонением функции распределения фононов N_k от равновесной функции Планка или эффектом увлечения фононов электронами пренебречь (приближение Блоха).

13.

Начнем с рассмотрения взаимодействия между электроном и колебаниями решетки положительных ионов. При смещении ионов из положения равновесия нарушается электронейтральность, что приводит к возникновению электрической поляризации. Появление вектора поляризации $\mathbf{P}$, представляющего собой дипольный момент единицы объема, эквивалентно возникновению связанных зарядов с объемной плотностью $\rho_{\text{св}} = -\text{div } \mathbf{P}$. Энергия взаимодействия электрона, находящегося в точке $\mathbf{r}$, со связанными зарядами запишется виде $U_{e-ph}(\mathbf{r}) = -e\varphi(\mathbf{r})$, где $\varphi(\mathbf{r})$ - потенциал, созданный связанными зарядами. При определении $\varphi(\mathbf{r})$ учтем, что в металле всякий избыточный заряд экранируется, и вместо кулоновского потенциала, спадающего обратно пропорционально расстоянию, возникает экранированный потенциал, который запишем в виде:

$$\varphi(\mathbf{r}) = \int K(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \rho_{\text{св}}(\mathbf{r}') d^3r'$$

где ядро $K(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ определяет вид зависимости экранировки избыточного заряда от расстояния. Обычно неплохим приближением является дебаевское экранирование:

$$K(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{e^{-|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|/r_D}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}$$

где r_D - дебаевский радиус экранирования, который обычно в металле порядка межатомного расстояния a . Короткодействующее экранирование позволяет приближенно заменить функцию на δ -функцию согласно: $K(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = K(0)\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$, где $K(0) = \int K(\mathbf{r})d^3r \sim r_D^2 \sim a^2$. Тогда $\varphi(\mathbf{r}) = a^2 \rho_{\text{св}}(\mathbf{r})$, и потенциал взаимодействия равен

$$U_{e-ph} = ea^2 \text{div } \mathbf{P} \sim e^2 a^2 n \text{div } \mathbf{u} = g \text{div } \mathbf{u}$$

Здесь мы приближенно оценили поляризацию или дипольный момент единицы объема как $\mathbf{P} = e\mathbf{n}$, где $\mathbf{u} = \mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ - вектор смещения иона массой M и зарядом e из положения равновесия в точке $\mathbf{r}$ и в момент времени t , а n - плотность ионов, которая по порядку величины совпадает с плотностью электронов. Электрон-фононное взаимодействие такого вида часто называют деформационным потенциалом.

Учитывая, что $n \sim 1/a^3$, имеем для константы взаимодействия g следующую оценку: $g \sim e^2/a$, которая имеет масштаб кулоновского взаимодействия зарядов на межатомном расстоянии. Как и следует ожидать, однородная деформация $\mathbf{u}(\mathbf{r}) = \text{const}$, которой отвечает смещение всей решетки как одно целое, не приводит к электрон-фононному взаимодействию. Из теории упругости известно, что $\text{div } \mathbf{u}$ равно относительному изменению объема тела или его плотности, но со знаком минус, т. е. $-\delta\rho/\rho$.

Для дальнейшего удобно разложить вектор смещения $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ в ряд Фурье по волновым векторам $\mathbf{k}$, т. е. представить в виде суммы по всем нормальным гармоническим колебаниям. Поскольку g - действительная величина, то имеем

$$u(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}} (u_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r} - i\omega_{\mathbf{k}} t} + u_{\mathbf{k}}^* e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r} + i\omega_{\mathbf{k}} t}), \quad \omega_{\mathbf{k}} = sk$$

Соответственно электрон-фононное взаимодействие также представляется в виде суммы независимых гармоник:

$$U_{e-ph}(\mathbf{r}, t) = ig \sum_{\mathbf{k}} (ku_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r} - i\omega_{\mathbf{k}} t} - ku_{\mathbf{k}}^* e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r} + i\omega_{\mathbf{k}} t})$$

Перейдем теперь к определению связи между амплитудой вектора смещения $\mathbf{u}_{\mathbf{k}}$, играющей роль комплексной нормальной координаты осциллятора, и числом фононов $N_{\mathbf{k}}$, отвечающих волновому вектору $\mathbf{k}$. Подставляя разложение для $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ в выражение для кинетической энергии колебаний

$$E_{\text{kin}} = \frac{1}{2} \int \rho \dot{\mathbf{u}}^2 d^3r, \quad \rho = Mn$$

где ρ - плотность металла, M - масса иона, n - концентрация ионов, а $\dot{\mathbf{u}}$ - их скорость, мы найдем после усреднения по времени, что

$$\langle E_{\text{kin}} \rangle = \frac{\rho}{2} \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}}^2 (u_{\mathbf{k}}^* u_{\mathbf{k}} + u_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}^*)$$

При гармонических колебания средняя кинетическая энергия колебаний равна их средней потенциальной энергии. Поэтому полная энергия колебаний равна удвоенной кинетической энергии: $E_{\text{tot}} = 2 \langle E_{\text{kin}} \rangle$. С другой стороны, энергия системы, представляющей собой набор осцилляторов с частотами ω_k , за вычетом энергии нулевых колебаний дается простой суммой:

$$E_{\text{tot}} = \sum_k \hbar \omega_k N_k$$

где N_k - номер уровня энергии осциллятора, которое мы будем трактовать как число фононов с волновым вектором $\mathbf{k}$, а о переходах между уровнями осциллятора будем говорить как об испускании или как о поглощении фононов с импульсом $\mathbf{k}$.

Теперь мы можем связать фурье-компоненту вектора смещения $\mathbf{u}_k$, которая представляет собой координату осциллятора, с числом фононов N_k и его изменением. Воспользовавшись результатами матричной теории линейного осциллятора и сравнивая две энергии $2 \langle E_{\text{kin}} \rangle$ и E_{tot} , мы выпишем следующие ненулевые матричные элементы координаты осциллятора:

$$\begin{aligned} \langle N_k | u_k | N_k + 1 \rangle &= \langle N_k + 1 | u_k^* | N_k \rangle = \sqrt{1 + N_k} \left(\frac{\hbar}{2\rho\omega_k} \right)^{1/2} \\ \langle N_k | u_k^* | N_k - 1 \rangle &= \langle N_k - 1 | u_k | N_k \rangle = \sqrt{N_k} \left(\frac{\hbar}{2\rho\omega_k} \right)^{1/2} \end{aligned}$$

и квадрата координаты, пропорционального числу N_k :

$$\langle N_k | u_k^* u_k | N_k \rangle = \frac{N_k \hbar}{2\rho\omega_k}$$

Как известно, остальные матричные элементы координаты гармонического осциллятора равны нулю. Таким образом, в нашем рассмотрении будут существенны только переходы с изменением состояния осциллятора или числа фононов на единицу, т.е. $N_k \rightarrow N_k \pm 1$.

В результате в борновском приближении, которое пропорционально квадрату модуля взаимодействия, элементарный акт рассеяния электрона с импульсом $\mathbf{p}$ на тепловых колебаниях ионов сводится к испусканию

или поглощению одного фонона с некоторым волновым вектором $\mathbf{k}$. Из равенств выше мы получим матричные элементы электрон-фононного взаимодействия и квадраты их модулей с испусканием фонона с волновым вектором $\mathbf{k}$:

$$\begin{aligned} (U_{\text{e-ph}})_{p-\hbar\mathbf{k},p} &= -igke^{-ikr+i\omega_k t} \sqrt{1 + N_k} \left(\frac{\hbar}{2\rho\omega_k} \right)^{1/2} \\ |(U_{\text{e-ph}})_{p-\hbar\mathbf{k},p}|^2 &= \frac{g^2 \hbar k^2}{2\rho\omega_k} (1 + N_k) = w_k (1 + N_k), \quad w_k = \frac{g^2 \hbar k^2}{2\rho\omega_k} \sim k \end{aligned}$$

и с поглощением фонона с волновым вектором $\mathbf{k}$:

$$\begin{aligned} (U_{\text{e-ph}})_{p+\hbar\mathbf{k},p} &= igke^{ikr-i\omega_k t} \sqrt{N_k} \left(\frac{\hbar}{2\rho\omega_k} \right)^{1/2} \\ |(U_{\text{e-ph}})_{p+\hbar\mathbf{k},p}|^2 &= \frac{g^2 \hbar k^2}{2\rho\omega_k} N_k = w_k N_k, \quad w_k = \frac{g^2 \hbar k^2}{2\rho\omega_k} \sim k \end{aligned}$$

Аналогично излучению фотонов множитель $(1 + N_k)$ также учитывает в излучении фононов комбинацию процессов спонтанного и вынужденного излучений. Равновесное распределение для фононов

$$N_k = (e^{\hbar\omega_k/T} - 1)^{-1}$$

является распределением Планка.

Теперь мы можем перейти к определению интеграла столкновений для электронной функции распределения. Интеграл представляет собой разность числа актов прихода и числа актов уходов:

$$\text{St}[n_p] = \sum_{p'} W_{p,p'} n_{p'} (1 - n_p) - \sum_{p'} W_{p',p} n_p (1 - n_{p'})$$

где $W_{p,q}$ - вероятность рассеяния электрона из состояния с импульсом $\mathbf{q}$ в состояние с импульсом $\mathbf{p}$. В член с актами прихода дают вклад электроны с импульсом $\mathbf{p}' = \mathbf{p} + \hbar\mathbf{k}$ и энергией $\varepsilon_{p+\hbar\mathbf{k}}$, которые излучают фонон с импульсом $\mathbf{k}$ и приобретают импульс $\mathbf{p}$ и энергию ε_p , а также электроны с импульсом $\mathbf{p}' = \mathbf{p} - \hbar\mathbf{k}$ и энергией $\varepsilon_{p-\hbar\mathbf{k}}$, которые поглощают фонон с импульсом $\hbar\mathbf{k}$ и приобретают импульс $\mathbf{p}$ и энергию ε_p . Член с актами ухода формируется из процесса излучения фононов с импульсом $\hbar\mathbf{k}$, в результате которого импульс электрона становится, равным $\mathbf{p}' = \mathbf{p} - \hbar\mathbf{k}$, а энергия $\varepsilon_{p-\hbar\mathbf{k}}$, и процесса поглощения фонона с импульсом $\hbar\mathbf{k}$, в результате которого импульс электрона становится равным $\mathbf{p}' = \mathbf{p} + \hbar\mathbf{k}$, а энергия $\varepsilon_{p+\hbar\mathbf{k}}$.

Рисунок 3.4 иллюстрирует эти возможные элементарные однофононные процессы.

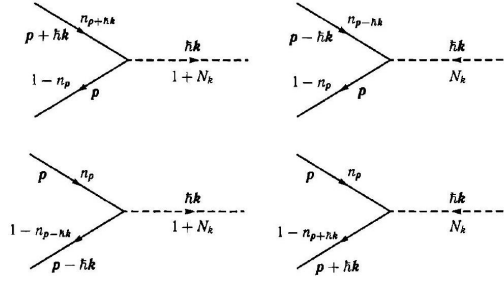


Рис. 3.4. Процессы рассеяния электрона с излучением или поглощением фонона. Сплошная линия отвечает фермиону, а пунктирная - фонону

В результате интеграл столкновений, записанный в борновском приближении, или интеграл столкновений Блоха будет состоять из четырех членов:

$$\begin{aligned} \text{St}[n_p] = & \frac{2\pi}{\hbar} \sum_k [w_k (1 + N_k) n_{p+\hbar k} (1 - n_p) \delta(\varepsilon_p - \varepsilon_{p+\hbar k} + \hbar\omega_k) + w_k N_k n_{p-\hbar k} (1 - n_p) \delta(\varepsilon_p - \varepsilon_{p-\hbar k} - \hbar\omega_k)] - \\ & - \frac{2\pi}{\hbar} \sum_k [w_k (1 + N_k) n_p (1 - n_{p-\hbar k}) \delta(\varepsilon_p - \varepsilon_{p-\hbar k} - \hbar\omega_k) + w_k N_k n_p (1 - n_{p+\hbar k}) \delta(\varepsilon_p - \varepsilon_{p+\hbar k} + \hbar\omega_k)] \end{aligned}$$

Здесь мы учли, что ω зависит только от модуля волнового вектора $\mathbf{k}$. Закон сохранения энергии в процессе рассеяния учтен с помощью δ -функций. Меняя в двух суммах по волновому вектору $-\mathbf{k}$ на $\mathbf{k}$, мы получим следующее выражение для электронного интеграла столкновений:

$$\begin{aligned} \text{St}[n_p] = & \frac{2\pi}{\hbar} \sum_k w_k [(1 + N_k) n_{p+\hbar k} (1 - n_p) - N_k n_p (1 - n_{p+\hbar k})] \delta(\varepsilon_p - \varepsilon_{p+\hbar k} + \hbar\omega_k) + \\ & + \frac{2\pi}{\hbar} \sum_k w_k [N_k n_{p+\hbar k} (1 - n_p) - (1 + N_k) n_p (1 - n_{p+\hbar k})] \delta(\varepsilon_p - \varepsilon_{p+\hbar k} - \hbar\omega_k) \end{aligned}$$

Ниже мы будем предполагать, что равновесие в фононной подсистеме устанавливается настолько быстро, что ее отклонением от равновесия можно пренебречь и считать фононную функцию распределения, совпадающей с равновесной функцией $N_k = N(\omega_k)$. (Здесь подразумевается, что время установления равновесия в фононной подсистеме гораздо меньше, чем характерные времена электрон-фононного рассеяния. Это не всегда верно.) Как и должно быть, интеграл столкновений $\text{St}[n_p]$ тождественно зануляется при подстановке равновесных функций распределения электронов $n_0(\varepsilon_p)$ и фононов $N(\omega_k)$. Это свойство легко проверяется, например, с помощью следующего соотношения для равновесных функций:

$$\frac{1 + N(\varepsilon' - \varepsilon)}{N(\varepsilon' - \varepsilon)} = \frac{n_0(\varepsilon)}{1 - n_0(\varepsilon)} \frac{1 - n_0(\varepsilon')}{n_0(\varepsilon')}$$

(?????)

Рассмотрим интеграл столкновений в линейном приближении по отклонению от равновесия, которое представим в виде:

$$n_p \approx n_0(\varepsilon_p) + \delta n_p = n_0(\varepsilon_p) - \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} \Phi_p = n_0(\varepsilon_p) + \frac{n_0(\varepsilon_p)(1 - n_0(\varepsilon_p))}{T} \Phi_p$$

Для линеаризации интеграла столкновений перепишем сначала выражение в квадратных скобках из первого слагаемого в виде

$$\begin{aligned} (1 + N_k) n_{p+\hbar k} (1 - n_p) - N_k n_p (1 - n_{p+\hbar k}) = \\ = (1 + N_{\varepsilon' - \varepsilon}) (1 - n_{p'}) (1 - n_p) \left[\frac{n_{p'}}{1 - n_{p'}} - \frac{N_{\varepsilon' - \varepsilon}}{1 + N_{\varepsilon' - \varepsilon}} \frac{n_p}{1 - n_p} \right], \quad p' = p + \hbar k \end{aligned}$$

Отсюда, обозначив для краткости $n_0 = n_0(\varepsilon)$ и $n'_0 = n_0(\varepsilon')$, где $\varepsilon = \varepsilon_p$ и $\varepsilon' = \varepsilon_{p'}$, мы найдем в линейном приближении по отклонению от равновесия:

$$\begin{aligned} (1 + N_{\varepsilon' - \varepsilon}) (1 - n_0) (1 - n'_0) \left[\frac{\delta n_{p'}}{(1 - n'_0)^2} - \frac{N_{\varepsilon' - \varepsilon}}{1 + N_{\varepsilon' - \varepsilon}} \frac{\delta n_p}{(1 - n_0)^2} \right] = \\ = \frac{(1 + N_{\varepsilon' - \varepsilon}) (1 - n_0) (1 - n'_0)}{T} \left[\frac{n_0 \Phi_{p'}}{(1 - n'_0)} - \frac{N_{\varepsilon' - \varepsilon}}{1 + N_{\varepsilon' - \varepsilon}} \frac{n_0 \Phi_p}{(1 - n_0)} \right] = \\ = \frac{(1 + N_{\varepsilon' - \varepsilon}) n'_0 (1 - n_0)}{T} [\Phi_{p'} - \Phi_p] = - \frac{(1 + N_{\varepsilon' - \varepsilon}) N_{\varepsilon' - \varepsilon}}{T} (n'_0 - n_0) [\Phi_{p'} - \Phi_p] \end{aligned}$$

Аналогично мы поступим и со вторым слагаемым, при преобразовании которого учтем равенство $(1 + N_{\varepsilon - \varepsilon'}) N_{\varepsilon - \varepsilon'} = (1 + N_{\varepsilon' - \varepsilon}) N_{\varepsilon' - \varepsilon}$. В результате получим следующий линейаризованный интеграл столкновений

$$\text{St} [\Phi_p] = -\frac{2\pi}{\hbar} \sum_k w_k \frac{N(\omega_k)(1 + N(\omega_k))}{T} [n_0(\varepsilon_{p+\hbar k}) - n_0(\varepsilon_p)] \times \\ \times [\delta(\varepsilon_p - \varepsilon_{p+\hbar k} + \hbar\omega_k) - \delta(\varepsilon_p - \varepsilon_{p+\hbar k} - \hbar\omega_k)] (\Phi_{p+\hbar k} - \Phi_p)$$

или

$$\text{St} [\Phi_p] = -\frac{2\pi}{\hbar} \sum_k \omega_k \frac{N_k(1 + N_k)}{T} \left\{ [n_0(\varepsilon_p + \hbar\omega_k) - n_0(\varepsilon_p)] \delta(\varepsilon_p - \varepsilon_{p+\hbar k} + \hbar\omega_k) - \right. \\ \left. - [n_0(\varepsilon_p - \hbar\omega_k) - n_0(\varepsilon_p)] \delta(\varepsilon_p - \varepsilon_{p+\hbar k} - \hbar\omega_k) \right\} (\Phi_{p+\hbar k} - \Phi_p)$$

Свойства металла или вырожденной ферми-жидкости в области температур $T \ll \varepsilon_F$ связаны с областью импульсов, близких к импульсу Ферми $|p - p_F| \ll p_F$. Этой области соответствуют энергии электрона порядка энергии Ферми или химического потенциала $\varepsilon_p \sim \varepsilon_F \sim \mu$. Поскольку энергии фононов малы по сравнению с энергией Ферми $\hbar\omega_k \leq \hbar\omega_D \ll \varepsilon_F$, мы разложим разности в квадратных скобках по степеням ω_k :

$$n_0(\varepsilon_p \pm \hbar\omega_k) - n_0(\varepsilon_p) \approx \pm \frac{\partial n_0(\varepsilon_p)}{\partial \varepsilon_p} \hbar\omega_k$$

После этого уже можно пренебречь энергией фонона $\pm \hbar\omega_k$ в аргументах δ -функций. Действительно, для закона дисперсии электрона $\varepsilon_p = p^2/2m$ имеем

$$\varepsilon_{p+\hbar k} - \varepsilon_p \pm \hbar\omega_k = \frac{\hbar k p}{m} \left(\cos \vartheta + \frac{\hbar k}{2p} \pm \frac{ms}{p} \right) \approx \frac{\hbar k p}{m} \left(\cos \vartheta + \frac{\hbar k}{2p} \right)$$

где ϑ - угол между векторами p и k , и мы воспользовались неравенством $ms/p \sim ms/p_F \sim s/\varepsilon_F \ll 1$. В результате получим

$$\text{St} [\Phi_p] \approx -\frac{\partial n_0(\varepsilon_p)}{\partial \varepsilon_p} \frac{2\pi}{\hbar} \sum_k \omega_k \frac{N_k(1 + N_k)}{T} 2\hbar\omega_k \delta(\varepsilon_{p+\hbar k} - \varepsilon_p) (\Phi_{p+\hbar k} - \Phi_p)$$

Теперь мы можем перейти к рассмотрению электропроводности и определению транспортного времени τ_{tr} рассеяния электронов на фононах. Кинетическое уравнение для электронов в линейном приближении по электрическому полю $\mathbf{E}$ имеет обычный вид

$$e\mathbf{E} \frac{\partial n_0(\varepsilon_p)}{\partial \mathbf{p}} = \text{St} [\Phi_p]$$

Переписывая это уравнение с учетом того, что скорость электрона равна $\mathbf{v} = \partial \varepsilon / \partial \mathbf{p} = \mathbf{p}/m$, и подставляя $\text{St} [\Phi_p]$, получим выражение

$$evE \frac{\partial n_0(\varepsilon_p)}{\partial \varepsilon_p} = -\frac{\partial n_0(\varepsilon_p)}{\partial \varepsilon_p} \frac{4\pi}{T} \sum_k w_k N_k (1 + N_k) \omega_k \delta(\varepsilon_{p+\hbar k} - \varepsilon_p) (\Phi_{p+\hbar k} - \Phi_p).$$

Будем искать решение уравнения в виде

$$\Phi_p = e(\mathbf{v}\mathbf{E})\tau_{\text{tr}}(\varepsilon_p) = e \frac{p\mathbf{E}}{m} \tau_{\text{tr}}, \quad \text{т. е.} \quad \delta n_p = e(\mathbf{v}\mathbf{E})\tau_{\text{tr}}(\varepsilon_p) \left(-\frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon_p} \right)$$

где неизвестная функция $\tau_{\text{tr}}(\varepsilon_p)$, зависящая только от энергии, войдет в формулу для электропроводности и будет играть роль транспортного времени рассеяния электронов на тепловых колебаниях решетки. Далее имеем

$$\mathbf{v}\mathbf{E} = -\frac{4\pi}{T} \sum_k w_k N_k (1 + N_k) \omega_k \delta(\varepsilon_{p+\hbar k} - \varepsilon_p) \frac{\hbar k \mathbf{E}}{m} \tau_{\text{tr}}(\varepsilon_p)$$

Чтобы проинтегрировать по телесному углу Ω_k , мы направим полярную ось вдоль вектора $\mathbf{p}$ и введем полярный угол ϑ и азимутальный угол φ , которые определяют направление вектора $\mathbf{k}$, а также введем аналогичные углы ϑ_E и φ_E , которые задают направление электрического поля $\mathbf{E}$. Тогда угол α между векторами $\mathbf{k}$ и $\mathbf{E}$ будет равен

$$\cos \alpha = \cos \vartheta \cos \vartheta_E + \sin \vartheta \sin \vartheta_E \cos(\varphi - \varphi_E)$$

Используя это соотношение в последнем уравнении, получим

$$pE \cos \vartheta_E \tau_{\text{tr}}^{-1}(\varepsilon) = -\frac{4\pi}{T} \int_0^{k_D} \frac{k^2 dk}{(2\pi)^3} \int_0^\pi \sin \vartheta d\vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi w_k N_k (1 + N_k) \omega_k \times \\ \times \delta \left(\frac{\hbar k p}{m} \cos \vartheta + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right) \hbar k E [\cos \vartheta \cos \vartheta_E + \sin \vartheta \sin \vartheta_E \cos(\varphi - \varphi_E)], \quad (18.1)$$

где суммирование по $\mathbf{k}$ мы заменили интегрированием и учли, что волновой вектор фонона ограничен максимальным значением k_D . Член $\cos(\varphi - \varphi_E)$ после интегрирования по углу φ дает нулевой вклад в ответ. После сокращения левой и правой частей уравнения на общий множитель $E \cos \vartheta_E$ и замены $x = \cos \vartheta$ мы найдем, что

$$p\tau_{\text{tr}}^{-1}(\varepsilon) = -\frac{4\pi}{T} \int_0^{k_D} \frac{k^2 dk}{4\pi^2} w_k N_k (1 + N_k) \omega_k \hbar k \frac{m}{\hbar k p} \int_{-1}^1 dx x \delta \left(x + \frac{\hbar k}{2p} \right)$$

Как отсюда видно, наличие δ -функции, возникающей вследствие закона сохранения энергии, приводит к дополнительному ограничению на величину фононного волнового вектора $k \leq 2p/\hbar$. Таким образом, интегрирование по k ограничено минимальным значением из двух величин k_D и $2p/\hbar$:

$$k_m = \min(k_D, 2p/\hbar)$$

и после интегрирования по x получим

$$\tau_{\text{tr}}^{-1}(\varepsilon) = \frac{\hbar}{2\pi T} \frac{m}{p^3} \int_0^{k_m} dk k^2 w_k N_k (1 + N_k) k \omega_k, \quad w_k = \frac{g^2 \hbar k^2}{2\rho \omega_k} \quad \text{и} \quad \omega_k = sk$$

Так как нас интересуют импульсы электрона, близкие к импульсу Ферми p_F , то ниже мы не будем учитывать различие в величинах векторов k_D и $2p_F/\hbar$, которые в металле по порядку величины одинаковы и порядка обратного межатомного расстояния a , т. е. $k_D \sim 2p_F/\hbar \sim 1/a$. Для определенности положим $k_m = k_D$. Обратное предположение приведет лишь к несущественным количественным различиям. Полагая $z = \hbar sk/T$ и вводя температуру Дебая согласно $\Theta_D = \hbar sk_D$, получим следующую формулу:

$$\tau_{\text{tr}}^{-1}(\varepsilon) = \frac{m}{4\pi p^3} \frac{g^2 \hbar}{\rho s} k_D^5 \left(\frac{T}{\Theta_D} \right)^5 \int_0^{\Theta_D/T} dz \frac{z^5 e^z}{(e^2 - 1)^2} = \frac{\pi}{4} \zeta \left(\frac{\hbar k_D}{p} \right)^4 \frac{\Theta_D}{4\hbar} \left(\frac{T}{\Theta_D} \right)^5 \int_0^{\Theta_D/T} dz \frac{z^5}{\text{sh}^2 z/2},$$

с обозначением $\zeta = \frac{g^2}{\rho s^2} \frac{mp(\varepsilon)}{\pi^2 \hbar^3} = \frac{g^2}{\rho s^2} \nu(\varepsilon)$.

Здесь $\nu(\varepsilon)$ - плотность электронных состояний, а ζ - безразмерная константа электрон-фононного взаимодействия. Оценим константу ζ по порядку величины при $\varepsilon = \varepsilon_F$:

$$\zeta = \frac{g^2}{\rho s^2} \nu(\varepsilon_F) \sim \frac{(e^2/a)^2}{Mn(v_F^2 m/M)} \frac{mp_F}{\hbar^3} \sim \frac{(e^2/a)^2}{mv_F^2} \frac{mp_F}{(\hbar/a)^3} \sim \left(\frac{e^2/a}{\varepsilon_F} \right)^2.$$

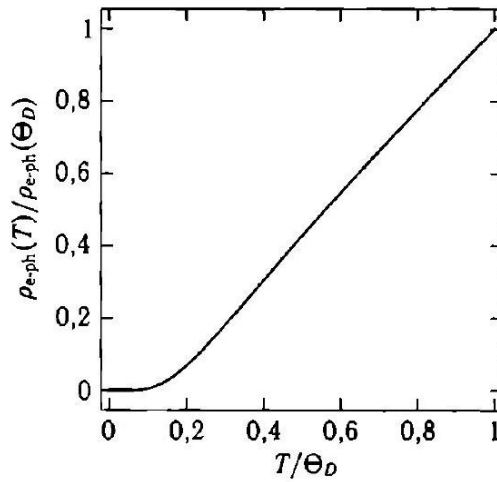
В типичных металлах характерная энергия кулоновского взаимодействия e^2/a сравнима со средней кинетической энергией электронов ε_F , и таким образом $\zeta \sim 1$. Также мы полагаем $\hbar k_D/p \sim 1$ при $p \sim p_F$. В результате мы приходим к следующей размерной оценки для времени транспортного рассеяния, в которой не учитываем численные множители:

$$\frac{\hbar}{\tau_{\text{tr}}(\varepsilon_F)} \sim \zeta \Theta_D \left(\frac{T}{\Theta_D} \right)^5 \int_0^{\Theta_D/T} dz \frac{z^5}{\text{sh}^2 z/2} \sim \zeta \Theta_D \left(\frac{T}{\Theta_D} \right)^5 \begin{cases} \left(\frac{\Theta_D}{T} \right)^4, & T \gg \Theta_D \\ 480\zeta(5), & T \ll \Theta_D \end{cases}$$

Здесь $\zeta(5) \approx 1,037$ - дзета-функция Римана.

Чтобы найти электрическое сопротивление, запишем выражение для электрического тока в металле с возмущенной функцией распределения $n(\mathbf{p}) = n_0(\mathbf{p}) + \delta n(\mathbf{p})$:

$$j = \int ev [n_0(p) + \delta n(p)] \frac{2d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} = \int ev \delta n(\mathbf{p}) \frac{2d^3 p}{(2\pi\hbar)^3}$$



Приведенное сопротивление как функция приведенной температуры. Первый интеграл с n_0 обращается в нуль, поскольку в равновесии при $\mathbf{E} = 0$ электрический ток отсутствует. Для второго интеграла найдем

$$j = e^2 \int v(\mathbf{v}\mathbf{E})\tau_{tr}(\varepsilon) \left(-\frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon}\right) \frac{2d^3p}{(2\pi\hbar)^3} = \mathbf{E} \frac{e^2}{3} \int v^2 \tau_{tr}(\varepsilon) \left(-\frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon}\right) \frac{2d^3p}{(2\pi\hbar)^3}$$

Определяя электропроводность σ из соотношения $\mathbf{j} = \sigma \mathbf{E}$ и учитывая, что в вырожденной ферми-системе при $T \ll \varepsilon_F$ приближенно можно положить $\partial n_0 / \partial \varepsilon \approx -\delta(\varepsilon - \varepsilon_F)$, мы найдем

$$\sigma = \frac{e^2}{3} v_F^2 \tau_{tr}(\varepsilon_F) \nu(\varepsilon_F) = \frac{e^2 \tau_{tr}(\varepsilon_F)}{3} \frac{p_F^2}{m^2} \frac{m p_F}{\pi^2 \hbar^3} = \frac{n e^2 \tau_{tr}(\varepsilon_F)}{m}$$

где $n = p_F^3 / (3\pi^2 \hbar^3)$ - концентрация электронов. Соответственно, электрическое сопротивление $\rho_{e-ph} = \sigma^{-1}$, возникающее вследствие рассеяния электронов на тепловых колебаниях решетки ионов, будет описываться соотношением Блоха-Грюнайзена

$$\frac{\rho_{e-ph}(T)}{\rho_{e-ph}(\Theta_D)} = \frac{\tau_{tr}(\Theta_D)}{\tau_{tr}(T)} = \left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^5 \frac{\int_0^{\Theta_D/T} \frac{z^5 dz}{\text{sh}^2 z/2}}{\int_0^1 \frac{z^5 dz}{\text{sh}^2 z/2}} = \begin{cases} \sim (T/\Theta_D)^5, & T \ll \Theta_D \\ \sim T/\Theta_D, & T \gg \Theta_D \end{cases}$$

Отсюда видно, что подобно модели Дебая для фононной теплоемкости в рассмотренной простейшей модели сопротивление металла есть некоторая универсальная функция отношения Θ_D/T . График отношения $\rho_{e-ph}(T)/\rho_{e-ph}(\Theta_D)$ в зависимости от отношения T/Θ_D показан на рис. 3.5. Таким образом, при высоких $T > \Theta_D$ температурах сопротивление металла растет прямо пропорционально температуре $\rho_{e-ph}(T) \sim T$, а с понижением температуры при $T \lesssim \Theta_D/2\pi$ переходит на закон Блоха, когда $\rho_{e-ph}(T) \sim T^5$.

18.2.6 Problems about Kinetic Coefficients 2

БРМ-14. Теплопроводность металла

Как правило, металлы обладают хорошей теплопроводностью, которая обусловлена переносом тепла электронами проводимости и ограничена рассеянием электронов на колебаниях ионной решетки - фононах. В качестве простейшей модели металла можно выбрать модель металла из предыдущей задачи, т. е. считать металл изотропной ферми-жидкостью с законом дисперсии электронов $\varepsilon_p = p^2/2m$ и, в которой имеется единственная акустическая ветвь с дисперсией фононов $\omega_k = sk$, где s - скорость звука.

Вычислить коэффициент теплопроводности металла κ и соответственное время электрон-фононного рассеяния $\tau_{\kappa}(T)$, используя в качестве решения линеаризованного кинетического уравнения приближенную пробную функцию распределения электронов следующего вида:

$$n_p = n_0(\varepsilon_p) + \delta n_p, \quad \delta n_p = n'_0(\varepsilon_p) \Phi_p,$$

где

$$\Phi_p = \Phi_p^{(0)} \tau_{\kappa}(T), \quad \Phi_p^{(0)} = \frac{\varepsilon_p - \mu}{T} (v_p \nabla T).$$

Здесь $n_0(\varepsilon_p)$ - равновесная функция распределения электронов, μ - химический потенциал электронов, $v_p = p/m$ - скорость электронов и T - температура металла.

При решении задачи воспользоваться приближением Блоха, когда пренебрегается возможным отклонением функции распределения фононов N_k от равновесной функции Планка, т. е. эффектом увлечения фононов электронами, который, вообще говоря, существенен в области температур низких по сравнению с температурой Дебая Θ_D . Для интеграла столкновений и матричного элемента электрон-фононного взаимодействия воспользоваться результатами предыдущей задачи.

14.

(??? подумать про пред. задачу. ???)

Коэффициент теплопроводности κ определяется из соотношения $\mathbf{q} = -\kappa \nabla T$, связывающего диссипативный поток тепла $\mathbf{q}$ и градиент температуры ∇T . При этом подразумевается, что средний ток электронов отсутствует, т. е. $\mathbf{j} = 0$, и поток энергии $\mathbf{Q}$ совпадает с диссипативным потоком тепла $\mathbf{q}$.

В условиях отсутствия эффективного поля $\mathbf{E}' = \mathbf{E} - \nabla \mu / e$, действующего на электроны, связь между потоком тепла и градиентом температуры определяется с помощью коэффициента κ_ε , который отличается от коэффициента теплопроводности κ , согласно предыдущим задачам, на величину $\sigma \Pi S$. Как мы видели ранее, относительная разница между κ и κ_E была невелика в области низких $T \ll \mu$ температур. Ниже, строго говоря, вычисляя κ_E , мы не будем различать κ_E и κ .

Итак, ниже мы всюду предполагаем $\mathbf{E}' = \mathbf{E} - \nabla \mu / e = 0$. Тогда линейризованное кинетическое уравнение примет следующий вид:

$$(\mathbf{v}_p \cdot \nabla T) \frac{\varepsilon_p - \mu}{T} \left(-\frac{\partial n_0(\varepsilon_p)}{\partial \varepsilon_p} \right) = \text{St}[\delta n_p], \quad \delta n_p = \frac{\partial n_0(\varepsilon_p)}{\partial \varepsilon_p} \Phi_p$$

где δn_p - отклонение функции распределения от равновесной функции $n_0(\varepsilon_p)$.
Линеаризованный интеграл столкновений можно представить в общем виде как

$$\text{St}[\delta n_p] = \text{St}[\delta \Phi_p] = \widehat{W} \Phi = \sum_{p'} W(\mathbf{p}, \mathbf{p}') (\Phi_p - \Phi_{p'})$$

где ядро $W(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$ - положительно определено и симметрично к перестановке импульсов $W(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = W(\mathbf{p}', \mathbf{p})$, и суммирование или интегрирование, согласно

$$\sum_p \rightarrow \int \frac{2d^3p}{(2\pi)^3}$$

ведется по всем возможным импульсам $\mathbf{p}$ электрона с учетом двух возможных проекций спина. Соответственно, кинетическое уравнение примет вид

$$(\mathbf{v}_p \cdot \nabla T) \frac{\varepsilon_p - \mu}{T} \left(-\frac{\partial n_0(\varepsilon_p)}{\partial \varepsilon_p} \right) = \sum_{p'} W(\mathbf{p}, \mathbf{p}') (\Phi_p - \Phi_{p'})$$

Домножая обе части уравнения на Φ_p и затем суммируя по всем возможным импульсам $\mathbf{p}$, получим

$$\sum_p (\mathbf{v}_p \cdot \nabla T) \frac{\varepsilon_p - \mu}{T} \left(-\frac{\partial n_0(\varepsilon_p)}{\partial \varepsilon_p} \right) \Phi_p = \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} W(\mathbf{p}, \mathbf{p}') (\Phi_p - \Phi_{p'}) \Phi_p = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} W(\mathbf{p}, \mathbf{p}') (\Phi_p - \Phi_{p'})^2$$

При переходе к последнему равенству мы воспользовались свойством симметрии $W(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = W(\mathbf{p}', \mathbf{p})$. Выбирая пробную функцию в виде

$$\Phi_p = \Phi_p^{(0)} \tau(T)$$

мы найдем, что

$$\frac{1}{\tau} = \frac{\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} W(\mathbf{p}, \mathbf{p}') (\Phi_p^{(0)} - \Phi_{p'}^{(0)})^2}{\sum_p (\mathbf{v}_p \cdot \nabla T) \left(\frac{\varepsilon_p - \mu}{T} \right) \left(-\frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon_p} \right) \Phi_p^{(0)}}$$

С другой стороны, поток тепла $\mathbf{q}$ с учетом соотношения $\delta n_p = n'_0(\varepsilon_p) \Phi_p$ определяется уравнением

$$\begin{aligned} \mathbf{q} &= \sum_p \mathbf{v}_p (\varepsilon_p - \mu) n_p = \sum_p \mathbf{v}_p (\varepsilon_p - \mu) \delta n_p = \sum_p \mathbf{v}_p (\varepsilon_p - \mu) \frac{\partial n_0(\varepsilon_p)}{\partial \varepsilon_p} \Phi_p = \\ &= \tau(T) \sum_p \mathbf{v}_p (\varepsilon_p - \mu) \frac{\partial n_0(\varepsilon_p)}{\partial \varepsilon_p} \Phi_p^{(0)} = -\kappa \nabla T \end{aligned}$$

Здесь мы учли, что $n_p = n_0(\varepsilon_p) + \delta n_p$ и слагаемое с $n_0(\varepsilon_p)$ дает нулевой вклад в поток тепла, а также учли и связь потока тепла $\mathbf{q}$ с градиентом тепла. Домножая последние два равенства на ∇T , найдем

$$\frac{1}{\tau(T)} = \frac{\sum_p (v_p \cdot \nabla T) (\varepsilon_p - \mu) \left(-\frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon_p}\right) \Phi_p^{(0)}}{\kappa(\nabla T)^2}$$

Сравнивая два выражения для $\tau^{-1}(T)$, легко видеть, что для коэффициента теплопроводности справедливо соотношение

$$\frac{1}{\kappa T} = \frac{\frac{1}{2}(\nabla T)^2 \sum_{p,p'} W(p, p') (\Phi_p^{(0)} - \Phi_{p'}^{(0)})^2}{\left[\sum_p (v_p \cdot \nabla T) (\varepsilon_p - \mu) \left(-\frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon_p}\right) \Phi_p^{(0)} \right]^2}$$

Поскольку $\Phi_p^{(0)}$ входит квадратично и в числитель и в знаменатель, то любой множитель, введенный в функцию $\Phi_p^{(0)}$ как $\Phi_p^{(0)} \rightarrow \Phi_p^{(0)} \tau = \Phi_p$, сокращается и, соответственно, выражение для $(\kappa T)^{-1}$ может быть представлено и в следующем общем виде:

$$\frac{1}{\kappa T} = \frac{\frac{1}{2}(\nabla T)^2 \sum_{p,p'} W(p, p') (\Phi_p - \Phi_{p'})^2}{\left[\sum_p (v_p \cdot \nabla T) (\varepsilon_p - \mu) \left(-\frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon_p}\right) \Phi_p \right]^2} = \frac{\frac{1}{2}(\nabla T)^2 (\Phi, \widehat{W} \Phi)}{(\Phi, f)^2} = R_{\kappa}[\Phi_p]$$

Отметим, что данному соотношению можно придать определенный физический смысл, используя выражение для диссипативной функции R в отсутствие электрического тока:

$$R = \frac{\kappa(\nabla T)^2}{T} = -\frac{(\mathbf{q} \cdot \nabla T)}{T} \frac{(\mathbf{q} \cdot \nabla T)}{-\kappa(\nabla T)^2} = \frac{(\mathbf{q} \cdot \nabla T)^2}{\kappa T(\nabla T)^2}$$

Отсюда также имеем

$$\frac{1}{\kappa T} = \frac{(\nabla T)^2 R}{(\mathbf{q} \cdot \nabla T)^2}$$

Как мы видели выше, знаменатель $(\Phi, f)^2$ в $R_{\kappa}[\Phi_p]$ представляет собой в точности квадрат $(\mathbf{q} \cdot \nabla T)^2$ для потока тепла $\mathbf{q}$, возникающего при отклонении функции распределения n_p от равновесной $n_0(\varepsilon_p)$ на величину $\delta n_p = n'_0(\varepsilon_p) \Phi_p$. Соответственно, величине

$$R = \frac{1}{2} \sum_{p,p'} W(p, p') (\Phi_p^{(0)} - \Phi_{p'}^{(0)})^2$$

мы должны приписать смысл мощности диссипации энергии и связанной с ней скорости роста энтропии в системе, если отклонение от равновесия составляет величину $\delta n_p = n'_0(\varepsilon_p) \Phi_p$.

Теперь мы перейдем к вычислению числителя и знаменателя в дроби $R_{\kappa}[\Phi_p]$. Для знаменателя в $R_{\kappa}[\Phi_p]$ мы будем иметь, полагая функцию Φ_p , равной $\Phi_p^{(0)} = (\varepsilon_p - \mu) (v_p \cdot \nabla T) / T$,

$$(\Phi, f) = \sum_p (v_p \cdot \nabla T) (\varepsilon_p - \mu) \left(-\frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon_p}\right) \Phi_p^{(0)} = \int \frac{2d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \frac{(p \cdot \nabla T)^2}{m^2} \frac{(\varepsilon_p - \mu)^2}{T} \left(-\frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon_p}\right)$$

Воспользовавшись тем, что $\mathbf{v}_p = p/m$, и затем усредняя, например, по всем возможным ориентациям вектора p , согласно $\langle p_\alpha p_\beta \rangle = p^2 \delta_{\alpha\beta} / 3$ ($\alpha, \beta = x, y, z$), мы находим

$$\begin{aligned} (\Phi, f) &= \frac{2}{3} \frac{(\nabla T)^2}{mT} \int \frac{2d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \varepsilon_p (\varepsilon_p - \mu)^2 \left(-\frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon_p}\right) = \\ &= \frac{2}{3} \frac{(\nabla T)^2}{mT} \int_0^\infty \nu(\varepsilon) \varepsilon (\varepsilon - \mu)^2 \left(-\frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon_p}\right) d\varepsilon \end{aligned}$$

где $\nu(\varepsilon) = mp(\varepsilon)/\pi^2 \hbar^3$ - плотность электронных состояний, отвечающих энергии ε .

При вычислениях в области низких $T \ll \mu$ температур можно воспользоваться следующим разложением Зоммерфельда по температуре

$$\int_0^\infty F(\varepsilon) \left(-\frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon}\right) d\varepsilon = F(\mu) + \frac{\pi^2 T^2}{6} F''(\mu) + \dots$$

Далее мы легко находим

$$(\Phi, f) = \frac{2}{3} \frac{(\nabla T)^2}{mT} \frac{\pi^2 T^2}{3} \mu \nu(\mu) \approx T \frac{2\varepsilon_F p_F}{9\hbar^3} (\nabla T)^2$$

В силу низких $T \ll \mu$ температур мы не делаем различия между химическим потенциалом μ и энергией Ферми $\varepsilon_F = p_F^2/2m$.

Вычисление $(\Phi, \widehat{W}\Phi)$ в числителе дроби $R_{\kappa}[\Phi_p]$ - гораздо сложнее. Для удобства в использовании результатов предыдущей задачи об электропроводности металла удобно перейти в выражениях для интеграла столкновений и скалярного произведения $(\Phi, \widehat{W}\Phi)$ от суммирования по всем возможным конечным импульсам электрона p' к всем возможным векторам рассеяния $\mathbf{k}$, используя связь $\mathbf{p}' = \mathbf{p} + \hbar\mathbf{k}$, т. е.

$$\widehat{W}\Phi = \sum_{p'} W(p, p') (\Phi_p - \Phi_{p'}) = \sum_k W(\mathbf{p}, \mathbf{p} + \hbar\mathbf{k}) (\Phi_p - \Phi_{p+\hbar\mathbf{k}})$$

Итак, мы должны вычислить две суммы: по всем начальным импульсам электронов p с учетом двух проекций спина и по всем волновым векторам фононов k

$$(\Phi, \widehat{W}\Phi) = \sum_{\rho, p'} W(\rho, p') (\Phi_p - \Phi_{p'})^2 = \sum_{\rho, k} W(p, k) (\Phi_p - \Phi_{p+\hbar k})^2$$

Для линейаризованного интеграла столкновений мы можем воспользоваться выражением, которое получили в предыдущей задаче

$$\begin{aligned} \text{St}[\Phi_p] = \widehat{W}\Phi = & -\frac{2\pi}{\hbar} \sum_k w_k \frac{N(\omega_k)(1+N(\omega_k))}{T} [n_0(\varepsilon_{p+\hbar k}) - n_0(\varepsilon_p)] \times \\ & \times [\delta(\varepsilon_p - \varepsilon_{p+\hbar k} + \hbar\omega_k) - \delta(\varepsilon_p - \varepsilon_{p+\hbar k} - \hbar\omega_k)] (\Phi_p - \Phi_{p+\hbar k}) \end{aligned}$$

где $w_k = g^2 \hbar k^2 / 2\rho\omega_k$ - квадрат матричного элемента электрон-фононного взаимодействия, ω_k - частота фононов и $N(\omega_k)$ - равновесная функция распределения фононов. Преобразуем интеграл столкновений $\text{St}[\Phi_p]$ к более удобному представлению путем введения дополнительного интегрирования по частоте ω . Тогда, получим

$$\begin{aligned} \text{St}[\Phi_p] = & -\frac{2\pi}{\hbar} \sum_k \int_{-\infty}^{\infty} d\omega w_k \frac{N(\omega_k)(1+N(\omega_k))}{T} [n_0(\varepsilon_{p+\hbar k}) - n_0(\varepsilon_p)] \times \\ & \times \delta(\varepsilon_p - \varepsilon_{p+\hbar k} + \hbar\omega) [\delta(\omega - \omega_k) - \delta(\omega + \omega_k)] (\Phi_p - \Phi_{p+\hbar k}) \end{aligned}$$

Далее мы воспользуемся следующими двумя тождествами

$$\begin{aligned} N_{-\omega}(1+N_{-\omega}) &= N_{\omega}(1+N_{\omega}) \\ \delta(\omega - \omega_k) - \delta(\omega + \omega_k) &= 2\omega\delta(\omega^2 - \omega_k^2) \end{aligned}$$

и в результате придем к выражению:

$$\text{St}[\Phi_p] = -\frac{2\pi}{\hbar} \sum_k \varpi_k \int_{-\infty}^{\infty} d\omega 2\omega \frac{N_{\omega}(1+N_{\omega})}{T} \delta(\omega^2 - \omega_k^2) [n_0(\varepsilon_p + \hbar\omega) - n_0(\varepsilon_p)] \delta(\varepsilon_p - \varepsilon_{p+\hbar k} + \hbar\omega) (\Phi_p - \Phi_{p+\hbar k})$$

Таким образом, нам необходимо вычислить

$$\begin{aligned} (\Phi, \widehat{W}\Phi) = & -\frac{2\pi}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} w_k \int \frac{2d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} 2\omega \frac{N_{\omega}(1+N_{\omega})}{T} \times \\ & \times \delta(\omega^2 - \omega_k^2) [n_0(\varepsilon_p + \hbar\omega) - n_0(\varepsilon_p)] \delta(\varepsilon_p - \varepsilon_{p+\hbar k} + \hbar\omega) (\Phi_p - \Phi_{p+\hbar k})^2 \quad (18.2) \end{aligned}$$

при $\Phi_p = (\varepsilon_p - \mu)(v_p \cdot \nabla T)/T$.

Рассмотрим подынтегральный множитель $(\Phi_p - \Phi_{p+\hbar k})^2$ с учетом закона сохранения энергии $\varepsilon_{p+\hbar k} = \varepsilon_p + \hbar\omega$ и простой связи скорости электрона с его импульсом $\mathbf{v}_p = \mathbf{p}/m$:

$$\begin{aligned} (\Phi_p - \Phi_{p+\hbar k})^2 &= \{[(\varepsilon_p - \mu)v_p - (\varepsilon_{p+\hbar k} - \mu)v_{p+\hbar k}] \cdot \nabla T / T\}^2 = \\ &= \{[(\varepsilon_p - \mu)\mathbf{p} - (\varepsilon_p - \mu + \hbar\omega)(\mathbf{p} + \hbar\mathbf{k})] \cdot \nabla T\}^2 / (mT)^2 = \\ &= \{[(\varepsilon_p - \mu + \hbar\omega)\hbar\mathbf{k} + \hbar\omega\mathbf{p}] \cdot \nabla T\}^2 / (mT)^2 \end{aligned}$$

Для дальнейшего преобразования интегралов удобно воспользоваться сферической симметрией электронного и фононного спектров. Отсут-

ствие каких-либо выделенных направлений в изотропной модели металла позволяет усреднить, например, по всем ориентациям вектора ∇T , согласно

$$\langle (\nabla T)_\alpha (\nabla T)_\beta \rangle = (\nabla T)^2 \delta_{\alpha\beta} / 3, \quad \alpha, \beta = (x, y, z)$$

и, тем самым, существенно упростить дальнейшие вычисления. В результате мы найдем

$$(\Phi_p - \Phi_{p+\hbar k})^2 = \frac{(\nabla T)^2}{3(mT)^2} \times \\ \times [(\varepsilon_p - \mu + \hbar\omega)^2 \hbar^2 k^2 + 2\hbar\omega (\varepsilon_p - \mu + \hbar\omega) \hbar k \cdot p + \hbar^2 \omega^2 p^2]$$

Скалярное произведение $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ можно оценить, используя условие зануления аргумента в δ -функции. Действительно, для простого закона дисперсии электронов $\varepsilon_p = p^2/2m$ мы имеем

$$\varepsilon_{p+\hbar k} - \varepsilon_p - \hbar\omega = \frac{2\hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} + \hbar^2 k^2}{2m} - \hbar\omega = 0 \quad \text{или} \quad 2\mathbf{k} \cdot \mathbf{p} = -\hbar k^2 + 2m\hbar\omega.$$

Соответственно, мы получим

$$(\Phi_p - \Phi_{p+\hbar k})^2 = \frac{(\nabla T)^2}{3(mT)^2} \times \\ \times [(\varepsilon_p - \mu)^2 \hbar^2 k^2 + \hbar\omega (\varepsilon_p - \mu) (\hbar^2 k^2 + 2m\hbar\omega) + \hbar^2 \omega^2 (p^2 + 2m\hbar\omega)]$$

Теперь рассмотрим интегрирование в $\delta(\varepsilon_p - \varepsilon_{p+\hbar k} + \hbar\omega)$ по углу между векторами $\mathbf{k}$ и $\mathbf{p}$. Аргумент в δ -функции равен

$$\varepsilon_{p+\hbar k} - \varepsilon_p - \hbar\omega = \frac{\hbar k p}{m} \left(\cos \theta + \frac{\hbar k}{2p} - \frac{2m\omega}{pk} \right) \approx \frac{\hbar k p}{4m} \left(\cos \theta + \frac{\hbar k}{2p} \right)$$

где θ - угол между векторами $\mathbf{k}$ и $\mathbf{p}$. Как и в предыдущей задаче нас интересует область импульсов p , близких по величине к импульсу Ферми p_F , и мы также можем пренебречь членом $2m\omega/pk$, так как

$$\frac{2m\omega}{pk} = \frac{2m\omega_k}{pk} \sim \frac{2ms}{p_F} \sim \frac{s}{v_F} \ll 1$$

и скорость звука s мала по сравнению со скоростью Ферми v_F . Проведем часть интегрирования по вектору $\mathbf{k}$, а именно по углу θ между векторами $\mathbf{k}$ и $\mathbf{p}$. В результате мы найдем

$$\int \frac{d\Omega}{4\pi} \delta(\varepsilon_p + \hbar k - \varepsilon_p - \hbar\omega) \approx -\frac{1}{2} \int_0^\pi d(\cos \theta) \delta \left[\frac{\hbar k p}{m} \left(\cos \theta + \frac{\hbar k}{2p} \right) \right] = \frac{m}{2\hbar k p} \theta(2p - \hbar k)$$

и таким образом интегрирование по модулю вектора $\mathbf{k}$ ограничено величиной $2p/\hbar \sim 2p_F/\hbar$. Итак, мы приходим к следующему выражению для $(\Phi, \widehat{W}\Phi)$:

$$(\Phi, \widehat{W}\Phi) = -\frac{1}{3} \frac{(\nabla T)^2}{m^2 T^2} \frac{2\pi}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \int_0^{2p/\hbar} \frac{4\pi k^2 dk}{(2\pi)^3} \int_0^\infty 2 \frac{4\pi^2 dp}{(2\pi\hbar)^3} w_k \times \\ \times 2\omega \frac{N_\omega (1 + N_\omega)}{T} \delta(\omega^2 - \omega_k^2) \frac{m}{2\hbar k p} [n_0(\varepsilon_p + \hbar\omega) - n_0(\varepsilon_p)] \times \\ \times [(\varepsilon_p - \mu)^2 \hbar^2 k^2 + \hbar\omega (\varepsilon_p - \mu) (\hbar^2 k^2 + 2m\hbar\omega) + \hbar^2 \omega^2 (p^2 + 2m\hbar\omega)]$$

Перейдем в интегрировании по импульсу электрона $\mathbf{p}$ к переменной энергии $\varepsilon = p^2/2m$:

$$(\Phi, \widehat{W}\Phi) = -\frac{2\pi}{3} \frac{(\nabla T)^2}{\hbar^2 T^2} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \int_0^\infty \frac{d\varepsilon}{\pi^2 \hbar^3} \int_0^{2p(\varepsilon)/\hbar} \frac{k dk}{2\pi^2} w_k \times \\ \times \omega \frac{N_\omega (1 + N_\omega)}{T} \delta(\omega^2 - \omega_k^2) [n_0(\varepsilon + \hbar\omega) - n_0(\varepsilon)] \times \\ \times [(\varepsilon - \mu)^2 \hbar^2 k^2 + \hbar\omega (\varepsilon - \mu) (\hbar^2 k^2 + 2m\hbar\omega) + \hbar^2 \omega^2 (p^2(\varepsilon) + 2m\hbar\omega)]$$

При интегрировании по ε мы отметим, что основной вклад в интегралы вносит область энергий, близких к химическому потенциалу или к поверхности Ферми $|\varepsilon - \mu| \ll \mu$, а все фононные энергии $\hbar\omega$ не превышают температуры Дебая Θ_D , которая также мала по сравнению с энергией Ферми $\varepsilon_F \sim \mu$ в силу неравенства $\Theta_D/\varepsilon_F \sim s/v_F \ll 1$. Эти особенности, характерные для интегралов с распределением Ферми при низких $T \ll \mu \sim \varepsilon_F$ температурах, позволяют заменить нижний предел интегрирования по ε на $-\infty$ и положить также $p(\varepsilon) \approx p(\varepsilon_F) = p_F$.

Пользуясь следующими значениями для интегралов с функцией Ферми $n_0(\varepsilon)$:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon [n_0(\varepsilon + \hbar\omega) - n_0(\varepsilon)] &= -\hbar\omega \\ \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon (\varepsilon - \mu) [n_0(\varepsilon + \hbar\omega) - n_0(\varepsilon)] &= \hbar^2\omega^2/2 \\ \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon (\varepsilon - \mu)^2 [n_0(\varepsilon + \hbar\omega) - n_0(\varepsilon)] &= -\hbar\omega (\hbar^2\omega^2 + \pi^2 T^2) / 3 \end{aligned}$$

и пренебрегая слагаемым $m\hbar\omega$ по сравнению с $p^2 \sim p_F^2$, мы найдем, что $(\Phi, \widehat{W}\Phi) = \frac{2\pi(\nabla T)^2}{9\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \times$

$$\times \int_0^{2p_F/\hbar} \frac{dk}{2\pi^2} w_k \omega^2 \frac{N_\omega (1 + N_\omega)}{T} \delta(\omega^2 - \omega_k^2) \left[k^2 + \left(\frac{\omega}{\pi T} \right)^2 \left(3p_F^2 - \frac{\hbar^2 k^2}{2} \right) \right]$$

Дальнейшее вычисление интегралов мы проведем для простого фононного спектра $\omega_k = sk$ с одной акустической ветвью. В полной аналогии с предыдущей задачей мы видим, что интегрирование по модулю волнового вектора k ограничено величиной k_m - минимальным значением из двух величин: $2p_F/\hbar$ и k_D . Последний волновой вектор соответствует частоте Дебая $\omega_D = sk_D$. Ниже мы не делаем различия между величинами векторов k_D и $2p_F/\hbar$, которые к тому же в металле одного порядка. Для определенности мы положим $k_m = k_D$.

Итак, мы имеем

$$(\Phi, \widehat{W}\Phi) = \frac{(\nabla T)^2}{9\pi\hbar^2} \int_0^{k_m=k_D} dk k w_k \frac{\omega_k}{T} \frac{e^{\hbar\omega_k/T}}{(e^{\hbar\omega_k/T} - 1)^2} \left[k^2 + \left(\frac{\omega}{\pi T} \right)^2 \left(3p_F^2 - \frac{\hbar^2 k^2}{2} \right) \right].$$

Подставляя $w_k = g^2 \hbar k^2 / (2\rho\omega_k)$, где ρ - плотность металла, и вводя температуру Дебая $\Theta_D = \hbar s k_D$ и новую переменную $z = \hbar s k / T$, мы окончательно получим

$$\begin{aligned} (\Phi, \widehat{W}\Phi) &= \frac{(\nabla T)^2}{18\pi} \frac{g^2 k_D^4}{\rho s^2 \hbar^3} \frac{T^5}{\Theta_D^4} \times \\ &\times \left[J_5 \left(\frac{\Theta_D}{T} \right) - \frac{1}{2\pi^2} J_7 \left(\frac{\Theta_D}{T} \right) + \frac{3}{\pi^2} \left(\frac{p_F}{\hbar k_D} \right)^2 \left(\frac{\Theta_D}{T} \right)^2 J_5 \left(\frac{\Theta_D}{T} \right) \right] \end{aligned}$$

Дебаевские интегральные функции $J_n(z)$ определены согласно формуле

$$J_n(z) = \int_0^z dz \frac{z^n e^z}{(e^z - 1)^2} = \frac{1}{4} \int_0^z dz \frac{z^n}{\text{sh}^2 z/2}$$

Наконец, мы можем теперь определить коэффициент теплопроводности κ , воспользовавшись результатами для (Φ, f) и $(\Phi, \widehat{W}\Phi)$. Подстановка последних в $R_\kappa [\Phi_\rho]$ приводит к формуле Вильсона для теплосопротивления $1/\kappa$

$$\begin{aligned} \frac{1}{\kappa} &= T \frac{\frac{1}{2}(\nabla T)^2 (\Phi, \widehat{W}\Phi)}{(\Phi, f)^2} = \frac{9\pi\zeta\hbar^2}{4mp_F v_F^2} \left(\frac{\hbar k_D}{\rho_F} \right)^4 f \left(\frac{\Theta_D}{T} \right) = \frac{3}{4\pi} \zeta \frac{m}{n\hbar} \left(\frac{\hbar k_D}{p_F} \right)^4 f \left(\frac{\Theta_D}{T} \right) \\ f(z) &= \frac{1}{z^4} \left[J_5(z) - \frac{1}{2\pi^2} J_7(z) + \frac{3}{\pi^2} \left(\frac{\rho_F}{\hbar k_D} \right)^2 z^2 J_5(z) \right] \end{aligned}$$

В этой формуле

$$\zeta = \frac{g^2}{\rho s^2} \nu(\varepsilon_F) = \frac{g^2}{\rho s^2} \frac{mp_F}{\pi^2 \hbar^2}$$

определяет безразмерную константу электрон-фононного взаимодействия и $n = p_F^3 / (3\pi^2 \hbar^3)$ - концентрация электронов в металле.

Проанализируем температурное поведение коэффициента теплопроводности. Начнем со случая высоких $T \gg \Theta_D$ температур. В этом случае основной вклад дает первое слагаемое в квадратных скобках, потому что $J_5(z \ll 1) \approx z^4/4$ и остальные два слагаемых порядка z^6 гораздо меньше. В результате при температурах, превышающих температуру Дебая Θ_D , коэффициент теплопроводности

$$\kappa(T) = \frac{16\pi}{3} \frac{1}{\zeta} \frac{n\hbar}{m} \left(\frac{p_F}{\hbar k_D} \right)^4 \sim \frac{n\hbar}{m} \frac{1}{\zeta} \quad (T \gg \Theta_D)$$

не зависит от температуры.

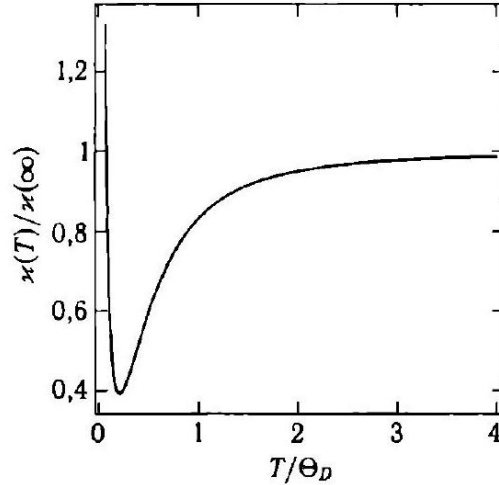


Рис. 3.6. Пример поведения приведенного коэффициента теплопроводности $\kappa(T)/\kappa(\infty)$ в зависимости от приведенной температуры T/Θ_D для случая $p_F = \hbar k_D$

В области низких $T \ll \Theta_D$ температур основной вклад связан с последним слагаемым в квадратных скобках. Это ведет к следующей температурной зависимости:

$$\kappa(T) = \frac{4\pi^3}{9J_5(\infty)} \frac{1}{\zeta} \frac{n\hbar}{m} \left(\frac{p_F}{\hbar k_D} \right)^2 \left(\frac{\Theta_D}{T} \right)^2 \sim \frac{n\hbar}{m} \frac{1}{\zeta} \frac{\Theta_D^2}{T^2} \quad (T \ll \Theta_D)$$

Здесь $J_5(\infty) = 120\zeta(5)$ и $\zeta(5) \approx 1,037$ - дзета-функция Римана. Пример поведения коэффициента теплопроводности $\chi(T)$, отнесенного к его предельному высокотемпературному значению $\chi(\infty)$, представлен на рис. 3.6 для случая $\hbar k_D = p_F$.

Рассмотрим поведение коэффициента теплопроводности κ с точки зрения газокINETической формулы

$$\kappa(T) = \frac{1}{3} C(T) v_F^2 \tau_\kappa$$

$$C(T) = \frac{\pi^2}{3} T \nu(\varepsilon_F) = \frac{\pi^2}{2} n \frac{T}{\varepsilon_F}.$$

Здесь $C(T)$ - электронная теплоемкость металла при температуре $T \ll \varepsilon_F$, v_F - характерная скорость электронов, равная скорости Ферми и τ_κ - характерное время электрон-фоонных столкновений. О последней величине точнее говорить, как об эффективном времени обмена энергии между электронной и фоонной подсистемами. Соответственно, для частоты электрон-фоонных столкновений мы найдем

$$\nu_\kappa = \tau_\kappa^{-1} = \frac{\pi}{4} \left(\frac{\hbar k_D}{p_F} \right)^4 \frac{\zeta T J_5(z) - \frac{1}{2\pi^2} J_7(z) + \frac{3}{\pi^2} \left(\frac{p_F}{\hbar k_D} \right)^2 z^2 J_5(z)}{z^4} \Bigg|_{z=\frac{\Theta_D}{T}}$$

Следующие формулы дают наглядное представление о поведении эффективной частоты электрон-фоонных столкновений ν_κ в предельных случаях:

$$\nu_\kappa = \tau_\kappa^{-1} = \begin{cases} \frac{\pi}{16} \frac{T}{\hbar} \zeta \left(\frac{\hbar k_D}{p_F} \right)^4 \sim \zeta \frac{T}{\hbar}, & T \gg \Theta_D \\ \frac{90}{\pi} \zeta(5) \frac{T}{\hbar} \zeta \left(\frac{T}{\Theta_D} \right)^2 \left(\frac{\hbar k_D}{p_F} \right)^2 \sim \zeta \frac{T^3}{\hbar \Theta_D^2}, & T \ll \Theta_D \end{cases}$$

Что касается закона Видемана-Франца, то при высоких $T \gg \Theta_D$ температурах он должен выполняться точно, и в этом смысле число Лоренца $L = \kappa/\sigma T$ не зависит от температуры. Это свойство является прямым следствием того, что эффективные времена обмена энергии τ_κ и обмена

импульсом τ_{tr} между электронной и фоонной подсистемами имеют одинаковую температурную зависимость и оказываются одного порядка $\tau_\kappa = \tau_{tr}$. При низких $T \ll \Theta_D$ температурах это не так, $\tau_\kappa \sim T^{-3}$, а $\tau_{tr} \sim T^{-5}$. Следствием этого является нарушение закона Видемана-Франца и число Лоренца зависит от температуры как $L \sim T^2$.

БРМ-1

5. Найти низкотемпературный коэффициент Зеебека S для металла, воспользовавшись моделью свободных электронов с законом дисперсии $\varepsilon_p = p^2/2m$ и предполагая, что фононы в металле представлены только одной акустической ветвью со скоростью звука s и дисперсией $\omega = sk$. При решении задачи воспользоваться законом сохранения суммарного импульса электронной и фоонной

подсистем и его следствием для следующей комбинации электронного и фононного интегралов столкновений:

$$\int \mathbf{p} \text{St}_e[n, N] \frac{2d^3p}{(2\pi\hbar)^3} + \int \hbar \mathbf{k} \text{St}_{ph}[N, n] \frac{d^3k}{(2\pi)^3} = 0,$$

где интегрирование ведется по всем импульсам электрона и волновым векторам фонона.

15.

Запишем кинетическое уравнение для электронной функции распределения $n_p(r)$:

$$\mathbf{v} \cdot \frac{\partial n_p}{\partial \mathbf{r}} + e \mathbf{E} \cdot \frac{\partial n_p}{\partial \mathbf{p}} = \text{St}_e[n, N]$$

где $\mathbf{E}$ - электрическое поле, действующее на электроны, и скорость электронов равна $\mathbf{v} = \partial \varepsilon_p / \partial \mathbf{p} = \mathbf{p}/m$. Стационарное кинетическое уравнение для фононной функции распределения $N_k(r)$ имеет вид

$$\mathbf{s} \cdot \frac{\partial N_k}{\partial \mathbf{r}} = \text{St}_{ph}[N, n]$$

где $\mathbf{s} = \partial \omega_k / \partial \mathbf{k} = \mathbf{s}\mathbf{k}/\mathbf{k}$ - скорость фононов.

Умножая первое уравнение на $\mathbf{p}$, второе уравнение на $\hbar \mathbf{k}$ и интегрируя их соответственно по электронным и фононным переменным, мы затем сложим эти два уравнения и учтем обращение в ноль правой части согласно сохранению суммарного импульса электронов и фононов

$$\begin{aligned} \int \mathbf{p} \left(\mathbf{v} \cdot \frac{\partial n_p}{\partial \mathbf{r}} + e \mathbf{E} \cdot \frac{\partial n_p}{\partial \mathbf{p}} \right) \frac{2d^3p}{(2\pi\hbar)^3} + \int \hbar \mathbf{k} \left(\mathbf{s} \cdot \frac{\partial N_k}{\partial \mathbf{r}} \right) &= \\ = \int \mathbf{p} \text{St}_e[n, N] \frac{2d^3p}{(2\pi\hbar)^3} + \int \hbar \mathbf{k} \text{St}_{ph}[N, n] \frac{d^3k}{(2\pi)^3} &= 0 \end{aligned}$$

В качестве первого приближения для обеих функций распределения и в линейном приближении по малым величинам электрического поля $\mathbf{E}$ и градиента температуры ∇T , мы можем выбрать локально равновесные функции распределения электронов и фононов:

$$n_p \approx n_0 \left(\frac{\varepsilon_p - \mu}{T} \right) \quad \text{и} \quad N_k \approx N_0 \left(\frac{\hbar \omega_k}{T} \right)$$

где n_0 и N_0 - распределения Ферми и Планка, соответственно. Замечая, что $\partial N_0 / \partial \mathbf{r} = -(\omega \partial N_0 / \partial \omega) (\nabla T / T)$, мы найдем

$$\begin{aligned} \int \mathbf{p} (e \mathbf{v} \cdot \mathbf{E}') \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon_p} \frac{2d^3p}{(2\pi\hbar)^3} - \int \mathbf{p} (\mathbf{v} \cdot \nabla T) \frac{\varepsilon_p - \mu}{T} \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon_p} \frac{2d^3p}{(2\pi\hbar)^3} - \\ - \int \hbar \mathbf{k} (\mathbf{s} \cdot \nabla T) \frac{\omega_k}{T} \frac{\partial N_0}{\partial \omega_k} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} = 0 \end{aligned}$$

Здесь $\mathbf{E}' = \mathbf{E} - \mu / -$ эффективное поле, действующее на электрон.

Воспользовавшись сферической симметрией электронного и фононного спектров, нетрудно провести усреднение по углам между векторами $\mathbf{v}$ и $\mathbf{E}'$, $\mathbf{v}$ и ∇T , а также $\mathbf{k}$ и ∇T . В результате имеем

$$e \mathbf{E}' \cdot \int \mathbf{p} \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon_p} \frac{2d^3p}{(2\pi\hbar)^3} - \nabla T \cdot \int \mathbf{p} \frac{\varepsilon_p - \mu}{T} \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon_p} \frac{2d^3p}{(2\pi\hbar)^3} - \nabla T \cdot \int \frac{\hbar \mathbf{s} \mathbf{k} \omega_k}{T} \frac{\partial N_0}{\partial \omega_k} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} = 0.$$

Интегралы с фермиевской функцией распределения ранее вычислялись в предыдущих задачах и поэтому мы можем сразу выписать ответы. Последний интеграл удобно найти интегрированием по частям

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \frac{\hbar s k \omega_k}{T} \frac{\partial N_0}{\partial \omega_k} \frac{k^2 dk}{2\pi^2} &= \frac{\hbar}{2\pi^2 s^3 T} \int_0^\infty \omega^4 \frac{\partial N_0}{\partial \omega} d\omega = \\ &= -\frac{2\hbar}{\pi^2 s^3 T} \int_0^\infty \omega^3 N_0(\omega) d\omega = -\frac{2\pi^2}{15} \frac{T^3}{\hbar^3 s^3} \end{aligned}$$

Таким образом, мы имеем

$$-3en\mathbf{E}' + \frac{3\pi^2}{2} \frac{nT}{\varepsilon_F} \nabla T + \frac{2\pi^2}{15} \frac{T^3}{\hbar^3 s^3} \nabla T = 0$$

где n - концентрация электронов и ε_F - энергия Ферми.

Учитывая, что ток электронов

$$\mathbf{j} = \int \mathbf{v} n_0(\varepsilon_p) \frac{2d^3p}{(2\pi\hbar)^3} = 0$$

для локально равновесной функции распределения n_0 , выбранной нами в качестве нулевого приближения, обращается в ноль, мы можем определить коэффициент Зеебека S как отношение $\mathbf{E}'$ к градиенту температуры ∇T . Итак, коэффициент Зеебека равен

$$S = \frac{\pi^2}{2e} \left(\frac{T}{\varepsilon_F} + \frac{4\pi^2}{45} \frac{T^3}{\hbar^3 s^3 n} \right) = \frac{\pi^2}{2e} \left[\frac{T}{\varepsilon_F} + \frac{4\pi^4}{15} \left(\frac{\hbar k_D}{p_F} \right)^3 \left(\frac{T}{\Theta_D} \right)^3 \right]$$

где мы ввели температуру Дебая Θ_D и соответствующий волновой вектор $k_D \sim p_F/\hbar$, согласно $\Theta_D = \hbar s k_D$. Вклад второго слагаемого в коэффициент Зеебека целиком обусловлен наличием фононной подсистемы в металле и отклонением ее функции распределения N_k от полностью равновесной в результате медленной релаксации в фононной подсистеме при низких ($T \ll \Theta_D$) температурах в основном за счет процессов рассеяния электронов на фононах, а не фонон-фононных столкновений.

БРМ-16 Рассеяние электронов в магнитной примеси

Для описания процессов рассеяния электронов проводимости в металле с магнитными примесями, имеющими ненулевой спин, часто используется $s-d$ обменная модель. В ней обменное взаимодействие электрона проводимости со всеми спинами магнитных примесей записывается в виде суммы по всем примесям, случайно расположенных в точках $\mathbf{r} = \mathbf{R}_a$,

$$U(\mathbf{r}) = \sum_a u(\mathbf{r} - \mathbf{R}_a) \quad \text{и} \quad u(\mathbf{r}) = J(\boldsymbol{\sigma} \mathbf{S}) \delta(\mathbf{r}).$$

Здесь $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma^x, \sigma^y, \sigma^z)$ - матрицы Паули, $\mathbf{S}_a$ - оператор спина примеси, расположенной в узле $\mathbf{r} = \mathbf{R}_a$, и J - обменный интеграл, который обычно мал по сравнению с энергией Ферми ε_F , отнесенной к плотности электронов n ($J \ll \varepsilon_F/n$).

Считая спектр электронов, равным $\varepsilon_p = p^2/2m$, а концентрацию магнитных примесей, равной n_i , найти в первом и во втором борновском приближении амплитуду и вероятность рассеяния электронов. Во втором борновском приближении учесть принцип Паули при анализе суммы по промежуточным состояниям в членах второго порядка. Концентрация магнитных примесей мала ($n_i \ll n$) и возможной корреляцией между спинами примесей пренебречь.

Вычислить температурный вклад в электрическое сопротивление металла $\rho(T)$, возникающий от рассеяния электронов проводимости на локализованных магнитных примесях, с точностью до членов J^3 по обменной константе (эффект Кондо).

Решения 3.6. РАССЕЯНИЕ ЭЛЕКТРОНОВ НА МАГНИТНОЙ ПРИМЕСИ. ЭФФЕКТ КОНДО

16 solution

Запишем интеграл столкновений для функции распределения электронов в поле случайно расположенных примесей

$$\text{St}[n_p] = \int [(1 - n_{p'}) W(\mathbf{p} \mathbf{p}') n_{p'} - (1 - n_p) W(\mathbf{p}' \mathbf{p}) n_p] \frac{V d^3 p'}{(2\pi\hbar)^3}$$

Вероятность $W(\mathbf{p} \mathbf{p}')$ упругого перехода электрона из состояния с импульсом $\mathbf{p}$ в состояние с импульсом $\mathbf{p}'$ в единицу времени в единице объема дается выражением

$$W(\mathbf{p} \mathbf{p}') = \frac{2\pi}{\hbar} |t(\mathbf{p} \mathbf{p}')|^2 \delta(\varepsilon_{\mathbf{p}} - \varepsilon_{\mathbf{p}'})$$

где матричный элемент $t(\mathbf{p} \mathbf{p}')$ связан с амплитудой рассеяния $a(\mathbf{p} \mathbf{p}')$ соотношением

$$t(\mathbf{p} \mathbf{p}') = -\frac{2\pi\hbar^2}{m} a(\mathbf{p} \mathbf{p}')$$

и, соответственно, с дифференциальным сечением рассеяния соотношением

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |a(\rho' \rho)|^2 = \left(\frac{2\pi\hbar^2}{m} \right)^2 |t(\rho' \rho)|^2$$

В первом борновском приближении мы имеем

$$t(\mathbf{p} \mathbf{p}') \approx t^{(1)}(\mathbf{p} \mathbf{p}') = U(\mathbf{p} \mathbf{p}')$$

где $U(\mathbf{p} \mathbf{p}')$ - матричный элемент потенциала взаимодействия $U(\mathbf{r})$ электрона с примесями. Матричный элемент $U(\mathbf{p} \mathbf{p}')$ для волновых функций свободного движения электрона с импульсом $\mathbf{p}$

$$\psi_p(r) = \frac{e^{ipr/\hbar}}{\sqrt{V}}$$

где множитель $V^{-1/2}$ подразумевает нормировку на один электрон в объеме V , имеет вид

$$U_{p'p} = \int \psi_{p'}^*(\mathbf{r}) U(\mathbf{r}) \psi_p(\mathbf{r}) d^3r = \frac{u_{p'p}}{V} \sum_a e^{-i(\mathbf{p}'-\mathbf{p})\mathbf{R}_a/\hbar}$$

Таким образом, матричный элемент $p'p$ приобретает дополнительный множитель $e^{-i(\mathbf{p}'-\mathbf{p})\mathbf{R}_a/\hbar}$ от каждой примеси, расположенной в точке $\mathbf{r} = \mathbf{R}_a$. После усреднения по случайному расположению примесей в

квадрате модуля $|U_{p'\rho}|^2$ в двойной сумме по положениям примесей остается только часть суммы, отвечающая совпадающим положениям примесей $\mathbf{R}_a = \mathbf{R}_b$

$$|U_{p'\rho}|_{\text{уср}}^2 = \frac{N_i}{V^2} |u_{p'p}|^2$$

где $N_i = n_i V$ - полное число примесей в объеме V .

Итак, после усреднения по положению примесей вероятность перехода примет вид

$$W_{p'p}^{(ycp)} = \frac{2\pi}{\hbar} n_i \frac{|u_{p'\rho}|^2}{V} \delta(\varepsilon_p - \varepsilon_{p'})$$

Если вероятность перехода симметричная, т.е. $W_{p'p}^{(ycp)} = W_{pp'}^{(ycp)}$, то интеграл столкновений сразу упрощается

$$\text{St}[n_p] = - \int W_{pp'}^{(ycp)} (n_p - n_{p'}) \frac{V d^3p'}{(2\pi\hbar)^3}$$

Решение кинетического уравнения для функции распределения электронов n_p в линейном приближении по электрическому полю $\mathbf{E}$ позволяет представить интеграл столкновений в релаксационном виде с некоторым эффективным транспортным временем столкновений

$$\text{St}[n_p] = - \frac{n(p) - n_0(p)}{\tau_{\text{tr}}(p)}$$

где $n_0(p)$ - равновесная фермиевская функция распределения, а транспортное время столкновений или время релаксации дается формулой

$$\frac{1}{\tau_{\text{tr}}(p)} = \int W_{p'p}^{(ycp)} (1 - \cos \theta') \frac{V d^3p'}{(2\pi\hbar)^3}$$

в предположении, что $W_{p'\rho}^{(ccp)}$ зависит только от угла θ' между векторами $\mathbf{p}$ и $\mathbf{p}'$.

Если выйти за рамки первого борновского приближения, то вероятность перехода $W_{p'p}^{(ccp)}$ будет выражаться уже через полный матричный элемент $t(p'p)$, который отличается только множителем $(-2\pi\hbar^2/m)$ от точной амплитуды рассеяния $a(p'p)$ электрона на одной отдельной примеси, т. е.

$$W_{p'p}^{(yp)} = \frac{2\pi}{\hbar} n_i \frac{|t(\mathbf{p}'\mathbf{p})|^2}{V} \delta(\varepsilon_p - \varepsilon_{p'})$$

с очевидным первым приближением $t(\mathbf{p}'\mathbf{p}) \approx t_{p'p}^{(1)} = u_{p'p}$.

Рассмотрим в первом борновском приближении вероятность перехода $W_{p'p}^{(cc)}$ для рассеяния электрона на обменном s - d -потенциале $u(\mathbf{r}) = J(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{S})\delta(\mathbf{r})$ локализованного спина $\mathbf{S}$. Фурье-компонента этого потенциала не зависит от импульсов и равна

$$u_{p'p} = J\sigma S.$$

Матричные элементы для разных ориентаций электронного спина мы можем записать следующим образом:

$$\begin{aligned} t_{\uparrow\uparrow}^{(1)}(\mathbf{p}'\mathbf{p}) &= \langle \uparrow | u_{p'p} | \uparrow \rangle = J \langle \uparrow | \sigma \mathbf{S} | \uparrow \rangle = JS_z, \\ t_{\uparrow\downarrow}^{(1)}(\mathbf{p}'\mathbf{p}) &= \langle \uparrow | u_{p'p} | \downarrow \rangle = J \langle \uparrow | \sigma \mathbf{S} | \downarrow \rangle = JS^-, \\ t_{\downarrow\uparrow}^{(1)}(\mathbf{p}'\mathbf{p}) &= \langle \downarrow | u_{p'p} | \uparrow \rangle = J \langle \downarrow | \sigma \mathbf{S} | \uparrow \rangle = JS^+, \\ t_{\downarrow\downarrow}^{(1)}(\mathbf{p}'\mathbf{p}) &= \langle \downarrow | u_{p'p} | \downarrow \rangle = J \langle \downarrow | \sigma \mathbf{S} | \downarrow \rangle = -JS_z. \end{aligned}$$

Здесь $S^\pm = S_x \pm iS_y$, S_z - круговые и z проекции оператора спина примеси $\mathbf{S}$. Время столкновений можно вычислить двумя способами.

В нашем случае неполяризованной электронной ферми-жидкости и, когда все ориентации спина примеси равновероятны, время рассеяния электрона не зависит от его спина и одинаково для направления спина вверх и вниз. В этом случае можно просуммировать вероятность перехода по всем конечным ориентациям электронного спина и усреднить по его начальным состояниям, т. е. разделить пополам. Итак, мы получим

$$\begin{aligned} \sum_{\sigma, \sigma'} \left| t^{(1)}(\mathbf{p}'\mathbf{p}) \right|^2 &= (t_{\uparrow\uparrow}^{(1)}t_{\uparrow\uparrow}^{(1)} + t_{\uparrow\downarrow}^{(1)}t_{\downarrow\uparrow}^{(1)} + t_{\downarrow\uparrow}^{(1)}t_{\uparrow\downarrow}^{(1)} + t_{\downarrow\downarrow}^{(1)}t_{\downarrow\downarrow}^{(1)}) / 2 = \\ &= J^2 (S_z^2 + S^-S^+ + S^+S^- + (-S_z)^2) / 2 = J^2 S(S+1) \end{aligned} \quad (1/2)$$

В результате найдем для времени столкновений

$$\frac{1}{\tau_{ir}^{(1)}(p)} = \frac{2\pi}{\hbar} n_i J^2 S(S+1) \int \delta(\varepsilon_p - \varepsilon_{p'}) \frac{d^3 p'}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{\pi n_i}{\hbar} \nu(\varepsilon_p) J^2 S(S+1)$$

где $\nu(\varepsilon) = m(2m\varepsilon)^{1/2} / (\pi^2 \hbar^3)$ - плотность состояний.

С другой стороны время рассеяния электрона, например с ориентацией спина вверх, можно записать как $\frac{1}{\tau_{tr1}^{(1)}(p)} = \frac{2\pi}{\hbar} n_i \int \langle t_{\uparrow\uparrow}^{(1)}t_{\uparrow\uparrow}^{(1)} + t_{\uparrow\downarrow}^{(1)}t_{\downarrow\uparrow}^{(1)} \rangle \delta(\varepsilon_p - \varepsilon_{p'}) \frac{d^3 p'}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{\pi n_i}{\hbar} \nu(\varepsilon_p) J^2 \langle S_z^2 + S^-S^+ \rangle$,

где угловые скобки означают усреднение по всем ориентациям спина примеси. Пользуясь тем, что

$$\langle S_z^2 + S^-S^+ \rangle = \langle S_z^2 + S_x^2 + S_y^2 \rangle - \langle S_z \rangle = S(S+1)$$

и среднее значение проекции $\langle S_z \rangle$ равно нулю, мы приходим к тому же результату для времени рассеяния. Рассмотрение рассеяния электрона со спином вниз аналогично.

Электросопротивление ρ в первом борновском приближении определяется значением времени рассеяния $\tau_{tr}^{(1)}(p)$ при импульсе $p = p_F$ или энергии $\varepsilon = \varepsilon_F$ и равно

$$\rho^{(1)} = \frac{m}{ne^2} \frac{1}{\tau_{tr}^{(1)}(p_F)} = \frac{3\pi m}{2e^2} n_i \frac{J^2 S(S+1)}{\hbar \varepsilon_F}$$

Сопротивление пропорционально концентрации примеси n_i , квадрату обменной константы J и в этом приближении не зависит от температуры T .

Рассмотрим теперь амплитуду рассеяния во втором борновском приближении и найдем вклад в сопротивление, пропорциональный кубу обменной константы J . С точностью до второго порядка по взаимодействию матричный элемент перехода электрона из состояния $\mathbf{p}$ в состояние $\mathbf{p}'$ дается формулой

$$t(\mathbf{p}', \mathbf{p}) = t^{(1)}(\mathbf{p}', \mathbf{p}) + t^{(2)}(\mathbf{p}', \mathbf{p}) + \dots = u_{\mathbf{p}'\mathbf{p}} + \sum_k \frac{u_{\mathbf{p}'\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}\mathbf{p}}}{\varepsilon_p - \varepsilon_k + i\delta} + \dots$$

Сумма здесь берется по всем промежуточным состояниям $\mathbf{k}$ для перехода $p \rightarrow p'$ и такой переход осуществляется как бы в двухкратном рассеянии на примеси и в виде двух возможных последовательностей: $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{k}$, а затем $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{p}'$ или $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{p}'$, а затем $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{k}$.

При рассмотрении переходов с участием промежуточного состояния в соответствии с принципом Паули мы должны учесть занято или свободно промежуточное состояние другими электронами, наличие которых в этом промежуточном состоянии описывается функцией распределения n_p . В первом варианте, чтобы электрон мог перейти из состояния $\mathbf{p}$ в состояние $\mathbf{k}$, последнее должно быть свободно. Это условие учитывается введением дополнительного множителя $(1 - n_k)$:

$$t_1^{(2)}(\mathbf{p}', \mathbf{p}) = \sum_k u_{\mathbf{p}'\mathbf{k}} \frac{1 - n_k}{\varepsilon_p - \varepsilon_k + i\delta} u_{\mathbf{k}\mathbf{p}}$$

Графическая иллюстрация этого варианта рассеяния дана на рис.

3.7.

Второй вариант рассеяния напоминает первый, но происходит в обратном порядке по времени. Электрон в состоянии $\mathbf{k}$, рассеиваясь на

примеси, переходит в состояние $\mathbf{p}'$, затем позже электрон в состоянии $\mathbf{p}$, рассеиваясь на примеси, переходит в состояние $\mathbf{k}$. Таким образом, электрон в состоянии $\mathbf{p}'$ появляется по времени раньше, чем электрон в состоянии $\mathbf{p}$. Здесь, наоборот, состояние $\mathbf{k}$ должно быть занято и мы это учтем введением дополнительного множителя n_k , а обратную временную последовательность, которая важна в квантовой механике, учтем перестановкой матричных элементов так, чтобы порядок событий во времени шел справа налево. Этот второй вариант рассеяния показан на рис. 3.8.

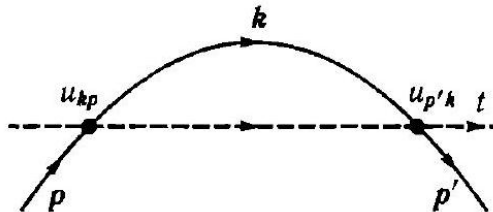
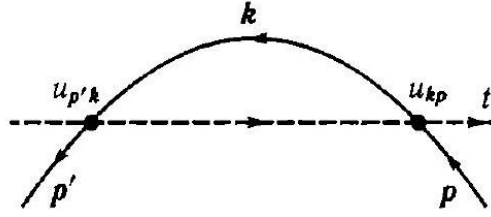


Рис. 3.7. Первый вариант двукратного рассеяния на примеси

Рис. 3.8. Второй вариант двукратного рассеяния на примеси
Таким образом, приходим к соотношению

$$t_2^{(2)}(\mathbf{p}', \mathbf{p}) = \sum_k u_{kp} \frac{n_k}{\varepsilon_{p'} - \varepsilon_k + i\delta} u_{p'k}$$

Закон сохранения энергии для рассеяния между начальным $\mathbf{p}$ и конечным $\mathbf{p}'$ состояниями позволяет положить $\varepsilon_{p'} = \varepsilon_p$.

Суммируя эти два слагаемые, получим

$$\begin{aligned} t_{\alpha'\alpha}^{(2)}(\mathbf{p}', \mathbf{p}) &= \sum_k \left(\frac{u_{p'k}(1-n_k)u_{kp}}{\varepsilon_p - \varepsilon_k + i\delta} + \frac{u_{kp}n_k u_{p'k}}{\varepsilon_p - \varepsilon_k + i\delta} \right) = \\ &= J^2 \sum_\beta \int \frac{d^3k}{(2\pi\hbar)^3} \left[\frac{(\sigma)_{\alpha'\rho}(\sigma\mathbf{S})_{\beta\alpha}}{\varepsilon_p - \varepsilon_k + i\delta} (1-n_k) + \frac{(\sigma\mathbf{S})_{\beta\alpha}(\sigma\mathbf{S})_{\alpha'\beta}}{\varepsilon_p - \varepsilon_k + i\delta} n_k \right] \end{aligned}$$

В последнем равенстве мы учли, что состояние с индексами $\mathbf{p}, \mathbf{k}, \mathbf{p}'$ подразумевает кроме импульса электрона также и проекцию спина α, β, α' и то, что функция распределения n_k не зависит от направления электронного спина.

В числителе обоих слагаемых стоят произведения матриц Паули и спиновых операторов примеси, которые также представляют собой следующие суммы по пространственным компонентам $i, k = x, y, z$:

$$\sum_{ik} \sigma^i \sigma^k S_i S_k \quad \text{и} \quad \sum_{ik} \sigma^i \sigma^k S_k S_i$$

где σ^i, σ^k - матрицы Паули. Поскольку S_i и S_k - операторы, то их порядок существенен и ответ для этих двух выражений будет разный:

$$\begin{aligned} \sum_{ik} \sigma^i \sigma^k S_i S_k &= S(S+1) - \sum_l \sigma^l S_l = S(S+1) - (\sigma\mathbf{S}) \\ \sum_{ik} \sigma^i \sigma^k S_k S_i &= S(S+1) + \sum_i \sigma^l S_l = S(S+1) + (\sigma\mathbf{S}) \end{aligned}$$

В результате мы получим для $t^{(2)}(\mathbf{p}', \mathbf{p})$ следующее выражение:

$$t^{(2)}(\mathbf{p}', \mathbf{p}) = J^2 S(S+1) \int \frac{1}{\varepsilon_p - \varepsilon_k + i\delta} \frac{d^3k}{(2\pi\hbar)^3} - J^2 (\sigma\mathbf{S}) \int \frac{1-2n_k}{\varepsilon_p - \varepsilon_k + i\delta} \frac{d^3k}{(2\pi\hbar)^3}$$

в котором одно слагаемое, имея характер обычного потенциального рассеяния, совсем не зависит от электронного и примесного спинов, а второе, зависящее от взаимной ориентации спина электрона и спина примеси, обладает той же обменной структурой, что и первая поправка $t^{(1)} = u_{\rho\rho'} = J(\sigma\mathbf{S})$. Подчеркнем, что второе слагаемое в отличие от первого зависит от температуры T через функцию распределения $n(\varepsilon_k) = [e^{(\varepsilon_k - \mu)/T} + 1]^{-1}$, где μ - химический потенциал, который мы ниже не отличаем от энергии Ферми ε_F в силу неравенства $T \ll \varepsilon_F$.

Запишем полный матричный элемент $t(\mathbf{p}', \mathbf{p})$ во втором борновском приближении

$$t(\mathbf{p}', \mathbf{p}) = J(\sigma\mathbf{S})(1 - Jg(\varepsilon_p)) + J^2 S(S+1)f(\varepsilon_p)$$

где функции $g(\varepsilon_p)$ и $f(\varepsilon_p)$ даются интегралами

$$g(\varepsilon_p) = \frac{1}{2} \int_{-\mu}^{\infty} \frac{\nu(\xi + \mu) \operatorname{th} \frac{\xi}{2T} d\xi}{(\varepsilon_p - \mu) - \xi + i\delta} \quad \text{и} \quad f(\varepsilon_p) = \frac{1}{2} \int_{-\mu}^{\infty} \frac{\nu(\xi + \mu) d\xi}{(\varepsilon_p - \mu) - \xi + i\delta}$$

при получении которых мы перешли от импульса к интегрированию по энергии $\varepsilon_k = k^2/2m$ и ввели переменную $\xi = \varepsilon_k - \mu$.

Далее, чтобы оценить нужное нам время столкновений $\tau_{\text{tr}}^{(2)}(p)$, мы должны найти среднее по электронным спинам от $(1/2) \sum |t(\mathbf{p}', \mathbf{p})|^2$ с точностью до членов по J не выше, чем J^3 . Поскольку, согласно условию

То, что возникли формально расходящиеся интегралы, происходит из-за пренебрежения зависимостью обменной константы J от разности импульсов $\mathbf{p} - \mathbf{p}'$. В действительности обменное взаимодействие быстро спадает на расстояниях больших, чем межатомные, или при импульсах, превышающих импульс Ферми, и предел интегрирования сверху ограничен несколькими импульсами Ферми p_F .

задачи, все ориентации спина равновероятны, то часть $t(\rho'\rho)$, содержащая обычное потенциальное рассеяние и связанная с функцией $f(\varepsilon_p)$, будет вносить вклад, пропорциональный только J^4 . Значение $\text{Re } f(\varepsilon_p)$ также не велико и может быть оценено как $\nu(\mu)(\varepsilon_p - \mu)/\mu$. В результате мы найдем с точностью до членов J^3 , что

$$(1/2) \sum_{\sigma, \sigma'} |t(p'p)|^2 = J^2 S(S+1) (1 - 2J \text{Re } g(\varepsilon_p))$$

а время столкновений определяется формулой

$$\frac{1}{\tau_{\text{tr}}^{(2)}(p)} = \frac{\pi n_i}{\hbar} \nu(\varepsilon_p) J^2 S(S+1) (1 - 2J \text{Re } g(\varepsilon_p))$$

Как мы видели ранее, для определения электросопротивления ρ существенно время столкновения электронов на поверхности Ферми, т.е. при $\varepsilon_p = \mu$, или

$$\rho^{(2)} = \frac{m}{ne^2} \frac{1}{\tau_{\text{tr}}^{(2)}(\mu)}$$

Оценим функцию $\text{Re } g(\varepsilon_p)$ при $\varepsilon_p = \mu$

$$\text{Re } g(\mu) = -\frac{1}{2} \int_{-\mu}^{\infty} \nu(\xi + \mu) \frac{\text{th } \frac{\xi}{2T}}{\xi} d\xi \sim -\frac{\nu(\mu)}{2} \int_{-\mu}^{\mu \sim \varepsilon_F} \frac{\text{th } \frac{\xi}{2T}}{\xi} d\xi$$

При $\mu \sim \varepsilon_F \gg T$ интеграл становится логарифмическим и при большом логарифме достаточно знать пределы интегрирования только по порядку величины. Таким образом, $\text{Re } g(\varepsilon = \mu) \approx \nu(\varepsilon_F) \ln(\varepsilon_F/T)$ и для времени столкновений и электросопротивления будем иметь

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau_{\text{tr}}^{(2)}(p_F)} &= \frac{\pi n_i}{\hbar} \nu(\varepsilon_F) J^2 S(S+1) \left(1 + 2J \nu(\varepsilon_F) \ln \frac{\varepsilon_F}{T}\right) \\ \rho^{(2)} &= \frac{m}{ne^2} \frac{1}{\tau_{\text{tr}}^{(2)}(p_F)} = \frac{3\pi m}{2e^2} n_i \frac{J^2 S(S+1)}{\hbar \varepsilon_F} \left(1 + 3 \frac{Jn}{\varepsilon_F} \ln \frac{\varepsilon_F}{T}\right) \end{aligned}$$

В последнем соотношении мы учли, что $\nu(\varepsilon_F) = (3/2)n/\varepsilon_F$. Из последней формулы видно, что знак температурной поправки от магнитных примесей зависит от знака обменной константы J . Если знак J - ферромагнитный, т.е. $J < 0$, то сопротивление $\rho^{(2)}$ падает с понижением температуры. При антиферромагнитном знаке обменной константы $J > 0$, наоборот, магнитная часть сопротивления растет с понижением температуры. Это приводит к появлению минимума в зависимости сопротивления от температуры. Так, если немагнитная часть

и

сопротивления обусловлена наличием немагнитных примесей и рассеянием на фононах по закону Блоха T^5 , то в целом сопротивление будет равно

$$\rho = \rho_0 + n_i a \ln(\varepsilon_F/T) + bT^5 \quad (a \sim J > 0)$$

Положение минимума сопротивления находится дифференцированием по температуре и равно

$$T_{\text{min}} = [n_i a / (5b)]^{1/5} \sim n_i^{1/5}$$

Температура T_K

$$T_K \sim \varepsilon_F e^{-\frac{1}{\Pi_{\nu}(\varepsilon_F)}}$$

при которой логарифмическая поправка становится сравнимой с единицей и необходим учет более высоких членов разложения в амплитуде рассеяния, называется температурой Кондо.

18.2.7 Problems about Mott Variable-Range Hopping Conductivity

БРМ-1

7. Внесение примесного атома донорного типа в идеальный чистый полупроводник, например, легирование кремния атомами фосфора, приводит к образованию водородоподобного связанного состояния электрона с радиусом локализации a и энергией ε . Волновая функция такого электронного состояния сосредоточена вблизи примесного атома и экспоненциально спадает при удалении от

примесного центра согласно $\psi(r) \sim \exp(-r/a)$. В силу случайного неупорядоченного расположения примесных атомов в кристаллической решетке полупроводника энергия связи электрона с примесным центром имеет, вообще говоря, также случайное значение. При достаточно малой концентрации примесных атомов $na^3 \ll 1$ перекрытие волновых функций электрона, отвечающим разным примесным центрам невелико, и электрон вовлекается в процесс переноса электрического заряда только за счет прыжков (перескоков) с одного примесного центра на другой с изменением энергии электрона, равной разности между энергиями связи на различных центрах. Подобные механизмы переноса заряда в неупорядоченных электронных системах часто называют прыжковой проводимостью. Найти с экспоненциальной точностью низкотемпературную зависимость проводимости $\sigma(T)$ при следующих предположениях: а) существенны прыжки электрона только на примесные центры с энергиями ε_λ , лежащими в достаточно малой окрестности Δ уровня Ферми μ так, что $|\mu - \varepsilon_\lambda| \leq \Delta \ll \mu$. Температура - достаточно низкая, т. е. $\Delta \gg T$, и характерные изменения энергии при перескоках существенно превосходят температуру;

б) считать, что плотность состояний в окрестности Δ уровня Ферми постоянна и равна $g(\mu)$; в) радиус локализации a не зависит от энергии ε_λ ; 2) предполагать наличие теплового равновесия за счет испускания или поглощения фононов, взаимодействие с которыми обеспечивает выполнение закона сохранения энергии при перескоках электрона с одного уровня на другой. Для упрощения считать, что фононы представлены одной акустической ветвью с частотой $\omega_k = sk$, и ограничиться только однофотонными процессами в силу достаточно низкой температуры по сравнению с максимальной энергией фононов $\hbar\omega_D$.

17

Важнейшей характеристикой в задаче является интенсивность перескоков $P_{\lambda'\lambda}$ электрона с примесного центра λ на примесный центр λ' . Вероятность перескока или прыжка зависит от расстояния между центрами $r_{\lambda\lambda'} = |\mathbf{r}_\lambda - \mathbf{r}_{\lambda'}|$ и от энергий электрона $\varepsilon_\lambda, \varepsilon_{\lambda'}$ на центрах λ и λ' . Для нахождения вероятности перескока, кроме перекрытия волновых функций электрона, мы должны также рассмотреть взаимодействие электрона с фононами, которые нужно испустить или поглотить, чтобы компенсировать разницу в начальной энергии ε_λ и конечной $\varepsilon_{\lambda'}$. Также мы должны учесть принцип Паули, согласно которому перескок электрона возможен только в незанятое состояние. Необходимость включения в рассмотрение функций распределения для фононов $N(\omega)$ и электронов $n(\varepsilon)$ приведет к появлению в интенсивности перескоков $P_{\lambda'\lambda}$ зависимости от температуры.

По аналогии с задачей об электрон-фононном сопротивлении запишем кинетическое уравнение

$$\frac{\partial n_\lambda}{\partial t} = \text{St}[n_\lambda] = \sum_{\lambda'} (P_{\lambda\lambda'} - P_{\lambda'\lambda}) = \sum_{\lambda'} [W_{\lambda\lambda'} n_{\lambda'} (1 - n_\lambda) - W_{\lambda'\lambda} n_\lambda (1 - n_{\lambda'})]$$

с интегралом столкновений $\text{St}[n_\lambda]$, определяющем скорость изменения функции распределения электронов n_λ . Здесь $W_{\lambda'\lambda}$ и $W_{\lambda\lambda'}$ - вероятности перескока с примесного центра λ на центр λ' и наоборот. Ограничиваясь борновским приближением и однофононными процессами для вероятности перескока, а также выбирая в качестве фононной функции распределения равновесную функцию Планка $N(\omega)$, мы имеем

$$W_{\lambda'\lambda} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_k w_{\lambda'\lambda}(k) [(1 + N(\omega_k)) \delta(\varepsilon_\lambda - \varepsilon_{\lambda'} - \hbar\omega_k) + N(\omega_k) \delta(\varepsilon_\lambda - \varepsilon_{\lambda'} + \hbar\omega_k)]$$

где $\mathbf{k}$ - переданный волновой вектор фонона с соответствующей частотой ω_k и $w_{\lambda'\lambda}(k)$ - квадрат матричного модуля матричного элемента электрон-фононного взаимодействия, выбранного в простейшем приближении деформационного потенциала

$$w_{\lambda'\lambda}(k) = \frac{g^2 \hbar k^2}{2\rho\omega_k} \left| \int \psi_{\lambda'}^*(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \psi_\lambda(\mathbf{r}) d^3r \right|^2$$

Здесь g - константа электрон-фононного взаимодействия, ρ - плотность вещества, а $\psi_\lambda(\mathbf{r})$ и $\psi_{\lambda'}(\mathbf{r})$ - волновые функции электрона на примесных центрах λ и λ' .

Воспользовавшись соотношением $N_{-\omega} = -(1 + N_\omega)$ для функции Планка, представим $W_{\lambda'\lambda}$ в следующем виде

$$\begin{aligned} W_{\lambda'\lambda} &= \frac{2\pi}{\hbar} \sum_k w_{\lambda'\lambda}(k) [1 + N(\varepsilon_\lambda - \varepsilon_{\lambda'})] \text{sgn}(\varepsilon_\lambda - \varepsilon_{\lambda'}) \delta(|\varepsilon_\lambda - \varepsilon_{\lambda'}| - \hbar\omega_k) = \\ &= \text{sgn}(\varepsilon_\lambda - \varepsilon_{\lambda'}) [1 + N(\varepsilon_\lambda - \varepsilon_{\lambda'})] \tilde{w}_{\lambda'\lambda} = \frac{\text{sgn}(\varepsilon_\lambda - \varepsilon_{\lambda'})}{1 - \exp[-(\varepsilon_\lambda - \varepsilon_{\lambda'})/T]} \tilde{w}_{\lambda'\lambda} \end{aligned}$$

Такое представление вероятности $W_{\lambda'\lambda}$ в виде произведения двух сомножителей, один из которых зависит от температуры, а второй

$$\tilde{w}_{\lambda'\lambda} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_k w_{\lambda'\lambda}(k) \delta(|\varepsilon_\lambda - \varepsilon_{\lambda'}| - \hbar\omega_k)$$

нет, удобно для дальнейшего анализа. Это представление, например, позволяет легко проверить баланс электронных переходов между примесными центрами и принцип детального равновесия для вероятностей прямых и обратных перескоков между центрами в условиях теплового равновесия

$$W_{\lambda'\lambda} e^{-\frac{\varepsilon_\lambda}{T}} = \frac{\text{sgn}(\varepsilon_\lambda - \varepsilon_{\lambda'})}{e^{\varepsilon_\lambda/T} - e^{\varepsilon_{\lambda'}/T}} \tilde{w}_{\lambda'\lambda} = \frac{\text{sgn}(\varepsilon_{\lambda'} - \varepsilon_\lambda)}{e^{\varepsilon_{\lambda'}/T} - e^{\varepsilon_\lambda/T}} \tilde{w}_{\lambda\lambda'} = W_{\lambda\lambda'} e^{-\frac{\varepsilon_{\lambda'}}{T}}$$

Функция $\tilde{w}_{\lambda'\lambda}$ наряду с константой электрон-фононного взаимодействия g содержит и квадрат матричного элемента с электронными волновыми функциями $\psi_\lambda(\mathbf{r})$ и $\psi_{\lambda'}(\mathbf{r})$, локализованными вблизи примесных центров в точках $\mathbf{r}_\lambda$ и $\mathbf{r}_{\lambda'}$. Соответственно, с экспоненциальной точностью, учитывая, что характерные расстояния между примесными

центрами велики по сравнению с радиусом локализации a , мы можем записать

$$\tilde{w}_{\lambda'\lambda} \sim \exp(-2r_{\lambda\lambda'}/a), \quad \text{где} \quad r_{\lambda\lambda'} = |\mathbf{r}_\lambda - \mathbf{r}_{\lambda'}|$$

Рассмотрим интенсивность $P_{\lambda'\lambda}$ перескоков с выделенного примесного центра λ на центр λ' , которую представим в виде

$$P_{\lambda'\lambda} = W_{\lambda'\lambda} n_\lambda (1 - n_{\lambda'}) = \tilde{w}_{\lambda'\lambda}(\mathbf{r}_{\lambda'}, \mathbf{r}_\lambda) \gamma(T, \varepsilon_\lambda, \varepsilon_{\lambda'})$$

где

$$\gamma(T, \varepsilon_\lambda, \varepsilon_{\lambda'}) = \frac{\text{sgn}(\varepsilon_\lambda - \varepsilon_{\lambda'})}{1 - e^{-(\varepsilon_\lambda - \varepsilon_{\lambda'})/T}} \times \frac{1}{e^{(\varepsilon_\lambda - \mu)/T} + 1} \times \frac{1}{1 + e^{-(\varepsilon_{\lambda'} - \mu)/T}}$$

Функция $\gamma(T, \varepsilon_\lambda, \varepsilon_{\lambda'})$ содержит всю температурную информацию об интенсивности перескоков. Выражение для нее можно упростить:

$$\begin{aligned} \gamma(T, \varepsilon_\lambda, \varepsilon_{\lambda'}) &= \frac{1}{2} \frac{\text{sgn}(\varepsilon_\lambda - \varepsilon_{\lambda'})}{\text{sh} \frac{\varepsilon_\lambda - \varepsilon_{\lambda'}}{T} + \text{sh} \frac{\varepsilon_\lambda - \mu}{T} - \text{sh} \frac{\varepsilon_{\lambda'} - \mu}{T}} = \\ &= \frac{1}{8} \left(\text{sh} \frac{|\varepsilon_\lambda - \varepsilon_{\lambda'}|}{2T} \text{ch} \frac{\varepsilon_\lambda - \mu}{2T} \text{ch} \frac{\varepsilon_{\lambda'} - \mu}{2T} \right)^{-1} \end{aligned}$$

Если характерные изменения энергии электрона при перескоках существенно превосходят температуру, то из выражения для $\gamma(T, \varepsilon_\lambda, \varepsilon_{\lambda'})$ при $|\varepsilon_\lambda - \mu| \gg T, |\varepsilon_\lambda - \varepsilon_{\lambda'}| \gg T$ можно приближенно оставить лишь ведущую, экспоненциальную зависимость

$$\gamma \sim \exp\left(-\frac{E_{\lambda\lambda'}}{T}\right), \quad \text{где} \quad E_{\lambda\lambda'} = \frac{|\varepsilon_\lambda - \varepsilon_{\lambda'}| + |\varepsilon_\lambda - \mu| + |\varepsilon_{\lambda'} - \mu|}{2}.$$

С другой стороны, если разброс уровней энергии незначителен, то температурная зависимость интенсивности перескоков может быть и неэкспоненциальной. Так, при $|\varepsilon_\lambda - \mu| \ll T, |\varepsilon_\lambda - \varepsilon_{\lambda'}| \ll T$, имеем $\gamma \sim T/|\varepsilon_\lambda - \varepsilon_{\lambda'}|$. В конечном итоге, это может приводить к линейному температурному поведению прыжковой проводимости.

Выделяя основную экспоненциальную зависимость, мы перепишем выражение для интенсивности перескоков электрона в виде

$$P_{\lambda'\lambda} = P_{\lambda'\lambda}^{(0)} \exp(-\mathcal{R}_{\lambda\lambda'}), \quad \text{где} \quad \mathcal{R}_{\lambda\lambda'} = \frac{2r_{\lambda\lambda'}}{a} + \frac{E_{\lambda\lambda'}}{T}$$

и предэкспоненциальный множитель $P_{\lambda'\lambda}^{(0)}$ слабо зависит от энергий и координат примесных центров. Таким образом, перескоки электрона в состоянии с большей энергией $E_{\lambda,\lambda'}$ сильно подавлены.

Проводимость представляет собой результат множества перескоков по примесным центрам с вероятностью, определяемой случайной величиной досягаемости $\mathcal{R}$. В силу экспоненциальной зависимости от $\mathcal{R}$ наиболее благоприятны перескоки с минимальным значением досягаемости $\mathcal{R}$.

Полное число электронных состояний в 1 см^3 в энергетической полосе $\mu \pm E/2$ вблизи химического потенциала μ будет равно $N(E) = g(\mu)E$. Среднее расстояние $\bar{r}$ между примесными центрами оценим согласно формуле ¹⁾

$$\frac{4\pi}{3} \bar{r}^3 = \frac{1}{N(E)} = \frac{1}{g(\mu)E} \quad \text{или} \quad \bar{r} = \left(\frac{3}{4\pi g(\mu)E} \right)^{1/3}.$$

Соответственно, для степени досягаемости $\mathcal{R}$ будем иметь

$$\mathcal{R} = \frac{2}{a} \left(\frac{3}{4\pi g(\mu)E} \right)^{1/3} + \frac{E}{T}$$

Определим ширину энергетической полосы, которая дает наибольшую интенсивность перескоков, из условия минимальности $\mathcal{R} = \mathcal{R}(E)$

$$\frac{d\mathcal{R}}{dE} = -\frac{2}{3a} \left(\frac{3}{4\pi g(\mu)} \right)^{1/3} \frac{1}{E^{4/3}} + \frac{1}{T} = 0$$

Это уравнение дает оптимальное значение $E = \bar{E}$, т. е. седловую точку, и характерную температуру T_0

$$\bar{E} = \frac{1}{4} T_0^{1/4} T^{3/4}, \quad \text{где} \quad T_0 = \frac{512}{9\pi} \frac{1}{a^3 g(\mu)}$$

^

Далее легко находим $\mathcal{R}_{\text{opt}} = (T_0/T)^{1/4}$ и соответствующую характерную длину перескока электрона

$$\bar{r} = \frac{3}{8} a \left(\frac{T_0}{T} \right)^{1/4}$$

Для корректности экспоненциального приближения подразумевается, что температура T мала по сравнению с характерной температурой T_0 .

Вероятность перескока электрона на малое расстояние уменьшается за счет гиббсовского множителя $\exp(E_{\lambda, \lambda'}/T)$, а на большое расстояние за счет резкого уменьшения перекрытия волновых функций. Это приводит к тому, что эффективная длина перескока не остается постоянной, а существенно зависит от температуры. Поскольку $N(\bar{E})4\pi\bar{r}^3/3 = 1$ и не зависит от температуры, то при любой температуре всегда найдется хотя бы один подходящий центр для перескока на него электрона. Сопротивление такого легированного примесями полупроводника $\rho(T)$ определится главным образом экспоненциальной зависимостью

$$\rho(T) \sim \exp\left(\frac{T_0}{T}\right)^{1/4}$$

Такое температурное поведение сопротивления называется законом Мотта или проводимостью с переменной длиной прыжка. Как правило, такое поведение электросопротивления легированного полупроводника характерно для области температур от десятка милликельвин до нескольких кельвин.

БРМ-1

8. В предположениях предыдущей задачи о прыжковом механизме проводимости определить показатель степени p в законе Мотта

$$\rho(T) \sim \exp(T_0/T)^p$$

для сопротивления тонкой пленки (двумерного) легированного полупроводника.

18.

Обобщение прыжковой проводимости на двумерный случай сводится к следующему. Полное число электронных состояний, приходящееся на 1 см^2 пленки в полосе $\mu \pm E/2$ вблизи химического потенциала μ , будет также равно $N(E) = g(\mu)E$. Среднее расстояние $\bar{r}$ между примесными центрами оценим как

$$\pi\bar{r}^2 = \frac{1}{N(E)} = \frac{1}{g(\mu)E} \quad \text{или} \quad \bar{r} = \left(\frac{1}{\pi g(\mu)E} \right)^{1/2}.$$

Для величины досягаемости $\mathcal{R}(E)$ будем иметь

$$\mathcal{R}(E) = \frac{2}{a} \left(\frac{1}{\pi g(\mu)E} \right)^{1/2} + \frac{E}{T}$$

¹¹⁾ Строгая оценка среднего расстояния $\bar{r}$ между примесями, которые хаотически распределены в пространстве размерности d с концентрацией n , находится с помощью функции плотности вероятности $P(r)$ того, что ближайшая примесь находится на расстоянии r от выбранной примеси. Из уравнения

$$P(r) = \left(1 - \int_0^r P(r') dr' \right) s_d r^{d-1} n \quad \text{имеем} \quad P(r) = n s_d r^{d-1} e^{-n v_d d^d},$$

где s_d и $v_d = s_d/d$ - площадь и объем единичной сферы в пространстве размерности d , т. е. $s_3 = 4\pi$ или $s_2 = 2\pi$. Среднее расстояние

$$\bar{r} = \int_0^\infty r P(r) dr = \left(\frac{1}{n v_d} \right)^{1/d} \Gamma\left(\frac{d+1}{d}\right)$$

содержит дополнительный множитель в виде гамма-функции, который здесь и ниже для нас несущественен.

Ширина энергетической полосы E , которая дает наибольшую интенсивность перескоков, находится из условия

$$\frac{d\mathcal{R}}{dE} = -\frac{1}{a} \left(\frac{1}{\pi g(\mu)} \right)^{1/2} \frac{1}{E^{3/2}} + \frac{1}{T} = 0$$

Это уравнение дает оптимальное значение $E = \bar{E}$ и характерную температуру T_0

$$\bar{E} = \frac{1}{3} T_0^{1/3} T^{2/3}, \quad \text{где} \quad T_0 = \frac{27}{\pi a^2 g(\mu)}$$

Далее легко находим $\mathcal{R}_{\text{opt}} = (T_0/T)^{1/3}$ и соответствующую характерную длину перескока электрона

$$\bar{r} = \frac{a}{3} \left(\frac{T_0}{T} \right)^{1/3}$$

Экспоненциальная зависимость сопротивления двумерной пленки легированного примесями полупроводника $\rho(T)$ определится минимальным значением $\mathcal{R}(E)$, т. е.

$$\rho(T) \sim \exp \left(\frac{T_0}{T} \right)^{1/3}$$

и показатель степени в законе Мотта равен $p = 1/3$.

БРМ-1

9. В предыдущих двух задачах при рассмотрении прыжкового механизма проводимости в слабо легированном полупроводнике предполагалось, что электроны, локализованные на примесных центрах, не взаимодействуют между собой и плотность электронных состояний $g(\varepsilon)$ постоянна в окрестности уровня Ферми μ . Наличие кулоновского взаимодействия между электронами на разных примесных центрах нарушает это свойство так, что плотность состояний $g(\varepsilon)$ обращается в нуль в точке $\varepsilon = \mu$. Это явление $g(\mu) = 0$, названное кулоновской щелью, существенно влияет на вид температурной зависимости сопротивления легированного полупроводника.

Предполагая, что плотность электронных состояний вблизи уровня Ферми следует закону

$$g(\varepsilon) = g_0 \left(\frac{|\varepsilon - \mu|}{\varepsilon_0} \right)^\beta,$$

где $\beta = 2$ в пространстве $d = 3$ и $\beta = 1$ в пространстве $d = 2$, определить показатель степени p в законе Мотта

$$\rho(T) \sim \exp(T_0/T)^p$$

для электросопротивления слабо легированного полупроводника при низких температурах.

19.

Поясним, как может измениться плотность состояний $g(\varepsilon)$ вблизи уровня Ферми μ при $T = 0$ под влиянием взаимодействия между электронами с разных примесных центров. Рассмотрим два электронных состояния, чьи энергии ε_λ и $\varepsilon_{\lambda'}$ лежат в некотором произвольном интервале энергий Δ вблизи уровня Ферми, т.е. $|\varepsilon_\lambda - \mu| \leq \Delta$ и $|\varepsilon_{\lambda'} - \mu| \leq \Delta$. Пусть одно из состояний занято электроном и, следовательно, $\varepsilon_\lambda < \mu$, а второе свободно: $\varepsilon_{\lambda'} > \mu$, причем расстояние между примесными центрами равно $r_{\lambda\lambda'} = |\mathbf{r}_\lambda - \mathbf{r}_{\lambda'}|$. Если оба центра были бы заняты электронами, то их суммарная энергия увеличилась бы на энергию кулоновского взаимодействия $U_{\lambda\lambda'} = e^2/\kappa r_{\lambda\lambda'}$, где κ - диэлектрическая проницаемость полупроводника. (Использование диэлектрической проницаемости может быть оправдано тем, что расстояние между примесными центрами велико по сравнению с межатомным расстоянием, и отсутствием экранировки заряда центра в силу малой концентрации электронов.)

Перенесем мысленно электрон с центра λ на бесконечность. Тогда уровень энергии центра λ' понизится за счет отсутствия кулоновского отталкивания на величину $U_{\lambda\lambda'}$ и станет равной

$$\tilde{\varepsilon}_{\lambda'} = \varepsilon_{\lambda'} - U_{\lambda\lambda'} = \varepsilon_{\lambda'} - e^2/\kappa r_{\lambda\lambda'}$$

Эта энергия $\tilde{\varepsilon}_{\lambda'}$ должна быть больше энергии ε_λ . В противном случае предположение о том, что примесный центр λ заполнен, а центр λ' - свободный, будет неверным. Следовательно, должно выполняться неравенство

$$\left(\varepsilon_{\lambda'} - \frac{e^2}{\kappa r_{\lambda\lambda'}} \right) - \varepsilon_\lambda > 0 \quad \text{при} \quad \varepsilon_{\lambda'} - \varepsilon_\lambda \leq 2\Delta$$

Отсюда следует, что для произвольной величины Δ верно следующее

$$2\Delta \geq \varepsilon_{\lambda'} - \varepsilon_{\lambda} > \frac{e^2}{2r_{\lambda\lambda'}} \text{ или } r_{\lambda\lambda'} \geq \frac{e^2}{2\kappa\Delta}.$$

Таким образом, расстояние $r_{\lambda\lambda'}$ между двумя состояниями, лежащими по разные стороны от уровня Ферми не может быть меньше, чем $e^2/(2\kappa\Delta)$.

С другой стороны, число электронных состояний $N(\Delta = |\varepsilon - \mu|)$, энергии которых различаются не более, чем на 2Δ , примерно равно концентрации примесных центров $N(\Delta) \sim (v_d r_{\lambda\lambda'}^d)^{-1}$ и будет ограничено сверху неравенством

$$N(|\varepsilon - \mu|) \leq \frac{1}{v_d} \left(\frac{2\kappa}{e^2} \right)^d \Delta^d = \frac{1}{v_d} \left(\frac{2\kappa}{e^2} \right)^d |\varepsilon - \mu|^d$$

где $d = 2$ или $d = 3$ в зависимости от размерности пространства и $v_2 = \pi$ или $v_3 = 4\pi/3$. Отсюда также следует подобное ограничение сверху на плотность состояний $g(\varepsilon) = dN(\varepsilon)/d\varepsilon$

$$g(\varepsilon) \leq \frac{d}{v_d} \left(\frac{2\kappa}{e^2} \right)^d |\varepsilon - \mu|^{(d-1)}$$

Неравенство означает, что плотность состояний $g(\varepsilon)$ обращается в нуль при $\varepsilon = \mu$ не медленнее, чем по закону $|\varepsilon - \mu|^{d-1}$.

Если $g(\varepsilon)$ спадает по закону $\sim |\varepsilon - \mu|^\beta$ и зануляется быстрее, чем $|\varepsilon - \mu|^{d-1}$, т. е. $\beta > (d-1)$, то тогда $N(\Delta = |\varepsilon - \mu|) \sim \Delta^{\beta+1}$ и среднее расстояние $\bar{r}$ между примесными центрами с разницей в уровнях энергии в пределах Δ можно оценить согласно

$$1/\bar{r}^d \sim N(\Delta) \sim \Delta^{\beta+1} \quad \text{или} \quad \bar{r} \sim \Delta^{-\frac{\beta+1}{d}}.$$

Энергия взаимодействия U между электронами на этих расстояниях будет порядка

$$U(\Delta) \sim \frac{e^2}{\kappa\bar{r}} \sim \Delta^{\frac{\beta+1}{d}}$$

При $\beta > (d-1)$ в пределе энергий достаточно близких к уровню Ферми, когда $\Delta \rightarrow 0$, мы обязательно будем иметь $U(\Delta) \ll \Delta$. Поскольку энергия взаимодействия $U(\Delta)$ в этом случае оказывается много меньше характерной разницы Δ в энергиях состояний вблизи уровня Ферми, то мы можем ожидать, что такое слабое взаимодействие не существенно и не будет приводить к еще более сильному уменьшению плотности состояний $g(\varepsilon)$ вблизи уровня Ферми. В результате мы должны иметь $\beta = (d-1)$ в соответствии с оценкой сверху. Поведение $g(\varepsilon) \sim |\varepsilon - \mu|^{d-1}$ сохранится пока расстояние $e^2/(\kappa|\varepsilon - \mu|)$ существенно превосходит среднее расстояние между примесными центрами.

Итак, при наличии кулоновской щели, когда

$$g(\varepsilon) = g_0 (|\varepsilon - \mu|/\varepsilon_0)^\beta = \gamma |\varepsilon - \mu|^\beta, \quad \gamma = g_0 \varepsilon_0^{-\beta}$$

число состояний в окрестности $E = |\varepsilon - \mu|$ вокруг уровня Ферми будет примерно равно

$$N(E) \sim \frac{\gamma}{\beta+1} E^{\beta+1} = \frac{\gamma}{\beta+1} |\varepsilon - \mu|^{\beta+1}$$

Дальнейшее рассмотрение полностью аналогично ходу рассуждения в двух предыдущих задачах. Среднее расстояние $\bar{r}$ между примесными центрами оцениваем согласно

$$v_d \bar{r}^d = \frac{1}{N(E)} = \frac{\beta+1}{\gamma} \left(\frac{1}{E} \right)^{\beta+1} \quad \text{или} \quad \bar{r} = \left(\frac{\beta+1}{\gamma v_d} \right)^{\frac{1}{d}} \left(\frac{1}{E} \right)^{\frac{\beta+1}{d}},$$

где $v_d = 4\pi/3$ для $d = 3$ и $v_d = \pi$ для $d = 2$. Соответственно, для досягаемости $\mathcal{R}$ имеем

$$\mathcal{R}(E) = \frac{2\bar{r}(E)}{a} + \frac{E}{T} = \frac{2}{a} \left(\frac{\beta+1}{\gamma v_d} \right)^{\frac{1}{d}} \left(\frac{1}{E} \right)^{\frac{\beta+1}{d}} + \frac{E}{T}$$

где a - радиус локализации электрона на примесном центре и T температура.

Наибольшая вероятность перескока электрона с одного центра на другой определяется минимальным значением $\mathcal{R}(E)$. Условие минимальности

$$\frac{d\mathcal{R}}{dE} = -\frac{2}{a} \frac{\beta+1}{d} \left(\frac{\beta+1}{\gamma v_d} \right)^{\frac{1}{d}} \left(\frac{1}{E} \right)^{\frac{\beta+1+d}{d}} + \frac{1}{T} = 0$$

Уравнение дает оптимальное переверальное значение $\bar{E}$ и характерную температуру T_0

$$\bar{E} = \frac{\beta + 1}{\beta + d + 1} T_0^{\frac{\beta+1}{\beta+1+d}} T^{\frac{d}{\beta+1+d}}$$

где $T_0 = \varepsilon_0 \left(\frac{2^d(\beta + d + 1)^{\beta+d+1}}{(\beta + 1)d^d} \right)^{\frac{1}{\beta+1}} (g_0 v_d a^d \varepsilon_0)^{-1/(\beta+1)}$

Оптимальное значение досягаемости будет тогда равно

$$\mathcal{R}_{\text{opt}} = \left(\frac{T}{T_0} \right)^p, \quad \text{где} \quad p = \frac{\beta + 1}{\beta + 1 + d}$$

С учетом, что $\beta = d - 1$, получаем $p = 1/2$ независимо от размерности пространства d .

Электрическое сопротивление $p(T)$ слабо легированного полупроводника при наличии кулоновской щели в области достаточно низких $T \lesssim T_0$ температур будет определяться главным образом экспоненциальной зависимостью

$$\rho(T) \sim \exp \left(\frac{T_0}{T} \right)^{1/2}$$

которая представляет собой закон Шкловского-Эфроса и одинакова как для объемного $d = 3$ полупроводника так и для тонкой $d = 2$ пленки. Средняя длина прыжка электрона здесь меняется с температурой согласно $\bar{r} \sim T^{-1/2}$.

18.2.8 Problems about Kinetics of Phonons in Dielectrics

БРМ-20.

В твердом диэлектрике тепловые колебания атомов кристаллической решетки около положения равновесия могут быть описаны как набор колебательных квантов - фононов, которые в совокупности образуют разреженный газ элементарных возбуждений. В кристалле, в котором элементарная ячейка состоит из ν атомов, полный спектр колебаний насчитывает 3ν ветвей или, соответственно, 3ν типов фононов. Весь спектр подразделяется на три акустические ветви, из которых одна продольная и две поперечные, и на остальные $3(\nu - 1)$ оптические ветви колебаний.

Определить коэффициент теплопроводности κ в диэлектрике, воспользовавшись кинетическим уравнением для функции распределения фононов $N_k(t, r)$ в приближении времени релаксации τ . Для упрощения считать, что диэлектрик обладает кубической симметрией и фононы представлены только одной акустической ветвью с дисперсией $\omega = \omega(k)$.

20 solution

Запишем кинетическое уравнение для функции распределения фононов $N_k(t, r)$

$$\frac{\partial N_k}{\partial t} + \frac{\partial \omega_k}{\partial k} \frac{\partial N_k}{\partial r} = \text{St} [N_k]$$

где $\partial \omega_k / \partial k = \mathbf{u}_k$ - скорость фонона. Равновесное распределение фононов или распределение Планка

$$N_{0k} = \left(e^{\hbar \omega_k / T} - 1 \right)^{-1}$$

должно тождественно обращать в нуль интеграл столкновений $\text{St} [N_0] = 0$.

В отличие от обычных частиц при столкновениях возбуждений в фононном газе, вообще говоря, не сохраняется ни число фононов, ни их суммарный квазиимпульс. Из законов сохранения выполняется лишь закон сохранения энергии, означая

$$\int \omega_k \text{St} [N_k] \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} = 0$$

Соответственно, мы найдем для кинетического уравнения

$$\int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \hbar \omega_k \frac{\partial N_k}{\partial t} + \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \hbar \omega_k \mathbf{u}_k \frac{\partial N_k}{\partial r} = \frac{\partial E}{\partial t} + \text{div} \mathbf{Q} = 0$$

где E - плотность тепловой энергии диэлектрика и $\mathbf{Q}$ - плотность потока энергин.

Ищем функцию распределения фононов в виде $N_k = N_{0k} + \delta N_{0k}$, где δN_{0k} - малая поправка. Как обычно, предполагаем, что температура медленно меняется вдоль диэлектрика. В линейном приближении кинетическое уравнение примет вид

$$u_k \frac{\partial N_{0k}}{\partial r} = (u_k \nabla T) \frac{\partial N_{0k}}{\partial T} = \text{St} [N_k] \approx -\frac{\delta N_k}{\tau_k}$$

Отсюда найдем

$$\delta N_k = -\tau_k (u_k \nabla T) \frac{\partial N_{0k}}{\partial T} = -\tau_k (u_k \nabla T) N_{0k} (1 + N_{0k}) \frac{\hbar \omega_k}{T^2}$$

Поток энергии, совпадающий здесь с диссипативным потоком тепла, равен

$$\begin{aligned} \mathbf{Q} &= \int \hbar \omega_k u_k N_k \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} = \int \hbar \omega_k u_k \delta N_k \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} = \\ &= - \int u_k (u_k \nabla T) \frac{(\hbar \omega_k)^2}{T^2} N_{0k} (1 + N_{0k}) \tau_k \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \end{aligned}$$

Обращение потока энергии в нуль при $N_k = N_{0k}$ формально следует из свойства фононного спектра $\omega_k = \omega_{-k}$. Для изотропного спектра фононов после усреднения по пространственному углу в пространстве вектора $\mathbf{k}$ и, пользуясь определением коэффициента теплопроводности из соотношения $\mathbf{Q} = -\kappa \nabla T$, мы окончательно получим

$$\kappa = \frac{1}{3} \int u_k^2 \frac{(\hbar \omega_k)^2}{T^2} N_{0k} (1 + N_{0k}) \tau_k \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} = \frac{1}{3} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} u_k^2 \tau_k \frac{(\hbar \omega_k / 2T)^2}{\text{sh}^2(\hbar \omega_k / 2T)}$$

Для простого звукового спектра $\omega_k = uk$, где u - скорость звука, последнему соотношению легко придать форму газокINETической формулы

$$\kappa = \frac{1}{3} C_{ph}(T) u^2 \tau_{ph}(T)$$

где $C_{ph}(T)$ - фононная теплоемкость, а $\tau_{ph}(T)$ - эффективное время свободного пробега фононов, определенные соотношениями

$$\begin{aligned} C_{ph}(T) &= \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{(\hbar \omega_k / 2T)^2}{\text{sh}^2(\hbar \omega_k / 2T)} = \int d\omega g(\omega) \frac{(\hbar \omega / 2T)^2}{\text{sh}^2(\hbar \omega / 2T)}, \\ \tau_{ph}(T) &= \frac{\int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \tau(\omega_k) \frac{(\hbar \omega_k / 2T)^2}{\text{sh}^2(\hbar \omega_k / 2T)}}{\int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{(\hbar \omega_k / 2T)^2}{\text{sh}^2(\hbar \omega_k / 2T)}} = \frac{\int d\omega g(\omega) \tau(\omega) \frac{(\hbar \omega / 2T)^2}{\text{sh}^2(\hbar \omega / 2T)}}{\int d\omega g(\omega) \frac{(\hbar \omega / 2T)^2}{\text{sh}^2(\hbar \omega / 2T)}}. \end{aligned}$$

Здесь $g(\omega)$ - плотность фононных состояний, отнесенная к единице объема.

Тепловое сопротивление диэлектрика возникает за счет процессов, при которых квазиимпульс фононов не сохраняется в результате процессов переброса, наличия дефектов пространственной структуры или рассеяния фононов на границе диэлектрика. Количественное определение времени релаксации τ сложная задача. Дело в том, что взаимодействие фононов возникает при учете ангармонических членов третьего и более высоких порядков по смещениям ионов кристаллической решетки относительно их положения равновесия. Интеграл столкновений должен включать в себя как нормальные процессы, сохраняющие суммарный квазиимпульс фононов, так и процессы с перебросом, в которых суммарный квазиимпульс фононов при их слиянии или распаде равен импульсу обратной кристаллической решетки.

Ниже мы приведем лишь описание температурного поведения времени релаксации τ и коэффициента теплопроводности κ . При высоких температурах по сравнению с температурой Дебая Θ_D частоты фононов $\omega \lesssim \Theta_D / \hbar \ll T / \hbar$ и фононные длины свободного пробега для нормальных процессов l_n и процессов с перебросом l_u одного порядка. Время свободного пробега фононов или время релаксации оценивается как

$$\tau \sim \frac{M a^2 \theta_D}{\hbar T}$$

где M - масса атома и a - межатомное расстояние. Соответственно, с учетом того, что при $T \gg \Theta_D$ теплоемкость $C(T)$ постоянна, коэффициент теплопроводности подчиняется поведению $\kappa \sim 1/T$.

При низких $T \ll \Theta_D$ температурах тепловое сопротивление в идеальном монокристалле неограниченных размеров возникает только за счет фононных столкновений, сопровождающихся процессами переброса. Эффективное время свободного пробега l_u растет экспоненциально с понижением температуры как $l_u \sim \exp(\gamma \Theta_D / T)$, где γ - число порядка единицы. По существу величина $\gamma \Theta_D / \hbar$ - минимальное значение частоты фонона, при которой возможно осуществить процесс переброса. Это дает основную зависимость для поведения коэффициента теплопроводности $\kappa(T) \sim \exp(\gamma \Theta_D / T)$.

В диэлектрике конечных размеров, например, в форме бесконечного цилиндра радиуса R с понижением температуры основную роль начинают играть столкновения с границей, когда длины пробега как для нормальных процессов $l_n(T)$ так и для процессов с перебросом $l_u(T)$ оказываются порядка радиуса цилиндра R . В силу существенно разной температурной зависимости длин пробега $l_n(T)$, которая остается степенной

$$l_n(T) \sim l_n(\Theta_D) (\theta_D / T)^5$$

и экспоненциальной $l_u(T) \sim \exp(\gamma\Theta_D/T)$, при низких $T \ll \Theta_D$ температурах возникают, две температуры T_n и T_u , когда $l_n(T_n) \sim R$ и $l_u(T_u) \sim R$, и при этом в области температур $T_n < T < T_u$ имеет место неравенство $l_n \ll R \ll l_u$. Пока $l_n \ll R$, фонон испытывает множество нормальных столкновений прежде, чем достигнет границы диэлектрика, и его движение между двумя последовательными столкновениями с границей имеет диффузионный характер с эффективной длиной пробега $l_{\text{eff}} \sim R^2/l_n$. С учетом зависимости $C(T) \sim T^3$ для теплоемкости это дает

$$\kappa \sim C(T)ul_{\text{eff}} \sim \frac{C(T)uR^2}{l_n(T)} \sim T^8 R^2 \quad (T_n < T < T_u)$$

И, наконец, в области совсем низких $T < T_n$ температур, когда все возможные длины свободного пробега превышают размеры диэлектрика, роль эффективной длины свободного пробега играет размер диэлектрика R и оценка для коэффициента теплопроводности равна

$$\kappa(T) \sim C(T)uR \sim T^3 R \quad (T < T_n)$$

В целом температурная зависимость коэффициента теплопроводности имеет колоколообразный вид (рис. 3.9) с максимумом, положение которого зависит от размеров диэлектрика.

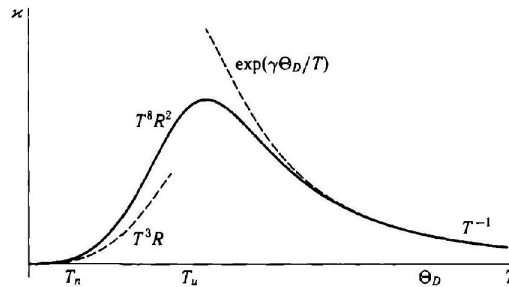


Рис. 3.9. Примерный ход температурной зависимости коэффициента теплопроводности κ в диэлектрике радиуса R . В области самых низких $T < T_n$ температур $\kappa \sim T^3 R$, затем $\kappa \sim T^8 R^2$ между температурами T_n и T_u . Далее происходит спад $\kappa(T)$ либо по экспоненциальному закону, либо по степенному закону

В заключение обсудим влияние точечных дефектов кристаллической решетки на теплопроводность диэлектрика. Наличие дефектов, например, примесных атомов, вакансий или междузельных атомов, приводит к рассеянию на них фононов и препятствует потоку тепла. Про-

А

стейший точечный дефект можно представить как малую область радиусом r порядка межатомного размера a , свойства которой отличаются от свойств окружающей среды, например, плотностью, массой атома. Рассеяние фононов или звуковых волн на таком дефекте соответствует условиям рэлеевского рассеяния, когда длина волны фонона λ существенно превышает размер дефекта r . Для рассеяния сферой радиуса r , плотность которой отличается от плотности ρ окружающего вещества на величину $\delta\rho$, сечение рассеяния звуковой волны оценивается как

$$\sigma(k) \sim 4\pi r^2 (kr)^4 (\delta\rho/\rho)^2$$

Для этого типа рассеяния характерна его упругость, т. е. частота фонона сохраняется, а также пропорциональность сечения рассеяния $\sigma(k)$ четвертой степени волнового вектора фонона k . Рассеяние фонона на примеси приводит к изменению его квазиимпульса. Время релаксации или время свободного пробега τ_k можно оценить, воспользовавшись связью между длиной свободного пробега l_k и сечением рассеяния $\sigma(k)$

$$l_k = 1/(n_i \sigma(k))$$

где n_i - число рассеивающих центров в единице объема, т.е. концентрация примесей. Время свободного пробега τ_k найдем из соотношения $l_k = u\tau_k$, где u - скорость фонона, т. е. скорость звука. Так как характерная энергия $\hbar\omega$ тепловых фононов порядка температуры T и $\omega = uk$, то легко видеть, что

$$1/\tau_k \propto n_i \omega^4 \propto n_i T^4$$

Ниже температуры Дебая теплоемкость $C(T)$ пропорциональна T^3 и мы приходим к следующей температурной зависимости примесного вклада в коэффициент теплопроводности $\kappa_i \sim n_i/T$. Таким образом, наличие примесей будет подавлять экспоненциальный рост коэффициента теплопроводности и вплоть до температур, при которых становится существенной роль рассеяния фононов на границах, теплопроводность будет вести себя по закону $\kappa \sim 1/T$.

18.2.9 Problems about Kinetics of Normal and Superfluid Liquids

БРМ-21.

В рамках феноменологического подхода вывести уравнения гидродинамики несверхтекучей изотропной жидкости, воспользовавшись термодинамическими тождествами и уравнениями сохранения

массы, импульса, энергии и роста энтропии. Найти диссипативную функцию R и получить уравнение движения вязкой жидкости (уравнение Навье-Стокса).

21

Энергия единицы объема жидкости $E = E(S, \rho, j)$ есть функция следующих термодинамических переменных: энтропии S , плотности жидкости ρ и плотности потока массы (импульса единицы объема) j . Дифференциал энергии

$$dE(S, \rho, j) = TdS + \mu d\rho + \mathbf{v} \cdot d\mathbf{j}$$

определяет сопряженные термодинамические переменные: температуру T , химический потенциал единицы массы μ и скорость жидкости $\mathbf{v}$. Сопряженный термодинамический потенциал $A(T, \mu, \mathbf{v})$ и его дифференциал равны

$$\begin{aligned} A(T, \mu, \mathbf{v}) &= E - TS - \mu\rho - \mathbf{v} \cdot \mathbf{j} \\ dA(T, \mu, \mathbf{v}) &= -SdT - \rho d\mu - \mathbf{j} \cdot d\mathbf{v} \end{aligned}$$

Величину $P = -A = -E + TS + \mu\rho + \mathbf{v} \cdot \mathbf{j}$ следует назвать давлением, если мы следуем определению давления $P = -\partial(EV)/\partial V$ как производной со знаком минус от полной энергии EV жидкости объемом V при постоянных полной массе ρV , полной энтропии SV и полного импульса jV .

Запишем законы сохранения массы, импульса, энергии и роста энтропии в дифференциальной форме:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{j} &= 0, & \frac{\partial j_i}{\partial t} + \frac{\partial \Pi_{ik}}{\partial x_k} &= 0 \\ \frac{\partial E}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{Q} &= 0, & \frac{\partial S}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{F} &= \frac{R}{T} \end{aligned}$$

где плотность потока массы (плотность импульса) $\mathbf{j}$, плотность потока энергии $\mathbf{Q}$, плотность потока энтропии $\mathbf{F}$, тензор плотности потока импульса Π_{ik} и диссипативная функция R подлежат определению.

Далее сложим все четыре уравнения, предварительно умножая каждое из них на соответствующий множитель T , ρ или $\mathbf{v}$, и учтем, что

$$\frac{\partial E}{\partial t} = T \frac{\partial S}{\partial t} + \mu \frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial \mathbf{j}}{\partial t}$$

В результате после тождественных преобразований мы найдем

$$\begin{aligned} R + \operatorname{div} \mathbf{Q} &= \frac{\partial}{\partial x_i} [F_i + \mu j_i + v_k (\Pi_{ik} + A\delta_{ik})] - \\ &\quad - (F_i - Sv_i) \frac{\partial T}{\partial x_i} - (j_i - \rho v_i) \frac{\partial \mu}{\partial x_i} - (\Pi_{ik} + A\delta_{ik} - j_k v_i) \frac{\partial v_k}{\partial x_i} \end{aligned}$$

Если предположить, что диссипация энергии отсутствует, т. е. $R \equiv 0$, то величины потоков $\mathbf{Q}$, $\mathbf{F}$, $\mathbf{j}$ и Π_{ik} должны быть только функциями термодинамических переменных, например, T , ρ , $\mathbf{j}$, и не зависеть от их производных по координатам x_i и времени t . Кроме того, правая часть уравнения должна представлять выражение в виде полной производной (дивергенции). Таким образом, для бездиссипативных потоков необходимо положить

$$\begin{aligned} j_{0i} &= \rho v_i, & F_{0i} &= Sv_i \\ \Pi_{0ik} &= -A\delta_{ik} + j_{0k} v_i = P\delta_{ik} + \rho v_i v_k \\ Q_{0i} &= TF_{0i} + \mu j_{0i} + v_k (\Pi_{0ik} + A\delta_{ik}) = TF_{0i} + \mu j_{0i} + (\mathbf{v} \cdot \mathbf{j}_0) v_i \end{aligned}$$

Для дальнейших приложений перепишем последнее равенство в векторном виде

$$\mathbf{Q}_0 = T\mathbf{F}_0 + \mu \dot{\mathbf{j}}_0 + (\mathbf{v} \cdot \dot{\mathbf{j}}_0) \mathbf{v}$$

Член $P\delta_{ik}$ в тензоре плотности потока импульса отражает тот факт, что давление в покоящейся жидкости - изотропно, т. е. передается по всем направлениям одинаково (закон Паскаля).

Наличие неравновесности и диссипации энергии в жидкости приводит к появлению дополнительных членов в потоках энергии, энтропии и тензора плотности потока импульса, которые уже явно зависят от производных по координатам. Если по-прежнему мы будем понимать под ρ плотность жидкости, а под $\mathbf{j}$ - импульс единицы объема жидкости, то для плотности потока массы можно сохранить прежний вид

$$\mathbf{j} = \dot{\mathbf{j}}_0 = \rho \mathbf{v}$$

Для остальных потоков необходимо добавить диссипативные члены

$$\begin{aligned} \Pi_{ik} &= \Pi_{0ik} + \tau_{ik} \\ F_i &= F_{0i} + f_i = F_{0i} + q_i/T \end{aligned}$$

Соответственно, тогда мы должны принять

$$Q_i = Q_{0i} + T f_i + v_k \tau_{ki} \equiv Q_{0i} + q_i + v_k \tau_{ki}$$

где вектор q представляет собой диссипативный поток тепла, а тензор τ_{ik} - диссипативную часть тензора плотности потока импульса. Тензор с обратным знаком $\sigma'_{ik} = -\tau_{ik}$ называется тензор вязких напряжений.

Диссипативная функция R дается выражением

$$R = -f_i \frac{\partial T}{\partial x_i} - \tau_{ik} \frac{\partial v_k}{\partial x_i} = -\frac{\mathbf{q} \cdot \nabla T}{T} - \tau_{ik} \frac{\partial v_k}{\partial x_i} \geq 0$$

и должна быть положительно определенной. В условиях слабой неравновесности пространственные производные невелики и в первом приближении для диссипативных потоков можно ограничиться производными первого порядка. Для диссипативного потока тепла это дает

$$\mathbf{q} = -\kappa \nabla T$$

где κ - коэффициент теплопроводности.

Диссипативный тензор потока τ_{ik} как тензор второго ранга может зависеть от двух независимых тензоров $\partial v_i / \partial x_k$ и δ_{ik} . Скалярный множитель перед δ_{ik} , составленный из производных скорости, пропорционален $\operatorname{div} \mathbf{v}$. Если частицы жидкости не имеют вращательных степеней

свободы и не обладают внутренним моментом импульса, то тензор потока импульса должен быть симметричным $\Pi_{ik} = \Pi_{ki}$. Действительно, в такой жидкости при равномерном вращении жидкости как целого с угловой скоростью Ω жидкость остается в состоянии термодинамического равновесия и диссипативные процессы должны исчезать. Так как скорость жидкости при таком вращении равна $\mathbf{v} = [\Omega \times \mathbf{r}]$, то диссипативная часть тензора τ_{ik} не должна содержать ненулевую антисимметричную комбинацию $(\partial v_i / \partial x_k - \partial v_k / \partial x_i)$, которая в этом случае была бы пропорциональна Ω .

Общий вид симметричного тензора 2-го ранга дается выражением

$$\tau_{ik} = -\eta \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_k} + \frac{\partial v_k}{\partial x_i} \right) - \zeta' \delta_{ik} \frac{\partial v_l}{\partial x_l}$$

Обычно здесь выделяют бесследовую часть, представляющую собой чисто сдвиговую компоненту тензора вязких напряжений, и часть, связанную с изменением объема жидкости

$$\tau_{ik} = -\eta \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_k} + \frac{\partial v_k}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ik} \frac{\partial v_l}{\partial x_l} \right) - \zeta \delta_{ik} \frac{\partial v_l}{\partial x_l}$$

Коэффициент η называют динамической или сдвиговой вязкостью, а второй коэффициент ζ - объемной или второй вязкостью. Диссипативная функция будет равна

$$R = \frac{\eta}{2} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_k} + \frac{\partial v_k}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ik} \frac{\partial v_l}{\partial x_l} \right)^2 + \zeta (\operatorname{div} \mathbf{v})^2 + \kappa \frac{(\nabla T)^2}{T}$$

Требование положительной определенности диссипативной функции приводит к тому, что коэффициенты вязкости и теплопроводности должны быть положительными $\eta > 0, \zeta > 0$ и $\kappa > 0$.

Подстановка тензора Π_{ik} в уравнение сохранения импульса с последующим применением уравнения сохранения массы приводит к уравнению Навье-Стокса

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} \right) = -\nabla P + \eta \nabla^2 \mathbf{v} + \left(\zeta + \frac{\eta}{3} \right) \nabla (\operatorname{div} \mathbf{v})$$

18.2.10 Problems about Sound Vibrations and Dissipation

БРМ-22.

Пользуясь результатами предыдущей задачи для диссипативной функции R , найти коэффициент поглощения звука $\alpha(\omega)$ с частотой ω в несверхтекучей изотропной жидкости, если известны коэффициенты сдвиговой и объемной вязкости η, ζ , а также коэффициент теплопроводности κ .

22

В звуковой волне скорость жидкости $\mathbf{v}$ предполагается малой по сравнению со скоростью звука u , а термодинамические величины близкими к равновесным значениям. Поэтому в первом приближении можно рассмотреть линеаризованные гидродинамические уравнения без включения диссипативных процессов:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho \operatorname{div} \mathbf{v} = 0 \quad \text{и} \quad \rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = -\nabla P$$

Исключая скорость жидкости $\mathbf{v}$ из этих двух уравнений, получим уравнение, связывающее плотность ρ и давление P

$$\frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2} = \nabla^2 P$$

Так как мы полностью пренебрегли диссипативными эффектами и диссипативная функция R равна нулю, движение жидкости становится адиабатическим и происходит с сохранением полной энтропии. Адиабатичность звуковых колебаний предполагает малость частоты колебаний ω по параметру $\omega\tau \ll 1$, где τ - характерное время релаксации. Связывая колебания давления δP с колебаниями плотности $\delta\rho$ при условии постоянства энтропии

$$\delta P = (\partial P / \partial \rho)_s \delta \rho$$

мы получим волновое уравнение

$$\nabla^2 P = \frac{1}{u^2} \frac{\partial P^2}{\partial t^2}, \quad u = \left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_s^{1/2}$$

которое определяет адиабатическую скорость звука u и закон дисперсии $\omega = uk$.

Диссипативные процессы вязкости и теплопроводности в жидкости ведут к поглощению звуковых волн. Потери энергии звуковых волн $E_{\text{зв}}$ приводят в конечном итоге к нагреванию жидкости и росту ее внутренней энергии $E = E(S)$, которую мы рассмотрим как функцию энтропии S . Дифференцируя по времени соотношение $\delta E(S) = -\delta E_{\text{зв}}$, получаем

$$\dot{E}_{\text{зв}} = -\dot{E}(S) = -\frac{\partial E}{\partial S} \dot{S} = -T \dot{S} = -\int R dV$$

где R - скорость диссипации энергии в единице объема, равная

$$R = \frac{\eta}{2} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_k} + \frac{\partial v_k}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ik} \frac{\partial v_l}{\partial x_l} \right)^2 + \zeta (\text{div } v)^2 + \kappa \frac{(\nabla T)^2}{T}$$

и интегрирование ведется по всему объему жидкости.

Пусть плоская звуковая волна распространяется вдоль оси x и скорость жидкости равна

$$v_x = v_0 \cos(kx - \omega t), \quad v_y = v_z = 0$$

Два члена с вязкостью с учетом $\frac{\partial v_i}{\partial x_k} \frac{\partial v_k}{\partial x_i} = (\partial v_x / \partial x)^2$ дают

$$\int \left(\frac{4\eta}{3} + \zeta \right) \left(\frac{\partial v_x}{\partial x} \right)^2 dV = \left(\frac{4\eta}{3} + \zeta \right) k^2 v_0^2 \int \sin^2(kx - \omega t) dV$$

После усреднения по времени мы получим на единицу объема

$$\left(\frac{4\eta}{3} + \zeta \right) \frac{k^2 v_0^2}{2}$$

Для вычисления вклада от теплопроводности мы свяжем колебания температуры δT с колебаниями давления или звуковым давлением δP

$$\delta T = \left(\frac{\partial T}{\partial P} \right)_s \delta P = \frac{T}{\rho c_P V} \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_P \delta P$$

где c_p - удельная теплоемкость или теплоемкость единицы массы жидкости при постоянном давлении. Отношение звукового давления δP к скорости жидкости v , т.е. акустический импеданс, равно $\delta P/v = \rho\omega/k = \rho u$. В результате мы найдем

$$\delta T = u \frac{\alpha_V T}{c_P} v$$

где α_V - коэффициент теплового расширения

$$\alpha_V = \frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_P = -\frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_P$$

Итак, вклад от теплопроводности в диссипативную функцию будет равен

$$\int \kappa \frac{(\nabla T)^2}{T} dV = \frac{\kappa}{T} u^2 \frac{\alpha_V^2 T^2}{c_P^2} k^2 v_0^2 \int \sin^2(kx - \omega t) dV$$

После аналогичного усреднения по времени мы найдем

$$\kappa u^2 \frac{\alpha_V^2 T}{c_P^2} \frac{k^2 v_0^2}{2} = \kappa \left(\frac{1}{c_V} - \frac{1}{c_P} \right) \frac{k^2 v_0^2}{2}$$

для диссипативного вклада на единицу объема жидкости. Для вывода последнего равенства мы воспользовались известным термодинамическим соотношением для разности удельных теплоемкостей при постоянном давлении и при постоянном объеме

$$c_P - c_V = T\alpha_V^2 \left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_T = T\alpha_V^2 \frac{c_V}{c_P} \left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_s = T\alpha_V^2 \frac{c_V}{c_P} u^2$$

Таким образом, суммарная плотность диссипативной функции будет равна

$$R = \left[\frac{4}{3}\eta + \zeta + \kappa \left(\frac{1}{c_V} - \frac{1}{c_P} \right) \right] \frac{k^2 v_0^2}{2}, \quad k = \frac{\omega}{u}$$

Чтобы найти коэффициент поглощения звука $\alpha(\omega)$, нам надо выразить $k^2 v_0^2$ через энергию звуковой волны. Плотность полной энергии жидкости складывается из ее кинетической и внутренней энергий и равна

$$E = \frac{\rho v^2}{2} + \rho \varepsilon(s, \rho)$$

где ε - энергия, приходящаяся на единицу массы. Ниже мы должны учесть, что распространение звука - адиабатический процесс $s = \text{const}$ и масса жидкости также остается неизменной, т.е. $\int \rho dV = \text{const}$. Нам достаточно вычислить изменение полной энергии $E = E + \delta E$ с точностью до членов второго порядка включительно по скорости v и отклонениям по плотности $\delta \rho$. В результате имеем

$$\delta E \approx \frac{\rho v^2}{2} + \frac{\partial(\rho \varepsilon)_s}{\partial \rho} \delta \rho + \frac{1}{2} \frac{\partial^2(\rho \varepsilon)_s}{\partial \rho^2} (\delta \rho)^2 + \dots$$

Вторую производную, используя определение удельной энтальпии $w = \varepsilon + P/\rho$, преобразуем следующим образом:

$$\frac{\partial^2(\rho \varepsilon)_s}{\partial \rho^2} = \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\varepsilon + \frac{P}{\rho} \right) = \left(\frac{\partial w}{\partial \rho} \right)_s = \frac{\partial w}{\partial P} \left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_s = \frac{u^2}{\rho}$$

Воспользовавшись тем, что $\int \delta \rho dV = 0$, и соотношением $\delta \rho = \delta P/u^2 = \rho v/u$, мы найдем полную энергию звуковой волны, равную

$$\int \delta E dV = \int \left[\frac{\rho v^2}{2} + \frac{u^2}{2\rho} (\delta \rho)^2 \right] dV = \int \rho v^2 dV = \rho v_0^2 \int \sin^2(kx - \omega t) dV$$

Средняя энергия звуковой волны, приходящаяся на единицу объема, тогда равна

$$E_{3B} = \rho v_0^2 / 2$$

Запишем уравнение для скорости потери энергии звуковой волны

$$\begin{aligned} \dot{E}_{3B} &= -R = - \left[\frac{4}{3}\eta + \zeta + \kappa \left(\frac{1}{c_V} - \frac{1}{c_P} \right) \right] \frac{k^2 v_0^2}{2} = \\ &= - \left[\frac{4}{3}\eta + \zeta + \kappa \left(\frac{1}{c_V} - \frac{1}{c_P} \right) \right] \frac{k^2}{\rho} E_{3B} = -2\alpha u E_{3B} \end{aligned}$$

Легко видеть, что интенсивность звуковой волны будет падать по закону $e^{-2\alpha u t}$, а амплитуда - как $e^{-\alpha u t}$. С учетом того, что пройденное волной расстояние связано со временем простым соотношением $x = ut$, амплитуда волны будет уменьшаться с пройденным расстоянием x согласно $e^{-\alpha x}$. Таким образом, выражая коэффициент поглощения звука α в зависимости от частоты и подставляя $k = \omega/u$, мы имеем следующий ответ:

$$\alpha(\omega) = \left[\frac{4}{3}\eta + \zeta + \kappa \left(\frac{1}{c_V} - \frac{1}{c_P} \right) \right] \frac{\omega^2}{2\rho u^3}$$

Поглощение звука мало пока $\omega/u \ll \alpha(\omega)$, что всегда верно в пределе $\omega \rightarrow 0$. Если считать все кинетические коэффициенты величинами одного порядка $\eta \sim \zeta \sim \rho u^2 \tau$ и $\kappa \sim \rho u^2 \tau$, где τ - некоторое характерное время свободного пробега частиц, то получим условие малости затухания звука в виде $\omega \tau \ll 1$.

БРМ-23. Двухскоростная гидродинамика сверхтекучей жидкости

В рамках феноменологического подхода вывести уравнения двухскоростной гидродинамики сверхтекучей изотропной жидкости без включения в рассмотрение диссипативных эффектов. Применить для вывода законы сохранения массы, импульса, энергии, энтропии и преобразование Галилея.

Воспользоваться следующими представлениями о сверхтекучей жидкости. В сверхтекучей жидкости одновременно возможны два независимых течения. Первое - сверхтекучее течение со скоростью v_s и плотностью сверхтекучей компоненты ρ_s . Второе - нормальное течение со скоростью v_n и плотностью нормальной компоненты ρ_n . Плотности сверхтекучей и нормальной компонент в сумме составляют полную плотность жидкости $\rho = \rho_n + \rho_s$. Кроме того, сверхтекучее течение потенциально $\text{rot } v_s = 0$.

23.

С феноменологической точки зрения существование двух независимых течений в жидкости вместо одного требует увеличения числа переменных, описывающих состояние жидкости. Термодинамические переменные, свойственные обычной нормальной жидкости, мы дополним сверхтекучей скоростью v_s и сопряженной ей потоком массы сверхтекучей компоненты j_s . Таким образом, плотность энергии сверхтекучей жидкости $E = E(S, \rho, j, v_s)$ будет зависеть от четырех величин: энтропии S , плотности ρ , плотности потока массы или импульса единицы объема j и сверхтекучей скорости v_s .

Запишем в первую очередь законы сохранения массы, импульса, энергии и энтропии в дифференциальной форме

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div } j &= 0, & \frac{\partial j_i}{\partial t} + \frac{\partial \Pi_{ik}}{\partial x_k} &= 0 \\ \frac{\partial E}{\partial t} + \text{div } \mathbf{Q} &= 0, & \frac{\partial S}{\partial t} + \text{div } \mathbf{F} &= 0 \end{aligned}$$

Исключение из рассмотрения диссипативных эффектов подразумевает сохранение энтропии.

В двухжидкостной гидродинамике эти четыре уравнения должны быть дополнены еще одним уравнением, которое описывает динамику сверхтекучей скорости v_s . По аналогии с обычной жидкостью это должно быть уравнение на производную по времени от сверхтекучей скорости v_s . Чтобы удовлетворить условию потенциальности $\text{rot } v_s = 0$, запишем уравнение в виде

$$\frac{\partial v_s}{\partial t} + \nabla \psi = 0$$

Здесь $\psi = \psi(S, \rho, j, v_s)$ - скалярная функция, подлежащая определению наряду с потоками энергии $\mathbf{Q}$, энтропии $\mathbf{F}$, массы j и тензором плотности потока импульса Π_{ik} .

Чтобы найти выражения для потоков, в качестве первого шага удобно выбрать систему отсчета K_0 , в которой сверхтекучая компонента покоится $v_s = 0$, а движется только нормальная компонента с относительной скоростью $w = v_n - v_s$. Поскольку в этой системе отсчета сверхтекучая компонента покоится и не участвует в движении жидкости, мы можем ожидать, что свойства жидкости в системе K_0 будут

такие же как у обычной нормальной жидкости. Это позволит определить соответствующие потоки $j_0, \mathbf{Q}_0, \mathbf{F}_0$ и Π_{0ik} .

Определить вид потоков в лабораторной системе отсчета K , в которой сверхтекучая компонента движется со скоростью v_s , можно будет с помощью преобразования Галилея, которое связывает соответствующие физические величины в двух разных системах отсчета.

Для плотности энергии $E_0 = E_0(S, \rho, j_0) = E(S, \rho, j, v_s = 0)$ в системе отсчета K_0 мы запишем обычный дифференциал

$$dE_0 = TdS + \mu d\rho + w \cdot dj_0$$

где температура T , химический потенциал μ и относительная скорость w определены как термодинамические переменные, сопряженные переменным S, ρ и j_0 . Вектор потока j_0 , как вектор в изотропной жидкости, может быть направлен только вдоль вектора относительной скорости w :

$$\dot{j}_0 = \rho_n w$$

Здесь скаляр $\rho_n = \rho_n(S, \rho, w^2)$ определяет величину плотности нормальной компоненты и, вообще говоря, зависит от энтропии, полной плотности жидкости ρ и квадрата относительной скорости w .

Соответственно, выражения для остальных потоков в системе отсчета K_0 даются следующими выражениями:

$$\begin{aligned} \Pi_{0ik} &= P\delta_{ik} + \rho_n w_i w_k \\ \mathbf{Q}_0 &= T\mathbf{F}_0 + \mu j_0 + (w \cdot \dot{j}_0) w_1 \quad \text{и} \quad \mathbf{F}_0 = S w. \end{aligned}$$

Давление P и его дифференциал dP выражаются через сопряженный термодинамический потенциал $A = E_0 - TS - \mu\rho - w \cdot j$ согласно

$$\begin{aligned} P &= -A = -E_0 + TS + \mu\rho + w \cdot j_0 \\ dP &= -dA = SdT + \rho d\mu + j_0 \cdot dw \end{aligned}$$

Интересующие нас величины в системах отсчета K и K_0 связаны галилеевскими соотношениями

$$\begin{aligned} E &= E_0 + \dot{j}_0 \cdot v_s + \frac{\rho v_s^2}{2} \\ j &= j_0 + \rho v_s, \quad F = F_0 + S v_s \\ \Pi_{ik} &= \Pi_{0ik} + \rho v_{si} v_{sk} + v_{si} j_{0k} + j_{0i} v_{sk} \\ Q_i &= Q_{0i} + \left(E_0 + j_0 \cdot v_s + \frac{\rho v_s^2}{2} \right) v_{si} + \frac{v_s^2}{2} j_{0i} + \Pi_{0ik} v_{sk} \end{aligned}$$

Подставляя значения потоков в системе отсчета K_0 , мы найдем после алгебраических преобразований величины потоков в лабораторной системе отсчета K , выраженные через скорости нормальной и сверхтекучей компонент

$$\begin{aligned} j &= \rho_n v_n + (\rho - \rho_n) v_s = \rho_n v_n + \rho_s v_s \\ F &= S w + S v_s = S v_n \\ \Pi_{ik} &= P \delta_{ik} + \rho_n v_{ni} v_{nk} + (\rho - \rho_n) v_{si} v_{sk} = P \delta_{ik} + \rho_n v_{ni} v_{nk} + \rho_s v_{si} v_{sk} \\ Q &= \left(\mu + \frac{v_s^2}{2} \right) j + T S v_n + \rho_n v_n (v_n - v_s) \cdot v_n \end{aligned}$$

Как мы видим, в плотность потока массы j и тензора плотности потока импульса Π_{ik} входят члены, связанные как с течением нормальной компоненты так и с течением сверхтекучей компоненты. Подчеркнем, что это свойство не относится к переносу энтропии. Действительно, из соотношения для потока энтропии $F = S v_n$ видно, что поток энтропии связан только с течением нормальной компоненты и энтропия переносится конвективным образом вместе с нормальной компонентой. Сверхтекучая компонента в переносе энтропии не участвует. Отметим также, что при равенстве нормальной и сверхтекучей скоростей $v_n = v_s = v$ выражения для потоков напоминают выражения соответствующих величин в несверхтекучей жидкости.

Теперь нам осталось определить скалярную функцию ψ , градиент которой определяет временную производную сверхтекучей скорости. Это можно сделать, например, используя закон сохранения энергии и приведенные выше выражения для плотности энергии и потоков в лабораторной системе отсчета K . Вычисление после значительных сокращений дает простой ответ:

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \operatorname{div} Q = -\rho_s (v_n - v_s) \cdot \left(\frac{\partial v_s}{\partial t} + \nabla \left(\mu + \frac{v_s^2}{2} \right) \right) + \rho v_n \cdot (v_s \times \operatorname{rot} v_s) = 0.$$

Требование равенства нулю правой части уравнения с условием потенциальности $\operatorname{rot} v_s = 0$ приводит к определению скалярной функции $\psi = \mu + v_s^2/2$ и уравнения движения для скорости сверхтекучей компоненты

$$\frac{\partial v_s}{\partial t} + \nabla \left(\mu + \frac{v_s^2}{2} \right) = 0$$

Выпишем остальные гидродинамические уравнения сверхтекучей жидкости

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} j &= 0, \quad j = \rho_n v_n + \rho_s v_s \\ \frac{\partial j}{\partial t} + v_s \operatorname{div} j + (j \cdot \nabla) v_s + j_0 \operatorname{div} v_n + (v_n \cdot \nabla) j_0 &= -\nabla P \\ \frac{\partial S}{\partial t} + \operatorname{div} (S v_n) &= 0, \quad j_0 = \rho_n (v_n - v_s) \end{aligned}$$

^

Уравнения - сложные, поскольку входящие в них скалярные величины μ, ρ, S, P являются также функциями относительной скорости $v_n - v_s$ и, которые не могут быть найдены в рамках феноменологического подхода и, тем самым, требуют привлечения микроскопической теории.

БРМ-24.

В сверхтекучей жидкости возможно существование двух типов звуковых колебаний: первый и второй звуки. Пользуясь найденными в предыдущей задаче гидродинамическими уравнениями сверхтекучей жидкости, найти скорости первого и второго звуков. Для простоты пренебречь отличием коэффициента теплового расширения α_V от нуля и, который при достаточно низких температурах, как правило, пренебрежимо мал.

24.

Звуковая волна представляет собой малое возмущение равновесного состояния, Поэтому скорости нормальной и сверхтекучей компонент v_n и v_s предполагаются малыми по сравнению со скоростью

звука, а термодинамические величины близкими к равновесным. Запишем линеаризованные уравнения гидродинамики сверхтекучей жидкости

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} j = 0, \quad \frac{\partial i}{\partial t} = -\nabla P; \quad j = \rho_n v_n + \rho_s v_s \quad \text{и} \quad \rho = \rho_n + \rho_s \\ \frac{\partial(\sigma \rho)}{\partial t} + \sigma \rho \operatorname{div} v_n = 0, \quad \frac{\partial v_s}{\partial t} + \nabla \mu = 0; \quad \sigma = \frac{S}{\rho} \quad \text{и} \quad \frac{\nabla P}{\rho} = \sigma \nabla T + \nabla \mu \end{aligned}$$

Здесь для удобства в дальнейшем мы вместо плотности энтропии S ввели удельную энтропию σ согласно $\sigma = S/\rho$.

Исключая из первых двух уравнений плотность импульса j , получим такое же уравнение для связи колебаний плотности ρ и давления P как и для несверхтекучей жидкости

$$\frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2} = \nabla^2 P$$

Пользуясь термодинамическим соотношением $d\mu = -\sigma dT + dP/\rho$, из второго и четвертого уравнений имеем

$$\rho_n \frac{\partial}{\partial t} (v_n - v_s) = -\sigma \rho \nabla T$$

А применение первого и третьего уравнений дает уравнение

$$\rho_s \operatorname{div} (v_n - v_s) = -\frac{\rho}{\sigma} \frac{\partial \sigma}{\partial t}$$

Исключая из последних двух уравнений разность $(v_n - v_s)$, получим уравнение, связывающее колебания энтропии σ и температуры T

$$\frac{\partial^2 \sigma}{\partial t^2} = \frac{\sigma^2 \rho_s}{\rho_n} \nabla^2 T$$

Введем отклонения давления δP и температуры δT от их равновесных значений. Отклонения плотности $\delta \rho$ и энтропии $\delta \sigma$ от их равновесных значений можно записать в виде

$$\delta \rho = \frac{\partial \rho}{\partial P} \delta P + \frac{\partial \rho}{\partial T} \delta T \quad \text{и} \quad \delta \sigma = \frac{\partial \sigma}{\partial P} \delta P + \frac{\partial \sigma}{\partial T} \delta T$$

Подстановка в уравнения для колебаний даст систему из двух уравнений

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial P} \frac{\partial^2 \delta P}{\partial t^2} - \nabla^2 \delta P = -\frac{\partial \rho}{\partial T} \frac{\partial^2 \delta T}{\partial t^2} \\ \frac{\partial \sigma}{\partial T} \frac{\partial^2 \delta T}{\partial t^2} - \frac{\sigma^2 \rho_s}{\rho_n} \nabla^2 \delta T = \frac{\partial \sigma}{\partial P} \frac{\partial^2 \delta P}{\partial t^2} \end{aligned}$$

Как обычно, ищем решение уравнений в виде плоской волны, распространяющейся вдоль оси x с частотой ω и скоростью u , т. е. колебания давления $\delta P(x, t)$ и температуры $\delta T(x, t)$ пропорциональны общему множителю $\exp[-i\omega(t - x/u)]$. Тогда

$$\begin{aligned} \left(u^2 \frac{\partial \rho}{\partial P} - 1 \right) \delta P + u^2 \frac{\partial \rho}{\partial T} \delta T = 0 \\ u^2 \frac{\partial \sigma}{\partial P} \delta P + \left(u^2 \frac{\partial \sigma}{\partial T} - \frac{\sigma^2 \rho_s}{\rho_n} \right) \delta T = 0 \end{aligned}$$

Равенство нулю определителя этой системы дает уравнение для определения скорости звука u

$$u^4 \left(\frac{\partial \rho}{\partial P} \frac{\partial \sigma}{\partial T} - \frac{\partial \rho}{\partial T} \frac{\partial \sigma}{\partial P} \right) - u^2 \left(\frac{\partial \sigma}{\partial T} + \frac{\sigma^2 \rho_s}{\rho_n} \frac{\partial \rho}{\partial P} \right) + \frac{\sigma^2 \rho_s}{\rho_n} = 0$$

Этому уравнению можно придать более наглядный вид, воспользовавшись термодинамическим соотношением между теплоемкостями при постоянном объеме (постоянной плотности) $c_V = T(\partial \sigma / \partial T)_V$ и постоянном давлении $c_P = T(\partial \sigma / \partial T)_P$

$$c_V = T \left(\frac{\partial \sigma}{\partial T} \right)_P - T \frac{\left(\frac{\partial \sigma}{\partial P} \right)_T \left(\frac{\partial \rho}{\partial P} \right)_P}{\left(\frac{\partial \rho}{\partial P} \right)_T}$$

В результате мы получим

$$\left(\frac{u^2}{u_1^2} - 1 \right) \left(\frac{u^2}{u_2^2} - 1 \right) = 1 - \frac{c_V}{c_P}$$

Λ

где мы ввели обозначения

$$\frac{1}{u_1^2} = \frac{c_V}{c_P} \left(\frac{\partial \rho}{\partial P} \right)_T = \left(\frac{\partial \rho}{\partial P} \right)_S$$

$$\frac{1}{u_2^2} = \frac{c_V}{c_P} \frac{\rho_n (\partial \sigma / \partial T)_P}{\sigma^2 \rho_s} = \frac{\rho_n (\partial \sigma / \partial T)_V}{\sigma^2 \rho_s}$$

Полученное биквадратное уравнение определяет две возможные скорости звука. Разница $c_P - c_V$ в теплоемкостях пропорциональна квадрату коэффициента теплового расширения $\alpha_V = -\rho^{-1}(\partial \rho / \partial T)_P$. При низких температурах в сверхтекучем ⁴He величина α_V мала и можно не делать различия между теплоемкостями c_V и c_P , считая их практически равными друг другу за исключением близкой окрестности λ-точки сверхтекучего перехода. Это обстоятельство упрощает решение уравнения и его корни равны

$$u_1 = \sqrt{\left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_\sigma} \quad \text{и} \quad u_2 = \sqrt{\frac{\sigma^2 \rho_s}{\rho_n (\partial \sigma / \partial T)_\rho}}$$

Первый корень u_1 определяет скорость первого звука или обычного звука, который существует и выше температуры сверхтекучего перехода. С такой скоростью распространяются колебания давления или плотности. При пренебрежении коэффициентом теплового расширения $\alpha_V = 0$ в волне первого звука скорости нормальной и сверхтекучей компонент совпадают $\mathbf{v}_n = \mathbf{v}_s$, т.е. нормальная и сверхтекучая компоненты колеблются синфазно. В этом смысле первый звук аналогичен обычному звуку в несверхтекучей жидкости.

Второй корень u_2 определяет скорость второго звука. С этой скоростью распространяются незатухающие колебания температуры, существование которых специфично для сверхтекучих жидкостей. В точке сверхтекучего перехода скорость второго звука обращается в ноль вместе со сверхтекучей плотностью. В пределе низких $T \rightarrow 0$ температур, когда элементарные возбуждения в ⁴He представляют собой фононы, $u_2 = u_1 / \sqrt{3}$. В приближении $\alpha_V = 0$ давление и плотность в волне второго звука не колеблются и полный поток массы отсутствует $\mathbf{j} = \rho_n \mathbf{v}_n + \rho_s \mathbf{v}_s = 0$, т. е. сверхтекучая и нормальная компоненты колеблются противофазно и взаимно компенсируют потоки масс обеих компонент.

Ненулевой коэффициент теплового расширения приводит к эффекту зацепления первого и второго звуков. В меру $\alpha_V \neq 0$ наряду с колебаниями давления и плотности в первом звуке возникают также колебания температуры и строго говоря, уже $\mathbf{v}_n \neq \mathbf{v}_s$, а во втором звуке в дополнении к колебаниям температуры появляются колебания давления и плотности и полный поток массы во втором звуке уже не обращается строго в ноль, т. е. $\mathbf{j} \neq 0$.

18.2.11 Problems about Collisionless Plasma 1

БРМ-25 Пространственно-частотная дисперсия диэлектрической проницаемости бесстолкновительной плазме

Найти пространственно-частотную дисперсию диэлектрической проницаемости $\varepsilon_{\alpha\beta}(\omega, k)$ в бесстолкновительной изотропной плазме, когда столкновения между частицами плазмы не играют существенной роли. Выделить из диэлектрической проницаемости $\varepsilon_{\alpha\beta}(\omega, k)$ продольную и поперечную компоненты.

При решении воспользоваться кинетическими уравнениями и уравнениями Максвелла. В первом приближении полностью пренебречь движением положительных ионов благодаря сильному неравенству в соотношении между массами иона и электрона $M \gg m$.

БРМ-25

Пусть $n(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ - функция распределения частиц, т. е. $dN = n(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) d^3r d\mathbf{p}$ - число частиц, координаты и импульсы которых в момент времени t лежат в интервалах $\mathbf{r} \div \mathbf{r} + d\mathbf{r}$ и $\mathbf{p} \div \mathbf{p} + d\mathbf{p}$. С учетом двух проекций спина $d\Gamma_p = 2d^3p / (2\pi\hbar)^3$. Запишем кинетическое уравнение

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial n}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{F} \frac{\partial n}{\partial \mathbf{p}} = \text{St}[n]$$

Здесь $\mathbf{v}$ - скорость частицы и $\mathbf{F} = q(\mathbf{E} + [\mathbf{v} \times \mathbf{B}] / c)$ - сила Лоренца, действующая на частицу с зарядом q . Рассматривая плазму как бесстолкновительную, мы должны пренебречь столкновительным членом $\text{St}[n]$, который при малых отклонениях $\delta n = n - n_0$ от равновесной функции распределения $n_0(\mathbf{p})$, примерно равен $\delta n / \tau$, где τ - характерное время столкновений. Возможность такого приближения возникает, если

$$\frac{\partial \delta n}{\partial t} \sim \omega \delta n \gg \frac{\delta n}{\tau} \quad \text{или} \quad v \frac{\partial \delta n}{\partial \mathbf{r}} \sim v \frac{\delta n}{L} \gg \frac{\delta n}{\tau}.$$

Здесь ω - характерная частота и L - характерная длина, на которых во времени и в пространстве меняются электрическое $\mathbf{E}$ и магнитное $\mathbf{B}$ поля. Таким образом, необходимо реализовать высокочастотную ситуацию $\omega\tau \gg 1$ или большую длину пробега частиц плазмы $l = v\tau \gg L$.

Итак, в бесстолкновительной плазме мы имеем следующие кинетические уравнения для функции распределения электронов с зарядом $(-e)$ и функции распределения ионов с зарядом Ze

$$\begin{aligned}\frac{\partial n}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial n}{\partial \mathbf{r}} - e \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} [\mathbf{v} \times \mathbf{B}] \right) \frac{\partial n}{\partial \mathbf{p}} &= 0 \\ \frac{\partial n_i}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial n_i}{\partial \mathbf{r}} + Ze \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} [\mathbf{v} \times \mathbf{B}] \right) \frac{\partial n_i}{\partial \mathbf{p}} &= 0\end{aligned}$$

Плотность заряда $\rho(\mathbf{r}, t)$ и плотность тока $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$ выразим через функции распределения

$$\rho = e \int (Zn_i - n) d\Gamma_{\mathbf{p}} \quad \text{и} \quad \mathbf{j} = e \int \mathbf{v} (Zn_i - n) d\Gamma_{\mathbf{p}}.$$

Чтобы получить замкнутую систему уравнений, мы должны включить в рассмотрение уравнения Максвелла, определяющие эволюцию электрического и магнитного поля под действием электрических зарядов и токов

$$\begin{aligned}\operatorname{div} \mathbf{E} &= 4\pi\rho, \quad \operatorname{div} \mathbf{B} = 0 \\ \operatorname{rot} \mathbf{E} &= -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \quad \operatorname{rot} \mathbf{B} = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j} + \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}\end{aligned}$$

Все вместе уравнения выше составляют самосогласованную замкнутую систему уравнений Власова для определения функций распределения и полей $\mathbf{E}$ и $\mathbf{B}$.

Так как в нашем приближении мы исключили движение ионов, то ионная функция распределения остается равновесной $n_i = n_{i0}$. Электронную функцию представим в виде $n = n_0 + \delta n$. В силу электронейтральности и отсутствия электрических токов в равновесии имеем $e \int (Zn_{i0} - n_0) d^3p = 0$ и $e \int \mathbf{v} (Zn_{i0} - n_0) d^3p = 0$. Тогда

$$\rho = -e \int \delta n d\Gamma_{\mathbf{p}} \quad \text{и} \quad \mathbf{j} = -e \int \mathbf{v} \delta n d\Gamma_{\mathbf{p}}.$$

Рассмотрим малые отклонения от равновесия $\mathbf{E}_0 = \mathbf{B}_0 = 0$. В линейном приближении по всем отклонениям от равновесных значений мы найдем

$$\frac{\partial \delta n}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial \delta n}{\partial \mathbf{r}} - e \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} [\mathbf{v} \times \mathbf{B}] \right) \frac{\partial n_0}{\partial \mathbf{p}} = 0$$

Поскольку $\partial n_0(\varepsilon_p) / \partial p = v \partial n_0 / \partial \varepsilon$, член с магнитным полем полностью выпадает и тогда

$$\frac{\partial \delta n}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial \delta n}{\partial \mathbf{r}} = e(\mathbf{v} \mathbf{E}) \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon}$$

Если электрическое поле содержит одну гармонику:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_{\mathbf{k}, \omega} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r} - i\omega t)$$

то в силу линейности уравнения и $\delta n(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = \delta n_{\mathbf{k}, \omega}(\mathbf{p}) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r} - i\omega t)$. Соответственно, мы получим

$$(\omega - kv) \delta n_{\mathbf{k}, \omega}(\mathbf{p}) = ie(\mathbf{v} \mathbf{E}_{\mathbf{k}, \omega}) \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon}$$

При решении этого уравнения происходит деление на нуль и возникает особая точка в виде простого полюса. В этой связи сделаем следующее отступление. Уравнение $xy(x) = 1$, вообще говоря, имеет целый ряд решений в силу тождества $x\delta(x) = 0$:

$$y(x) = \mathcal{P} \frac{1}{x} + b\delta(x)$$

где $\mathcal{P}(1/x)$ - главное значение интеграла от $1/x$ и b - произвольное число. Соответственно, уравнение на $\delta n_{\mathbf{k}, \omega}$ также имеет не единственное решение. Для выбора решения, имеющего физический смысл, обратим внимание, что возмущение функции распределения $\delta n_{\mathbf{k}, \omega}$ электрическим полем $\mathbf{E}_{\mathbf{k}, \omega}$ представляет собой запаздывающий отклик на внешнее воздействие. Тогда, согласно физическим принципам, отклик $\delta n_{\mathbf{k}, \omega}$ должен быть аналитической функцией частоты в верхней полуплоскости комплексной переменной ω и, следовательно, полюсная особенность $\delta n_{\mathbf{k}, \omega}$ может находиться только в нижней полуплоскости комплексной переменной ω . Этому условию удовлетворяет решение

$$\delta n_{\mathbf{k}, \omega}(\mathbf{p}) = \frac{ie(\mathbf{v} \mathbf{E}_{\mathbf{k}, \omega})}{\omega - \mathbf{k}v + i\delta} \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} = ie(\mathbf{v} \mathbf{E}_{\mathbf{k}, \omega}) \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} \left(\mathcal{P} \frac{1}{\omega - \mathbf{k}v} - i\pi\delta(\omega - \mathbf{k}v) \right)$$

с полюсом в точке $\omega = \mathbf{k}v - i\delta$ в нижней полуплоскости комплексной переменной ω . Последнее равенство соответствует формуле Сохоцкого

$$\frac{1}{x + i\delta} = \mathcal{P} \frac{1}{x} - i\pi\delta(x)$$

Поляризацию электронной компоненты $\mathbf{P}_{\mathbf{k},\omega}$ проще найти с помощью соотношения $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \partial \mathbf{P}(\mathbf{r}, t) / \partial t$ между током и поляризацией или для фурье-компонент $\mathbf{j}_{\mathbf{k},\omega} = -i\omega \mathbf{P}_{\mathbf{k},\omega}$. Таким образом,

$$\omega \mathbf{P}_{\mathbf{k},\omega} = e^2 \int \mathbf{v} (\mathbf{v} \mathbf{E}_{\mathbf{k},\omega}) \frac{\partial n_0 / \partial \varepsilon}{\omega - \mathbf{k} \mathbf{v} + i\delta} d\Gamma_{\mathbf{p}}$$

Переписывая в компонентах, найдем восприимчивость $\chi_{\alpha\beta}(\omega, \mathbf{k})$ из соотношения

$$P_{\alpha} = \frac{e^2}{\omega} E_{\beta} \int \frac{v_{\alpha} v_{\beta}}{\omega - \mathbf{k} \mathbf{v} + i\delta} \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} d\Gamma_{\mathbf{p}} \equiv \chi_{\alpha\beta} E_{\beta}$$

и затем диэлектрическую проницаемость $\varepsilon_{\alpha\beta}$ согласно

$$\varepsilon_{\alpha\beta}(\omega, \mathbf{k}) = \delta_{\alpha\beta} + 4\pi \chi_{\alpha\beta}(\omega, \mathbf{k}) = \delta_{\alpha\beta} + \frac{4\pi e^2}{\omega} \int \frac{v_{\alpha} v_{\beta}}{\omega - \mathbf{k} \mathbf{v} + i\delta} \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} d\Gamma_{\mathbf{p}}$$

Вычисление интеграла удобно провести с помощью следующего приема. Введем единичные векторы $\mathbf{l}$ и $\mathbf{e}$ вдоль вектора скорости $\mathbf{v}$ и волнового вектора $\mathbf{k}$, т.е. $\mathbf{v} = v\mathbf{l}$ и $\mathbf{k} = k\mathbf{e}$. Тогда имеем

$$\varepsilon_{\alpha\beta}(\omega, \mathbf{k}) = \delta_{\alpha\beta} + \frac{4\pi e^2}{\omega^2} \int d\Gamma_{\mathbf{p}} s v^2 \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} \int \frac{d\Omega_{\mathbf{p}}}{4\pi} \frac{l_{\alpha} l_{\beta}}{s - \mathbf{l} \mathbf{e} + i\delta}, \quad s = \frac{\omega}{vk}.$$

Интегрирование по пространственному углу вектора $\mathbf{p}$ приведет к некоторому тензору второго ранга, который зависит от двух индексов α и β . В нашем распоряжении имеется только два независимых тензора второго ранга: $\delta_{\alpha\beta}$ и $e_{\alpha} e_{\beta}$. Следовательно, интеграл по пространственному углу $\Omega_{\mathbf{p}}$ должен обладать следующей структурой:

$$\int \frac{d\Omega_{\mathbf{p}}}{4\pi} \frac{l_{\alpha} l_{\beta}}{s - \mathbf{l} \mathbf{e} + i\delta} = A(s) \delta_{\alpha\beta} + B(s) e_{\alpha} e_{\beta}$$

Неизвестные скалярные функции $A(s)$ и $B(s)$ подлежат определению. Чтобы найти $A(s)$ и $B(s)$, мы вычислим интеграл два раза. Один раз для компонент $\alpha = \beta = z$ и второй раз для свертки. Выберем ось z вдоль вектора $\mathbf{e}$. Тогда мы найдем

$$\begin{aligned} A \cdot 1 + B &= \int \frac{d\Omega}{4\pi} \frac{l_z^2}{s - \mathbf{l} \mathbf{e} + i\delta} = \frac{1}{2} \int_0^{\pi} \sin \vartheta d\vartheta \frac{\cos^2 \vartheta}{s - \cos \vartheta + i\delta} = -s W(s) \\ 3A + B &= \int \frac{d\Omega}{4\pi} \frac{l_{\alpha}^2}{s - \mathbf{l} \mathbf{e} + i\delta} = \frac{1}{2} \int_0^{\pi} \sin \vartheta d\vartheta \frac{1}{s - \cos \vartheta + i\delta} = \frac{1 - W(s)}{s} \end{aligned}$$

где функция $W(s)$ равна

$$W(s) = 1 - \frac{s}{2} \ln \frac{s+1}{s-1+i\delta}$$

При $s > 1$ или $v < \omega/k$ функция $W(s)$ действительная. При $s < 1$ или $v > \omega/k$ функция $W(s)$ содержит мнимую часть $\text{Im } W = \pi s/2$. Эта особенность, которая возникает при скорости частицы v , превышающей фазовую скорость ω/k , приводит к мнимой составляющей в диэлектрической проницаемости и специфическому затуханию в плазме затуханию Ландау.

Система из двух уравнений на $A(s)$ и $B(s)$ легко решается

$$\begin{aligned} A(s) &= \frac{1 - W(s) + s^2 W(s)}{2s} = \frac{s}{2} \left(1 + \frac{1 - s^2}{2s} \ln \frac{s+1}{s-1+i\delta} \right) \\ B(s) &= \frac{-1 + W(s) - 3s^2 W(s)}{2s} = -\frac{s}{2} \left(3 + \frac{1 - 3s^2}{2s} \ln \frac{s+1}{s-1+i\delta} \right) \end{aligned}$$

В результате находим диэлектрическую проницаемость $\varepsilon_{\alpha\beta}$

$$\varepsilon_{\alpha\beta}(\omega, \mathbf{k}) = \left(1 + \frac{4\pi e^2}{\omega^2} \int d\Gamma_{\mathbf{p}} s v^2 A(s) \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} \right) \delta_{\alpha\beta} + \left(\frac{4\pi e^2}{\omega^2} \int d\Gamma_{\mathbf{p}} s v^2 B(s) \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} \right) \frac{k_{\alpha} k_{\beta}}{k^2}.$$

Разделим диэлектрическую проницаемость $\varepsilon_{\alpha\beta}$ на продольную и поперечную компоненты, т.е. представим ее в виде

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

Смысл такого представления следующий. Если электрическое поле $\mathbf{E}_l = E\mathbf{k}/k$ - продольное, т. е. направлено вдоль вектора $\mathbf{k}$, то нетрудно увидеть, что вектор электрической индукции $\mathbf{D}$ также направлен вдоль E_l и определяется продольной компонентой диэлектрической проницаемости

$$\mathbf{D} = \varepsilon_l \mathbf{E}_l.$$

Для поперечного электрического поля $\mathbf{kE}_t = 0$. Тогда легко проверить, что вектор электрической индукции $\mathbf{D}$ полностью определяется только поперечной компонентой диэлектрической проницаемости

$$\mathbf{D} = \varepsilon_t \mathbf{E}_t.$$

Для продольной и поперечной компонент диэлектрической проницаемости находим окончательно:

$$\varepsilon_l = 1 + \frac{4\pi e^2}{k^2} \int d\Gamma_p \frac{A(s)+B(s)}{s} \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} = 1 - \frac{4\pi e^2}{k^2} \int \left(1 - \frac{s}{2} \ln \frac{s+1}{s-1+i\delta}\right) \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} \nu(\varepsilon) d\varepsilon \text{ и}$$

$$\varepsilon_t = 1 + \frac{4\pi e^2}{k^2} \int d\Gamma_p \frac{A(s)}{s} \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} = 1 + \frac{2\pi e^2}{k^2} \int \left(1 + \frac{1-s^2}{2s} \ln \frac{s+1}{s-1+i\delta}\right) \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} \nu(\varepsilon) d\varepsilon.$$

Здесь $\nu(\varepsilon)$ - плотность состояний, т.е. $d\Gamma_p = \nu(\varepsilon)d\varepsilon$, скорость электронов $v = v(\varepsilon)$ и параметр s равен $s = \omega/vk$.

БРМ-26.

Пользуясь результатами предыдущей задачи для диэлектрической проницаемости бесстолкновительной электронной плазмы, найти дебаевский радиус экранирования r_D и частоты собственных продольных и поперечных колебаний плазмы.

(add this results here!!)

БРМ-26.

Начнем с анализа продольной компоненты диэлектрической восприимчивости $\varepsilon_l(\omega, k)$. В области высоких $\omega \gg vk$ частот мы можем разложить подынтегральное выражение по $1/s \ll 1$ и найти приближенно

$$\begin{aligned} \varepsilon_l(\omega \gg vk) &= 1 + \frac{4\pi e^2}{\omega^2} \int_0^\infty \left(\frac{1}{3s^2} + \frac{1}{5s^4} + \dots \right) \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} \nu(\varepsilon) d\varepsilon = \\ &= 1 + \frac{4\pi e^2}{3\omega^2} \int_0^\infty v^2 \left(1 + \frac{3}{5} \frac{k^2 v^2}{\omega^2} + \dots \right) \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} \nu(\varepsilon) d\varepsilon \end{aligned}$$

Для дальнейших преобразований мы воспользуемся следующим соотношением

$$\begin{aligned} \int \varepsilon^r \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} d\Gamma_p &= \int_0^\infty \varepsilon^r \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} \nu(\varepsilon) d\varepsilon = - \left(r + \frac{1}{2} \right) \int_0^\infty \varepsilon^{r-1} n_0(\varepsilon) \nu(\varepsilon) d\varepsilon = \\ &= - \left(r + \frac{1}{2} \right) \int \varepsilon^{r-1} n_0(\varepsilon) d\Gamma_p \quad (r > -1/2) \end{aligned}$$

Для вывода соотношения мы проинтегрировали по частям и учли, что для спектра $\varepsilon = mv^2/2$ плотность состояний $\nu(\varepsilon) \sim \varepsilon^{1/2}$. Итак, мы получим

$$\varepsilon_l(\omega \gg vk) \approx 1 - \frac{\Omega^2}{\omega^2} \left(1 + \frac{k^2 \langle v^2 \rangle}{\omega^2} \right); \quad \Omega^2 = \frac{4\pi n e^2}{m}$$

Частота Ω называется плазменной частотой и является важной характеристикой плазмы. Плотность электронов n введена как обычно $n = \int d\Gamma_p n_0(\varepsilon)$, а угловые скобки обозначают здесь и ниже следующее усреднение с функцией распределения n_0 :

$$\langle (\dots) \rangle = \frac{\int d\Gamma_p (\dots) n_0(\varepsilon)}{\int d\Gamma_p n_0(\varepsilon)}$$

Вычисление мнимой части продольной компоненты диэлектрической проницаемости удастся провести в аналитическом виде

$$\text{Im } \varepsilon_l = -\pi \frac{4\pi e^2}{k^2} \int_{v > \omega/k} \frac{\omega}{2vk} \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} d\Gamma_p = \omega \frac{\Omega^2}{k^2} \frac{m^3}{nk} \frac{n_0(m\omega^2/2k^2)}{2\pi\hbar^3}$$

Для области низких ($\omega \ll vk$) частот, используя разложение подынтегрального выражения при $s \ll 1$, получим

$\varepsilon_l(\omega \ll vk) \approx 1 - \frac{4\pi e^2}{k^2} \int d\Gamma_p (1 + i\frac{\pi s}{2}) \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} = 1 + \frac{\Omega^2}{k^2} \left\langle \frac{1}{v^2} \right\rangle + i\omega \frac{\Omega^2}{k^2} \frac{m^3}{nk} \frac{n_0(\varepsilon=0)}{2\pi\hbar^3}$.
Статическая диэлектрическая проницаемость, равная

$$\varepsilon_l(0, k) = 1 + \frac{1}{k^2 r_D^2}, \quad r_D^{-2} = \Omega^2 \left\langle \frac{1}{u^2} \right\rangle$$

определяет экранирование электрического заряда в плазме. Действительно, фурье-компонента потенциала φ_k для точечного заряда величиной q равна

$$\varphi_k = \frac{4\pi q}{k^2 \varepsilon(0, k)} = \frac{4\pi q}{k^2 + r_D^{-2}}$$

Соответствующее пространственное поведение потенциала отвечает дебаевскому экранированию

$$\varphi(r) = \frac{q}{r} e^{-r/r_D}$$

с дебаевским радиусом r_D . Простое вычисление дает где ε_F - энергия Ферми и T - температура.

Рассмотрим возможность существования продольных колебаний в плазме. Пусть электрическое поле $\mathbf{E}_l(\mathbf{r}, t) \sim \mathbf{E}_l \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r} - i\omega t)$ - продольное, т. е. $\mathbf{E}_l = E\mathbf{k}/k$. Тогда имеем $\text{rot } \mathbf{E}_l = i[\mathbf{k} \times \mathbf{E}_l] = 0$ и, следовательно, $\partial \mathbf{B}/\partial t = -i\omega \mathbf{B} = 0$. Магнитное поле отсутствует $\mathbf{B} = 0$ и нулевое значение $\text{rot } \mathbf{B} = 0$ дает $\partial \mathbf{D}/\partial t = -i\omega \mathbf{D} = 0$, т.е. $\mathbf{D} = 0$. С другой стороны, для продольного поля вектор электрической индукции равен $\mathbf{D} = \varepsilon_l(\omega, \mathbf{k}) \mathbf{E}_l = 0$. Нетривиальные решения возможны только при условии

$$\varepsilon_l(\omega, \mathbf{k}) = 0$$

которое определяет дисперсию продольных плазменных колебаний. Подставляя в это уравнение продольную диэлектрическую проницаемость, найденную выше, имеем

$$1 - \frac{\Omega^2}{\omega^2} \left(1 + \frac{k^2 \langle v^2 \rangle}{\omega^2} \right) = 0 \text{ или } \omega^2 \approx \Omega^2 + k^2 \langle v^2 \rangle \text{ и } \omega \approx \Omega + \frac{k^2 \langle v^2 \rangle}{2}$$

Второе слагаемое, зависящее от волнового вектора k , мало по сравнению с плазменной частотой Ω . Таким образом, в плазме существуют слабодисперсионные продольные плазменные (ленгмюровские) волны или плазмоны.

Поперечные колебания электрического поля $\mathbf{E}_t(\mathbf{r}, t) \sim \mathbf{E}_t \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r} - i\omega t)$ подразумевают равенство $\mathbf{k}\mathbf{E}_t = 0$. Так как $\mathbf{D}_t = \varepsilon_t \mathbf{E}_t$, то и для вектора индукции также будет $\mathbf{k}\mathbf{D}_t = 0$. Согласно уравнениям Максвелла для фурье-компонент электрического и магнитного полей мы найдем

$$\begin{cases} \text{rot } \mathbf{E}_t = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, & \text{div } \mathbf{B} = 0, \\ \text{rot } \mathbf{B} = \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{D}_t}{\partial t}, & \text{div } \mathbf{D}_t = 0, \end{cases} \implies \begin{cases} \mathbf{k} \times \mathbf{E}_t = \frac{\omega}{c} \mathbf{B}, & \mathbf{k}\mathbf{B} = 0 \\ \mathbf{k} \times \mathbf{B} = -\frac{\omega}{c} \mathbf{D}_t, & \mathbf{k}\mathbf{D}_t = 0 \end{cases}$$

Отсюда, исключая магнитное поле $\mathbf{B}$, получим

$$\mathbf{k} \times [\mathbf{k} \times \mathbf{E}_t] = \mathbf{k} (\mathbf{k}\mathbf{E}_t) - k^2 \mathbf{E}_t = \frac{\omega}{c} [\mathbf{k} \times \mathbf{B}] = -\frac{\omega^2}{c^2} \mathbf{D}_t = -\frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon_t \mathbf{E}_t$$

Чтобы существовало нетривиальное решение $\mathbf{E}_t \neq 0$, необходимо удовлетворить следующее дисперсионное уравнение

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

Для высокочастотных ($\omega \gg vk$) поперечных колебаний учет пространственной дисперсии в диэлектрической проницаемости ε_t не существен в силу $v \ll c$ и можно положить $\varepsilon_t(\omega, k) \approx \varepsilon_t(\omega, 0) = 1 - \Omega^2/\omega^2$. Это дает

$$\omega^2 = \Omega^2 + c^2 k^2$$

При $\omega \gg \Omega$ влияние плазмы не сказывается и $\omega = ck$ как в вакууме. Частоты $\omega < \Omega$ отвечают мнимым значением волнового вектора k . Физически это означает, колебания с такими частотами затухают и не могут распространяться вглубь плазмы.

В заключение выпишем мнимую часть поперечной компоненты диэлектрической проницаемости

$$\text{Im } \varepsilon_t = -\pi \frac{2\pi e^2}{k^2} \int_{v>\omega/k} \frac{v^2 k^2 - \omega^2}{2\omega v k} \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} d\Gamma_p = \frac{\pi \Omega^2}{2\omega k} \left\langle \frac{1}{v} \right\rangle \frac{\int_0^\infty n_0(\varepsilon) d\varepsilon}{\int_0^\infty n_0(\varepsilon) d\varepsilon}$$

В области низких ($\omega \ll vk$) частот действительная часть поперечной компоненты диэлектрической проницаемости ε_l приближенно равна

$$\operatorname{Re} \varepsilon_t(\omega \ll vk) \approx 1 - \frac{1}{k^2 r_D^2}$$

Основной вклад в поперечную компоненту диэлектрической проницаемости ε_t связан с ее мнимой частью, которую можно оценить как

$$\operatorname{Im} \varepsilon_t(\omega \ll vk) \approx \frac{\pi \Omega^2}{2 \omega k} \left\langle \frac{1}{v} \right\rangle \sim \frac{\Omega}{\omega k r_D}$$

Подстановка приближенного значения ε_t в дисперсионное уравнение дает

$$k^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \left(i \frac{\pi \Omega^2}{2 \omega k} \left\langle \frac{1}{v} \right\rangle \right)$$

Отсюда находим закон для дисперсии длинноволновых ($kr_D \ll 1$) поперечных колебаний

$$\omega = -i \frac{2}{\pi} \frac{c^2 k^3}{\Omega^2 \langle v^{-1} \rangle}$$

Чисто мнимое значение частоты означает, что такие плазменные колебания являются аperiodическими и сильно затухающими.

БРМ-27.

Найти пространственно-частотную дисперсию диэлектрической проницаемости $\varepsilon(\omega, \mathbf{k})$ тонкой металлической пленки, рассматривая последнюю как двумерный слой бесстолкновительной электронной плазмы. Найти дисперсию $\omega = \omega(k)$ продольных плазменных колебаний (плазмонов).

БРМ-27.

Пусть двумерный слой плазмы лежит в плоскости $z = 0$. Для функции распределения электронов $n(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$, где $\mathbf{r}$ - радиус-вектор, лежащий в плоскости слоя, запишем кинетическое уравнение в бесстолкновительном случае

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial n}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{F} \frac{\partial n}{\partial \mathbf{p}} = 0$$

Здесь $\mathbf{v} = \mathbf{p}/m$ - скорость электрона и $\mathbf{F} = -e(\mathbf{E} + [\mathbf{v} \times \mathbf{B}]/c)$ - сила Лоренца, действующая на электрон с зарядом $(-e)$.

Для малых отклонений $\delta n(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ функции распределения от равновесного значения $n_0(\varepsilon_p)$ с учетом того, что $\partial n_0(\varepsilon_p)/\partial \mathbf{p} = \mathbf{v} \partial n_0/\partial \varepsilon$, мы имеем

$$\frac{\partial \delta n}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial \delta n}{\partial \mathbf{r}} = e(vE) \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon}$$

где $\mathbf{E} = \mathbf{E}(\mathbf{r}, z=0, t)$ - напряженность электрического поля в слое. Если электрическое поле содержит гармонику $\mathbf{E}(\mathbf{r}, z, t) = E_{k,\omega}(z) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r} - i\omega t)$, то в силу линейности уравнения и $\delta n(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = \delta n_{k,\omega}(\mathbf{p}) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r} - i\omega t)$. Принимая во внимание запаздывающий характер отклика на электрическое поле, найдем, что

$$\delta n_{k,\omega}(p) = \frac{ie(vE_{k,\omega}(z=0))}{\omega - \mathbf{k}\mathbf{v} + i\delta} \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon}$$

Соответственно, индуцированная возмущением электрического поля плотность поляризационных зарядов будет равна

$$\rho_{k,\omega} = -e \int \delta n_{k,\omega} \frac{2d^2 p}{(2\pi\hbar)^2} = -ie^2 \int \frac{(vE_{k,\omega}(z=0))}{\omega - \mathbf{k}\mathbf{v} + i\delta} \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} \frac{2d^2 p}{(2\pi\hbar)^2}.$$

Рассмотрим следующий интеграл

$$I(\omega, \mathbf{k}) = \int \frac{v}{\omega - \mathbf{k}\mathbf{v} + i\delta} \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} \frac{2d^2 p}{(2\pi\hbar)^2}$$

Интегрирование по углу φ между векторами $\mathbf{k}$ и $\mathbf{v}$ приведет к некоторому вектору, направленному вдоль волнового вектора $\mathbf{k}$,

$$I(\omega, \mathbf{k}) = \frac{\mathbf{k}}{k^2} \int \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} A(s) \frac{2d^2 p}{(2\pi\hbar)^2}$$

Здесь $s = \omega/vk$ и функция $A(s)$ определяется выражением

$$A(s) = \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{2\pi} \frac{\cos \varphi}{s - \cos \varphi + i\delta} = \begin{cases} -1 + s/\sqrt{s^2 - 1}, & s > 1 \\ -1 - is/\sqrt{1 - s^2}, & s < 1 \end{cases}$$

Появление мнимой части в $A(s)$ связано с механизмом затухания Ландау, когда скорость частицы v превышает фазовую скорость волны ω/k .

После перехода от интегрирования по импульсу к интегрированию по энергии $\varepsilon = p^2/2m$ плотность поляризационных зарядов $\rho_{k,\omega}$ определяется выражением

$$\rho_{k,\omega} = -\frac{i(\mathbf{k}E_{k,\omega}(z=0))}{\pi k^2 a_B} \int_0^\infty \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} A(s) d\varepsilon$$

где через $a_B = \hbar^2/m\epsilon^2$ обозначен боровский радиус.

Поляризованные заряды в слое с объемной плотностью $\rho_V(\mathbf{r}, z) = \rho(r)\delta(z)$ приведут к появлению поляризационного потенциала

$$\varphi(\mathbf{r}, z) = \int \frac{\rho(r') \delta(z')}{\sqrt{(\mathbf{r} - \mathbf{r}')^2 + (z - z')^2}} d^2 r' dz' = \int \frac{\rho(r') d^2 r'}{\sqrt{(\mathbf{r} - \mathbf{r}')^2 + z^2}}$$

Пользуясь свойством свертки и тем, что

$$\int \frac{e^{ikr} d^2 r}{\sqrt{r^2 + z^2}} = 2\pi \int_0^\infty \frac{r J_0(kr) dr}{\sqrt{r^2 + z^2}} = \frac{2\pi}{k} e^{-k|z|}$$

где J_0 - функция Бесселя нулевого индекса, мы найдем следующую связь между фурье-компонентами потенциала и плотностью поляризационных зарядов, возникающих в бесконечно тонком слое ¹⁾

$$\varphi_{k,\omega}(z) = \frac{2\pi}{k} e^{-k|z|} \rho_{k,\omega}$$

Зная потенциал поляризационных зарядов, мы можем найти соответствующую напряженность электрического поля $\mathbf{E}_\Pi$ в точке $z = 0$ или поляризацию согласно $\mathbf{E}_\Pi = 4\pi\mathbf{P}$. Нас интересует компонента поля, параллельная электронному слою,

$$\mathbf{E}_\Pi(z) = -\frac{\partial \varphi_{k,\omega}(z)}{\partial \mathbf{r}} \quad \text{или} \quad \mathbf{E}_{\square k,\omega}(z) = i\mathbf{k}\varphi_{k,\omega}(z) = \frac{2\pi i k}{k} e^{-k|z|} \rho_{k,\omega}.$$

Отсюда, положив значение $z = 0$, получим следующие выражения для вектора поляризации $\mathbf{P}_{k,\omega}$

$$4\pi\mathbf{P}_{k,\omega} = \frac{2\pi i \mathbf{k}}{k} \rho_{k,\omega} = \frac{2\mathbf{k}(\mathbf{k}E_{k,\omega})}{k^3 a_B} \int_0^\infty \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} A(s) d\varepsilon$$

и для коэффициента поляризуемости $\chi_{\alpha\beta}(\omega, \mathbf{k})$

$$4\pi\chi_{\alpha\beta}(\omega, k) = 4\pi\chi_l(\omega, k) \frac{k_\alpha k_\beta}{k^2} = \frac{2}{ka_B} \left(\int_0^\infty \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} A(s) d\varepsilon \right) \frac{k_\alpha k_\beta}{k^2}$$

Таким образом, мы приходим к следующему выражению для продольной диэлектрической проницаемости $\varepsilon_l(\omega, k)$ тонкого плазменного слоя

$$\varepsilon_l(\omega, k) = 1 + 4\pi\chi_l(\omega, k) = 1 + \frac{2}{ka_B} \int_0^\infty \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} A(s) d\varepsilon$$

Проанализируем сначала наиболее интересный случай нулевой температуры, когда электронная компонента представляет собой вырожденный ферми-газ. Тогда можно положить $\partial n_0/\partial \varepsilon = -\delta(\varepsilon - \varepsilon_F)$ и сразу получить для продольной проницаемости выражение

$$\varepsilon_l(\omega, k) = \begin{cases} 1 + \frac{2}{ka_B} \left(1 - \frac{\omega}{\sqrt{\omega^2 - v_F^2 k^2}} \right), & \omega > v_F k \\ 1 + \frac{2}{ka_B} \left(1 + \frac{i\omega}{\sqrt{v_F^2 k^2 - \omega^2}} \right), & \omega < v_F k \end{cases}$$

¹⁾ Отметим, что здесь при $z = 0$ множитель $2\pi/k$, связывающий фурье-компоненты потенциала и плотности заряда, отличается от привычного множителя $4\pi/k^2$ для объемного трехмерного случая.

Статическое значение диэлектрической проницаемости $\varepsilon(0, k) = 1 + 2/ka_B$ означает, что электрическое поле точечного заряда величиной q в тонкой металлической пленке начинает экранироваться на расстояниях порядка боровского радиуса a_B . Однако, в отличие от объемного металла экранирование здесь гораздо менее эффективно, становится неэкспоненциальным и напряженность поля от внесенного в слой заряда q спадает на больших расстояниях степенным образом как qa_B^2/r^3 .

Спектр плазменных колебаний или плазмонов определяется из дисперсионного уравнения $\varepsilon_l(\omega, k) = 0$. Предполагая $\omega > v_F k$, получим уравнение

$$1 + \frac{ka_B}{2} = \frac{\omega}{\sqrt{\omega^2 - v_F^2 k^2}} \quad \text{или} \quad \omega^2 = k \frac{v_F^2 (1 + ka_B)^2}{a_B (1 + ka_B/4)}.$$

Отсюда, в естественном длинноволновом пределе $ka_B \ll 1$ имеем дисперсионное соотношение для плазмонов с корневой зависимостью от волнового вектора

$$\omega(k) = v_F \sqrt{k/a_B} = \sqrt{2\pi n e^2 k / m}$$

При переходе к последнему равенству мы учли, что для двумерного ферми-газа электронов импульс Ферми p_F и скорость Ферми v_F связаны с плотностью электронов n соотношением $p_F = mv_F = \hbar(2\pi n)^{1/2}$.

При конечной температуре спектр плазмонов в длинноволновом $ka_B \ll 1$ пределе остается неизменным. Воспользовавшись разложением $A(s) \approx 1/2s^2$ при $s \gg 1$, получим

$$\varepsilon_l = 1 + \frac{2e^2 k}{\hbar^2 \omega^2} \int_0^\infty \varepsilon \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} d\varepsilon = 1 - \frac{2e^2 k}{\hbar^2 \omega^2} \int_0^\infty n_0(\varepsilon) d\varepsilon = 1 - \frac{2\pi n e^2 k}{m \omega^2}$$

Условие $\varepsilon_l = 0$ дает тот же самый корневой спектр плазмонов. При конечной температуре механизм затухания Ландау приведет к незначительному затуханию двумерных плазмонов.

BPM-28 Kinetics in graphene

В графене, представляющий собой монослой графита, зависимость энергии электронов от импульса $p = (p_x, p_y)$ описывается безмассовым дираковским спектром $\varepsilon_p = v \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}$, где v - скорость электронов и $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$ - матрицы Паули, и соответственно электронный спектр равен $\varepsilon_p = \pm v|\mathbf{p}|$. Плотность состояний $g(\varepsilon)$ определяется интегралом

$$g(\varepsilon) = \nu \int \frac{d^2 p}{(2\pi \hbar)^2} [\delta(\varepsilon - vp) + \delta(\varepsilon + vp)] = \nu \frac{|\varepsilon|}{2\pi \hbar^2 v^2},$$

где $\nu = 2 \times 2$ - кратность вырождения спектра по спину электрона и двум подзонам.

Пользуясь моделью и результатами предыдущей задачи, найти продольную диэлектрическую проницаемость $\varepsilon_l(\omega, k)$ и дисперсию $\omega = \omega(\mathbf{k})$ продольных плазменных колебаний (плазмонов) в графене.

BPM-28.

Воспользуемся результатами предыдущей задачи и запишем общее выражение для продольной диэлектрической проницаемости двумерного слоя электронов

$$\varepsilon_l(\omega, k) = 1 + \frac{2\pi e^2}{k} \int \frac{\partial n_0(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} A(s) \frac{\nu d^2 p}{(2\pi \hbar)^2}$$

где $n_0(\varepsilon) = 1/(1 + e^{(\varepsilon - \mu)/T})$ - функция распределения Ферми, $\nu = 2 \times 2$, а функцию $A(s)$, равную

$$A(s) = \begin{cases} -1 + s/\sqrt{s^2 - 1}, & s > 1 \\ -1 - is/\sqrt{1 - s^2}, & s < 1 \end{cases}$$

можно вынести из под знака интеграла, так как ее аргумент $s = \omega/vk$ не зависит от импульса p . В результате после перехода от интегрирования по импульсу к интегрированию по энергии с введением плотности состояний $g(\varepsilon)$ мы получим для диэлектрической проницаемости

$$\begin{aligned} \varepsilon_l(\omega, k) &= 1 + \frac{2\pi e^2}{k} A\left(\frac{\omega}{vk}\right) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial n_0(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} g(\varepsilon) d\varepsilon = \\ &= 1 - \frac{2\pi e^2}{k} A\left(\frac{\omega}{vk}\right) \frac{\nu}{2\pi \hbar^2 v^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon}{4T} \frac{|\varepsilon|}{\text{ch}^2 \frac{\varepsilon - \mu}{2T}} = 1 - \frac{4e^2 T}{\hbar^2 v^2 k} A\left(\frac{\omega}{vk}\right) \ln \left(2 \text{ch} \frac{\mu}{2T} \right) \end{aligned}$$

Дисперсию плазмонов находим из уравнения $\varepsilon_l(\omega, k) = 0$, решение которого несложно:

$$\omega^2 = \frac{\varkappa k}{1 + v^2 k / 4\varkappa} + v^2 k^2, \quad \varkappa = \frac{2e^2 T}{\hbar^2} \ln \left(2 \operatorname{ch} \frac{\mu}{T} \right)$$

В наиболее интересной длинноволновой области $k \ll x/v^2$ плазменные колебания (плазмоны) имеют ту же корневую зависимость от волнового вектора

$$\omega(k) = \sqrt{\varkappa k}$$

как и для обычных двумерных систем, но с температурной зависимостью $\varkappa$ при $\mu \lesssim T$.

18.3 Problems about Quantum Kinetics

18.3.1 Problems about tunneling and quantum nucleation

BPM-29. Caldeira-Leggett model

Частица массой M находится в потенциале $U_0(q)$ и взаимодействует с внешней средой - термостатом, который представляет собой бесконечный набор $\{\alpha\}$ фононов, т. е. осцилляторов с частотами ω_α . Гамильтониан среды - энергия осцилляторов:

$$H_{\text{cp}} = \sum_{\alpha} \left(\frac{m \dot{x}_{\alpha}^2}{2} + \frac{m \omega_{\alpha}^2 x_{\alpha}^2}{2} \right)$$

и каждая из сил, действующих на частицу, пропорциональна отклонению осциллятора x_{α} от положения равновесия $x_{\alpha} = 0$. Потенциал взаимодействия частицы со средой равен

$$U_{\text{вз}} = \sum_{\alpha} q C_{\alpha} x_{\alpha},$$

где C_{α} - константа взаимодействия. Спектральная плотность колебаний фононов вводится согласно

$$J(\Omega) = \frac{\pi}{2} \sum_{\alpha} \frac{C_{\alpha}^2}{m \omega_{\alpha}} \delta(\Omega - \omega_{\alpha}).$$

Предполагая, что в спектре фононов имеются сколь угодно малые частоты и $J(\Omega) = \eta \Omega (\eta > 0)$, исключить переменные среды x_{α} и найти эффективное уравнение движения частицы в среде. Также определить коэффициент трения, случайную силу и коррелятор случайной силы. Влиянием частицы на среду пренебречь и считать, что среда все время находится в термодинамическом равновесии при температуре T .

29

Запишем действие S для полной физической системы: частица + среда

$$S[q(t), x_{\alpha}(t)] = \int \left[\frac{M \dot{q}^2}{2} - U_0(q) + \sum_{\alpha} \left(\frac{m \dot{x}_{\alpha}^2}{2} - \frac{m \omega_{\alpha}^2 x_{\alpha}^2}{2} \right) - q \sum_{\alpha} C_{\alpha} x_{\alpha} \right] dt$$

Последнее слагаемое отвечает за взаимодействие частицы со средой. Уравнения движения для частицы и фононов имеют вид

$$\begin{aligned} M \ddot{q} + U'_0(q) &= - \sum_{\alpha} C_{\alpha} x_{\alpha} \\ m \ddot{x}_{\alpha} + m \omega_{\alpha}^2 x_{\alpha} &= -q C_{\alpha} \end{aligned}$$

Решение линейного уравнения на $x_{\alpha}(t)$ представим в виде суммы вынужденных и свободных колебаний

$$\begin{aligned} x_{\alpha}(t) &= -C_{\alpha} \int_{-\infty}^t \frac{\sin \omega_{\alpha}(t-s)}{m \omega_{\alpha}} q(s) ds + x_{\alpha}(0) \cos \omega_{\alpha} t + \frac{\dot{x}_{\alpha}(0)}{\omega_{\alpha}} \sin \omega_{\alpha} t = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} K_{\alpha}^R(t-s) q(s) ds + x_{\alpha}^{(c)}(t) \end{aligned}$$

где мы распространили интегрирование по всему возможному интервалу времени, а также ввели функцию запаздывающего отклика K_α^R

$$K_\alpha^R(t) = -\vartheta(t) \frac{C_\alpha \sin \omega_\alpha t}{m\omega_\alpha}$$

и определили для нее фурье-компоненту

$$K_\alpha^R(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} K_\alpha^R(t) e^{i\omega t} dt = -\frac{C_\alpha}{m[\omega_\alpha^2 - (\omega + i\delta)^2]}$$

имеющую полюса $\omega = \pm\omega_\alpha - i\delta$ только в нижней полуплоскости комплексной переменной ω . Величины $x_\alpha(0)$ и $\dot{x}_\alpha(0)$ можно трактовать как положение и скорость фонона, которые имел бы фонон в отсутствие его взаимодействия с частицей в один и тот же момент времени, например, при $t = 0$.

Суммарная сила $F(t)$, действующая на частицу, определяется соотношением

$$F(t) = \int_{-\infty}^{\infty} K^R(t-s)q(s)ds + f(t)$$

$$f(t) = -\sum_{\alpha} C_{\alpha} \left(x_{\alpha}(0) \cos \omega_{\alpha} t + \frac{\dot{x}_{\alpha}(0)}{\omega_{\alpha}} \sin \omega_{\alpha} t \right)$$

Суммарная функция отклика $K^R(t)$ здесь равна

$$K^R(t) = -\sum_{\alpha} C_{\alpha} K_{\alpha}^R(t) = \vartheta(t) \sum_{\alpha} C_{\alpha}^2 \frac{\sin \omega_{\alpha} t}{m\omega_{\alpha}}$$

Ее фурье-компонента легко находится и может быть выражена через спектральную плотность $J(\Omega)$

$$K^R(\omega) = \sum_{\alpha} \frac{C_{\alpha}^2}{m[\omega_{\alpha}^2 - (\omega + i\delta)^2]} \equiv \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\Omega}{\Omega^2 - (\omega + i\delta)^2} J(\Omega) d\Omega$$

Окончательно, мы получим следующее уравнение движения частицы

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

Разобьем функцию отклика K^R на две части, одна из которых K_0 - частотно-независимая

$$K_0 = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{J(\Omega)}{\Omega} d\Omega = \sum_{\alpha} \frac{C_{\alpha}^2}{m\omega_{\alpha}}$$

а другая ее часть K_1^R - частотно-зависимая

$$K_1^R(\omega) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{J(\Omega)}{\Omega} \frac{\omega^2}{\Omega^2 - (\omega + i\delta)^2} d\Omega$$

так что $K^R(\omega) = K_0 + K_1^R(\omega)$. Если $J(\Omega) = \eta\Omega$, то легко убедиться, что

$$K_1^R(\omega) = i\omega\eta \quad \text{и} \quad K^R(\omega) = K_0 + i\omega\eta$$

Выполняя обратное фурье-преобразование находим временное представление для функции отклика

$$K^R(t) = K_0\delta(t) - \eta\delta'(t)$$

Подставим $K^R(t)$ в уравнение движения для частицы и вычислим интегралы

$$M\ddot{q} + U'_0(q) = K_0 \int_{-\infty}^{\infty} \delta(t-s)q(s)ds - \eta \int_{-\infty}^{\infty} \delta'(t-s)q(s)ds + f(t) =$$

$$= K_0q(t) - \eta\dot{q}(t) + f(t)$$

Это уравнение мы запишем в форме уравнения Ланжевена с коэффициентом трения η и силой трения, пропорциональной скорости частицы $\dot{q}$

$$M\ddot{q} + \eta\dot{q} + U'(q) = f(t) \quad \text{и} \quad U(q) = U_0(q) - K_0 q^2/2$$

Таким образом, взаимодействие частицы со средой приводит, во-первых, к перенормировке потенциальной энергии частицы $U_0(q) \rightarrow U(q)$, во-вторых, к возникновению силы трения и, в третьих, к появлению случайной силы $f(t)$, свойства которой зависят от состояния среды.

Перейдем к рассмотрению свойств случайной силы $f(t)$. Поскольку для термодинамически равновесной системы термодинамическое среднее координаты осциллятора и его скорости равны нулю, т. е. $\langle x_\alpha(0) \rangle = 0$ и $\langle \dot{x}_\alpha(0) \rangle = 0$, то среднее значение случайной силы будет также равно нулю

$$\langle f(t) \rangle = 0$$

Коррелятор силы второго порядка определяется двойной суммой

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

Так как осцилляторы или фононы независимы друг от друга, то среднее для произведения двух величин от разных осцилляторов равно произведению средних, например, $\langle x_\alpha(0)x_\beta(0) \rangle = \langle x_\alpha(0) \rangle \langle x_\beta(0) \rangle = 0$ при $\alpha \neq \beta$, и в сумме останутся только члены с $\alpha = \beta$

$$\begin{aligned} \langle f(t)f(t') \rangle = \sum_{\alpha} C_\alpha^2 & \left[\langle x_\alpha(0)^2 \rangle \cos \omega_\alpha t \cos \omega_\alpha t' + \right. \\ & \left. + \frac{\langle x_\alpha(0)\dot{x}_\alpha(0) \rangle}{\omega_\alpha} \sin \omega_\alpha (t+t') + \frac{\langle \dot{x}_\alpha(0)\dot{x}_\alpha(0) \rangle}{\omega_\alpha^2} \sin \omega_\alpha t \sin \omega_\alpha t' \right] \end{aligned}$$

Для дальнейшего заметим, что термодинамическое среднее произведения координаты и скорости для осциллятора, взятое в один и тот же момент времени равно нулю, т.е. $\langle x_\alpha(0)\dot{x}_\alpha(0) \rangle = 0$, а средний квадрат скорости легко выразить через средний квадрат координаты $\langle \dot{x}_\alpha^2(0) \rangle = \omega_\alpha^2 \langle x_\alpha^2(0) \rangle$ в силу равенства средних для кинетической и потенциальной энергий. Учитывая, что для термодинамически равновесного осциллятора при температуре T

$$\langle x_\alpha^2(0) \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega_\alpha} \operatorname{cth} \frac{\hbar\omega_\alpha}{2T}$$

найдем для временного коррелятора силы

$$\begin{aligned} \langle f(t)f(t') \rangle &= \sum_{\alpha} C_\alpha^2 \frac{\hbar}{2m\omega_\alpha} \operatorname{cth} \frac{\hbar\omega_\alpha}{2T} \cos \omega_\alpha (t-t') = \\ &= \frac{\hbar}{\pi} \int_0^\infty J(\Omega) \operatorname{cth} \frac{\hbar\Omega}{2T} \cos \Omega (t-t') d\Omega = \frac{\eta}{\pi} \int_0^\infty \hbar\Omega \operatorname{cth} \frac{\hbar\Omega}{2T} \cos \Omega (t-t') d\Omega \end{aligned}$$

В силу четности подынтегральной функции нетрудно найти фурье-компоненту временного коррелятора силы или его спектральную плотность

$$\begin{aligned} \langle f(t)f(t') \rangle_\Omega &= \int \langle f(t)f(t') \rangle e^{i\Omega(t-t')} \frac{d\Omega}{2\pi} = \eta\hbar\Omega \operatorname{cth} \frac{\hbar\Omega}{2T} = \\ &= \begin{cases} 2\eta T, & \text{классический предел, } \hbar = 0, \\ \eta\hbar|\Omega|, & \text{квантовый предел, } T = 0. \end{cases} \end{aligned}$$

Во временном представлении коррелятор силы $\langle f(t)f(t') \rangle_\Omega$ в двух предельных случаях равен

$$\langle f(t)f(t') \rangle_\Omega = \begin{cases} 2\eta T \delta(t-t'), & \text{классический предел, } \hbar = 0, \\ -\frac{\eta\hbar}{\pi(t-t')^2}, & \text{квантовый предел, } T = 0. \end{cases}$$

Случайная сила оказывается некоррелированной в классическом пределе и коррелированной в квантовом пределе. Сравнивая полученный ответ с результатами задачи 1, отметим, что полученная спектральная плотность коррелятора случайной силы полностью соответствует содержанию флуктуационно-диссипационной теоремы, которая связывает флуктуации координаты частицы с диссипативными свойствами термодинамически равновесной среды.

BPM-30. Generalized Caldeira-Leggett model

Частица массой M находится в потенциале $U_0(q)$ и взаимодействует с внешней средой - термостатом, который представляет собой бесконечный набор $\{\alpha\}$ фононов, т. е. осцилляторов с частотами ω_α . Гамильтониан среды - энергия осцилляторов:

$$H_{\text{Вз}} = \sum_{\alpha} \left(\frac{m\dot{x}_{\alpha}^2}{2} + \frac{m\omega_{\alpha}^2 x_{\alpha}^2}{2} \right).$$

Потенциал взаимодействия частицы со средой, вообще говоря, нелинейный и равен

$$U_{\text{вз}} = \sum_{\alpha} \gamma(q) C_{\alpha} x_{\alpha},$$

где C_{α} - константа взаимодействия. Спектральная плотность колебаний в среде определена как

$$J(\Omega) = \frac{\pi}{2} \sum_{\alpha} \frac{C_{\alpha}^2}{m\omega_{\alpha}} \delta(\Omega - \omega_{\alpha}).$$

Предполагая $J(\Omega) = \eta\Omega(\eta > 0)$, исключить переменные среды x_{α} и найти эффективное уравнение движения частицы в среде. Также определить перенормировку потенциала $U_0(q)$ и коэффициент трения $\mu(q)$. Эта задача является обобщением предыдущей задачи на случай нелинейного взаимодействия между частицей и средой.

30.

Решение задачи аналогично рассмотрению предыдущей задачи. Пишем действие $S = S[q(t), x_{\alpha}(t)]$ для системы: частица + среда

$$S = \int \left[\frac{M\dot{q}^2}{2} - U_0(q) + \sum_{\alpha} \left(\frac{m\dot{x}_{\alpha}^2}{2} - \frac{m\omega_{\alpha}^2 x_{\alpha}^2}{2} \right) - \gamma(q) \sum_{\alpha} C_{\alpha} x_{\alpha} \right] dt$$

Уравнения движения для частицы и фононов имеют вид

$$\begin{aligned} M\ddot{q} + U'_0(q) &= -\gamma'(q) \sum_{\alpha} C_{\alpha} x_{\alpha} \\ m\ddot{x}_{\alpha} + m\omega_{\alpha}^2 x_{\alpha} &= -\gamma(q) C_{\alpha} \end{aligned}$$

Решение линейного уравнения на $x_{\alpha}(t)$ представим в виде суммы вынужденных и свободных колебаний

$$\begin{aligned} x_{\alpha}(t) &= -C_{\alpha} \int_{-\infty}^t \frac{\sin \omega_{\alpha}(t-s)}{m\omega_{\alpha}} \gamma(q_s) ds + x_{\alpha}(0) \cos \omega_{\alpha} t + \frac{\dot{x}_{\alpha}(0)}{\omega_{\alpha}} \sin \omega_{\alpha} t = \\ &= C_{\alpha} \int_{-\infty}^{\infty} K_{\alpha}^R(t-s) \gamma(q_s) ds + x_{\alpha}^{(\text{CB})}(t) \end{aligned}$$

где мы распространили интегрирование по всему возможному интервалу времени и ввели функцию запаздывающего отклика $K_{\alpha}^R(t)$

$$K_{\alpha}^R(t) = -\vartheta(t) \frac{\sin \omega_{\alpha} t}{m\omega_{\alpha}}$$

Определим для $K_{\alpha}^R(t)$ фурье-компоненту

$$K_{\alpha}^R(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} K_{\alpha}^R(t) e^{i\omega t} dt = -\frac{1}{m[\omega_{\alpha}^2 - (\omega + i\delta)^2]}$$

имеющую полюса $\omega = \pm\omega_{\alpha} - i\delta$ только в нижней полуплоскости комплексной переменной ω . Величины $x_{\alpha}(0)$ и $\dot{x}_{\alpha}(0)$ можно трактовать как положение и скорость фонона, которые имел бы фонон в отсутствие его взаимодействия с частицей в один и тот же момент времени, например, при $t = 0$.

Суммарная сила $F(t)$, действующая на частицу, определяется соотношением

$$F(t) = \gamma'(q) \int_{-\infty}^{\infty} K^R(t-s) \gamma(q_s) ds + f(t)$$

$$f(t) = -\gamma(q) \sum_{\alpha} C_{\alpha} \left(x_{\alpha}(0) \cos \omega_{\alpha} t + \frac{\dot{x}_{\alpha}(0)}{\omega_{\alpha}} \sin \omega_{\alpha} t \right)$$

Суммарная функция отклика $K^R(t)$ здесь равна

$$K^R(t) = - \sum_{\alpha} C_{\alpha}^2 K_{\alpha}^R(t) = \vartheta(t) \sum_{\alpha} C_{\alpha}^2 \frac{\sin \omega_{\alpha} t}{m \omega_{\alpha}}$$

Ее фурье-компонента легко находится и может быть выражена через спектральную плотность $J(\Omega)$

$$K^R(\omega) = \sum_{\alpha} \frac{C_{\alpha}^2}{m [\omega_{\alpha}^2 - (\omega + i\delta)^2]} \equiv \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\Omega}{\Omega^2 - (\omega + i\delta)^2} J(\Omega) d\Omega$$

Окончательно, мы получим следующее уравнение движения частицы:

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

Функция отклика K^R разбивается на две части, одна из которых K_0 - частотно-независимая

$$K_0 = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{J(\Omega)}{\Omega} d\Omega = \sum_{\alpha} \frac{C_{\alpha}^2}{m \omega_{\alpha}}$$

а другая ее часть K_1^R зависит от частоты

$$K_1^R(\omega) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{J(\Omega)}{\Omega} \frac{\omega^2}{\Omega^2 - (\omega + i\delta)^2} d\Omega$$

так что $K^R(\omega) = K_0 + K_1^R(\omega)$. Для $J(\Omega) = \eta \Omega$ имеем

$$K_1^R(\omega) = i\omega\eta \quad \text{и} \quad K^R(\omega) = K_0 + i\omega\eta$$

Выполняя обратное фурье-преобразование, находим временное представление для функции отклика

$$K^R(t) = K_0 \delta(t) - \eta \delta'(t)$$

Подставим далее $K^R(t)$ в уравнение движения для частицы и вычислим интегралы

$$M\ddot{q} + U'_0(q) = K_0 \gamma'(q_t) \int_{-\infty}^{\infty} \delta(t-s) \gamma(q_s) ds -$$

$$- \eta \gamma'(q_t) \int_{-\infty}^{\infty} \delta'(t-s) \gamma(q_s) ds + f(t) = K_0 \gamma'(q) \gamma(q) - \eta \gamma'^2(q) \dot{q}(t) + f(t)$$

Это уравнение мы запишем в форме уравнения Ланжевена с нелинейным коэффициентом трения $\mu(q)$ и силой трения, пропорциональной скорости частицы $\dot{q}$

$$M\ddot{q} + \mu(q) \dot{q} + U'(q) = f(t) \quad \text{и} \quad \begin{cases} U(q) = U_0(q) - \frac{1}{2} K_0 \gamma^2(q) \\ \mu(q) = \eta \left(\frac{\partial \gamma(q)}{\partial q} \right)^2 \end{cases}$$

Взаимодействие частицы со средой ведет к перенормировке потенциальной энергии частицы $U_0(q) \rightarrow U(q)$, к возникновению силы трения и к появлению случайной силы $f(t)$. Коэффициент трения $\mu(q)$ и вершина взаимодействия $\gamma(q)$ однозначно связаны друг с другом.

БРМ-31. Macroscopic quantum tunneling

Преодоление частицей потенциального барьера (рис. 2.1), отделяющего метастабильное состояние с локальным минимумом энергии от состояния с более низкой энергией, при низких температурах происходит с помощью квантового туннелирования, а при высоких температурах барьер преодолевается классически, термоактивационным способом. Пусть потенциальный барьер удовлетворяет условию квазиклассичности и вероятность туннелирования из потенциальной ямы настолько мала, что частица успевает прийти в термодинамическое равновесие, определяемое температурой T , пока она находится в классически доступной области потенциала.

Рис. 2.1. Потенциальный рельеф

Найти зависимость скорости распада $\Gamma = \Gamma(T)$ метастабильного состояния с экспоненциальной точностью. Выразить ответ через экстремаль для движения частицы в инвертированном потенциале $\tilde{U}(q) = -U(q)$ на оси мнимого времени τ . Определить температуру перехода T_q от квантового режима распада метастабильного состояния к классическому термоактивационному режиму. Масса частицы равна M .

Solution

Пусть частица находится на уровне с энергией $E = E_n$. Поскольку предполагается условие квазиклассичности, то мы можем воспользоваться экспоненциальным приближением для скорости туннелирования

$$\Gamma(E) = \nu(E) e^{-A(E)/\hbar}$$

где $\nu(E)$ - частота попыток туннелирования, а экспонента дается формулой ВКБ

$$A(E) = 2 \int_{q_1}^{q_2} \sqrt{2M(U(q) - E)} dq \equiv \oint \sqrt{2M(U(q) - E)} dq$$

Точки $q_1 = q_1(E)$ и $q_2 = q_2(E)$ - точки входа под барьер и выхода из под него. Условие квазиклассичности $A(E) \gg \hbar$ также предполагает большое число уровней в потенциальной яме. Запишем $A(E)$ как

$$A(E) = \oint \sqrt{2M(\tilde{E} - \tilde{U}(q))} dq$$

где $\tilde{E} = -E$ и инвертированный потенциал $\tilde{U}(q) = -U(q)$. Последнее соотношение для $A(E)$ можно трактовать как движение классической частицы в инвертированном потенциале $\tilde{U}(q)$ (рис. 3.10).

Пусть частица, которая ограничена движением в потенциальной яме, находится в тепловом равновесии при температуре T . Тогда вероятность того, что частица находится на уровне с энергией $E = E_n$, определяется распределением Гиббса

$$w(E_n) = Z^{-1} e^{-\beta E_n}, \quad Z = \sum_n e^{-\beta E_n}, \quad \beta = 1/T$$

Вероятность или скорость распада $\Gamma(T)$ определяется следующей суммой по уровням

$$\begin{aligned} \Gamma(T) &= \frac{1}{Z} \sum_n \Gamma(E_n) e^{-\beta E_n} = \frac{1}{Z} \int dE g(E) \nu(E) e^{-\frac{A(E)}{\hbar} - \beta E} = \\ &= \frac{1}{Z} \int dE g(E) \nu(E) e^{-S(E)/\hbar} \end{aligned}$$

где $g(E) = \sum_n \delta(E - E_n)$ - плотность состояний и $S(E) = A(E) + \hbar\beta E$.

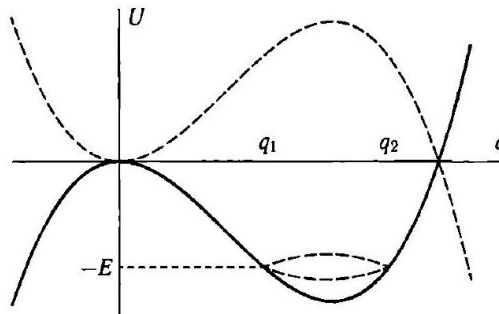


Рис. 3.10. Периодическая траектория в инвертированном (сплошная линия) потенциале $\tilde{U} = -U(q)$. Точки q_1 и q_2 - точки поворота, отвечающие движению под барьером при энергии $E^* = -E$

Основной вклад в интеграл в силу его экспоненциального характера вносит стационарная точка $E = E^*$, где производная $\partial S(E)/\partial E = 0$. Это приводит к следующему уравнению

$$\hbar\beta = -\frac{\partial A}{\partial E} = \frac{\partial A}{\partial \tilde{E}} = \oint dq \sqrt{\frac{M}{2(\tilde{E} - \tilde{U}(q))}} = \tau(\tilde{E})$$

Последний интеграл есть в точности период движения классической частицы в инвертированном потенциале $\tilde{U}(q)$, если она имеет энергию $\tilde{E}$. Другими словами, необходимый период движения должен быть равен обратной температуре с точностью до постоянной Планка

$$\tau(E^*) = \hbar\beta = \hbar/T$$

По существу это условие представляет собой оптимальное сочетание термоактивации с квантовым туннелированием. Соответственно, скорость распада метастабильного состояния $\Gamma = \Gamma(T)$ с экспоненциальной точностью определится значением $S(E)$ при $E = E^*$

$$\Gamma(T) \sim \exp(-S(E^*)/\hbar)$$

Посмотрим на ответ с другой точки зрения. Представим $S(E)$ в следующем виде:

$$S(E) = A(E) + \hbar\beta E = \oint \sqrt{2M(\tilde{E} - \tilde{U}(q))} dq - \int_{-\hbar\beta/2}^{\hbar\beta/2} \tilde{E} d\tau$$

Первый член в этом выражении иногда называют укороченным действием. Интегрирование по параметру τ , имеющему смысл времени, можно выбрать и в пределах отрезка $[0, \hbar\beta]$. Последнему соотношению можно придать смысл некоторого действия $S_{\text{eff}}[q_\tau, \dot{q}_\tau]$ с евклидовым лагранжианом L_E

$$\begin{aligned} S_{\text{eff}}[q(\tau), \dot{q}(\tau)] &= \int_{-\hbar\beta/2}^{\hbar\beta/2} L_E[q(\tau), \dot{q}(\tau)] d\tau = \\ &= \int_{-\hbar\beta/2}^{\hbar\beta/2} \left[\frac{M}{2} \left(\frac{dq}{d\tau} \right)^2 - \tilde{U}(q) \right] d\tau \equiv \int_{q(-\hbar\beta/2)=q(\hbar\beta/2)} \left[\frac{M}{2} \left(\frac{dq}{d\tau} \right)^2 + U(q) \right] d\tau \end{aligned}$$

Таким образом, чтобы найти экспоненту $S[E^*]$ в выражении для скорости распада, можно вычислить значение действия $S_{\text{eff}}[q_\tau, \dot{q}_\tau]$ на замкнутой траектории, период которой $\tau(E)$ равен $\hbar/T$. Действие $S_{\text{eff}}[q_\tau, \dot{q}_\tau]$ называют эффективным или реже евклидовым действием, а параметр τ - мнимым временем. Действительно, если мы сделаем преобразование $\tau = it$, называемое виковским поворотом, то найдем следующие соотношения между эффективным действием и обычным действием:

$$\begin{aligned} S_{\text{eff}} &= \int \left[\frac{M}{2} \left(\frac{dq}{d\tau} \right)^2 + U(q) \right] d\tau \xrightarrow{\tau=it} -i \int \left[\frac{M}{2} \left(\frac{dq}{dt} \right)^2 - U(q) \right] dt = -iS, \\ e^{iS/\hbar} &\xrightarrow{t=-i\tau} e^{-S_{\text{eff}}/\hbar}. \end{aligned}$$

Напомним, что амплитуда перехода в квантовой механике пропорциональна $\exp(iS/\hbar)$. С этой точки зрения движение частицы под потенциальным барьером можно трактовать как движение классической частицы по оси мнимого времени τ на отрезке длиной $\hbar/T$ в инвертированном потенциале $\tilde{U}$.

Температурная зависимость скорости распада $\Gamma(T)$ определяется поведением периода движения $\tau(E)$ в инвертированном потенциале $\tilde{U}(q)$. Для потенциала, который имеет гладкое поведение в точках локального минимума $q = 0$ и максимума $q = q_0$, отвечающего высоте барьера $U_0 = U(q_0)$, период движения меняется в пределах от $\tau(E = 0) = \infty$ при $E = 0$ до минимального значения $\tau(E = U_0) = 2\pi/\omega_0$, где $\omega_0 = (|U''(q_0)|/M)^{1/2}$. Соответственно, при температурах $T > T_q = \hbar\omega_0/2\pi$ нетривиальных периодических траекторий в инвертированном потенциале не существует. Имеется только одна тривиальная траектория, называемая классической, $q(\tau) \equiv q_0$, которая удовлетворяет условию периодичности $q(-\hbar\beta/2) = q(\hbar\beta/2)$ и экстремальности. Поскольку для этой траектории $\dot{q}(\tau) = 0$, то экстремальное значение эффективного действия на классической траектории очевидно и равно классической экспоненте с точностью до постоянной Планка $\hbar$

$$S(E^*) = \hbar U(q_0)/T = \hbar U_0/T$$

В результате при температурах $T > T_q$ распад метастабильного состояния будет происходить классическим термоактивационным способом, следуя закону Аррениуса

$$\Gamma(T) \sim e^{-U_0/T}, \quad T > T_q = \hbar(|U''(q_0)|/M)^{1/2}/2\pi$$

При температуре $T = T_q$, которая определяется кривизной потенциального барьера, происходит переход к квантовому режиму распада. Вероятность квантового распада уменьшается с понижением температуры, достигая минимального значения при нулевой температуре

$$\Gamma(0) \sim \exp \left(-\frac{2}{\hbar} \int_0^{q_c} \sqrt{2MU(q)} dq \right)$$

Здесь q_c - точка выхода частицы из под барьера при $E = 0$, определяемая условием $U(q_c) = 0$.

БРМ-32. Macroscopic quantum tunneling

Движение частицы в результате ее взаимодействия с диссипативной внешней средой подчиняется уравнению

$$M\ddot{q} + \mu(q)\dot{q} + U'(q) = f(t)$$

с силой трения, пропорциональной скорости частицы $\dot{q}$, и коэффициентом трения $\mu(q)$. Частица находится в метастабильном состоянии, отделенном от основного состояния с меньшей энергией потенциальным барьером. Сила трения влияет на вероятность туннелирования через потенциальный барьер и на скорость распада метастабильного состояния. Внешнюю диссипативную среду можно промоделировать бесконечным набором фононов $\{\alpha\}$, т. е. осцилляторов с частотами ω_α , и описать гамильтонианом

$$H_{\text{cp}} = \sum_{\alpha} \left(\frac{m\dot{x}_{\alpha}^2}{2} + \frac{m\omega_{\alpha}^2 x_{\alpha}^2}{2} \right)$$

Частица массой M находится в потенциале $U_0(q)$ и взаимодействует со средой, согласно

$$U_{\text{int}} = \sum_{\alpha} \gamma(q) C_{\alpha} x_{\alpha}$$

где C_{α} - константа взаимодействия. Спектральная плотность колебаний вводится соотношением

$$J(\Omega) = \frac{\pi}{2} \sum_{\alpha} \frac{C_{\alpha}^2}{m\omega_{\alpha}} \delta(\Omega - \omega_{\alpha}) = \eta\Omega \quad (\eta > 0).$$

Пусть частица находится в потенциальной яме в метастабильном состоянии, которое отделено от основного состояния потенциальным барьером. Известно, что сила трения влияет на вероятность туннелирования через потенциальный барьер и, соответственно, на скорость распада метастабильного состояния. Туннелирование в условиях, когда в физической системе присутствует диссипация энергии, называется макроскопическим квантовым туннелированием.

Пользуясь результатами предыдущих задач и представлениями о квантовом туннелировании как о движении частицы в мнимом времени τ , определить эффективное действие $S_{\text{eff}}[q(\tau)]$ и найти с экспоненциальной точностью вероятность распада метастабильного состояния $\Gamma(T)$ в диссипативной среде. Оценить температуру T_q перехода с классического термоактивационного режима распада на квантовый режим. Потенциальный барьер удовлетворяет условию квазиклассичности и вероятность туннелирования из потенциальной ямы настолько мала, что частица в яме находится в термодинамическом равновесии со средой при температуре T .

32.

Для системы частица + среда мы запишем эффективное действие S_{eff} , заданное на мнимом времени τ в интервале $[-\hbar\beta/2, \hbar\beta/2]$, где $\beta = 1/T$ - обратная температура,

$$S_{\text{elf}} = \int \left[\frac{M\dot{q}_{\tau}^2}{2} + U_0(q_{\tau}) + \sum_{\alpha} \left(\frac{m\dot{x}_{\alpha}^2}{2} + \frac{m\omega_{\alpha}^2 x_{\alpha}^2}{2} \right) + \gamma(q_{\tau}) \sum_{\alpha} C_{\alpha} x_{\alpha} \right] d\tau$$

Для анализа вероятности туннелирования нам необходимо найти экстремальное значение эффективного действия на траекториях частицы и

фононов, которые имеют период $\hbar\beta$. Экстремальные траектории частицы и фононов удовлетворяют уравнениям

$$\delta S_{\text{eff}}/\delta q(\tau) = -M\ddot{q} + U'_0(q) + \gamma'(q) \sum_{\alpha} C_{\alpha} x_{\alpha} = 0$$

$$\delta S_{\text{eff}}/\delta x_{\alpha}(\tau) = -m\ddot{x}_{\alpha} + m\omega_{\alpha}^2 x_{\alpha} + \gamma(q_{\tau}) C_{\alpha} = 0$$

Поскольку рассматриваются периодические во времени траектории, то удобно воспользоваться разложением траекторий в ряд Фурье

$$x_\alpha(\tau) = \frac{T}{\hbar} \sum_n x_{\alpha n} e^{-i\omega_n \tau}, \quad \omega_n = 2\pi n T / \hbar, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

$$x_{\alpha n} = \int_{-\hbar/2T}^{\hbar/2T} x_\alpha(\tau) e^{i\omega_n \tau} d\tau$$

где частоты ω_n называются мацубаровскими частотами. Тогда решение для фоновой траектории $x_\alpha(\tau)$ можно представить в виде

$$x_\alpha(\tau) = C_\alpha \int_{-\hbar/2T}^{\hbar/2T} \mathcal{K}_\alpha(\tau - s) \gamma(q_s) ds$$

где фурье-гармоника мацубаровской функции отклика $\mathcal{K}_\alpha(\tau)$ определяется соотношением

$$\mathcal{K}_\alpha(\omega_n) = \int_{-\hbar/2T}^{\hbar/2T} \mathcal{K}_\alpha(\tau) e^{i\omega_n \tau} d\tau = -\frac{1}{m(\omega_\alpha^2 + |\omega_n|^2)}$$

Далее найдем эффективное уравнение, которому подчиняется движение частицы

$$-M\ddot{q} + U'_0(q) - \gamma'(q_r) \int_{-\hbar/2T}^{\hbar/2T} \mathcal{K}(\tau - s) \gamma(q_s) ds = 0$$

Здесь мы ввели полную функцию отклика $\mathcal{K}(\tau)$

$$\mathcal{K}(\tau) = -\sum_\alpha C_\alpha^2 \mathcal{K}_\alpha(\tau)$$

которая имеет следующую фурье-гармонику

$$\mathcal{K}(\omega_n) = \sum_\alpha \frac{C_\alpha^2}{m(\omega_\alpha^2 + |\omega_n|^2)} \equiv \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \frac{\Omega}{\Omega^2 + |\omega_n|^2} J(\Omega) d\Omega$$

Затем из мацубаровской функции отклика $\mathcal{K}(\omega_n)$ мы выделяем частотно-независимую часть $K_0 = \mathcal{K}(\omega_n = 0)$

$$K_0 = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \frac{J(\Omega)}{\Omega} d\Omega = \sum_\alpha \frac{C_\alpha^2}{m\omega_\alpha}$$

и частотно-зависимую часть $\mathcal{K}_1(\omega_n)$ так, что $\mathcal{K}(\omega_n) = K_0 + \mathcal{K}_1(\omega_n)$ и

$$\mathcal{K}_1(\omega_n) = -\frac{2}{\pi} \int_0^\infty \frac{J(\Omega)}{\Omega} \frac{|\omega_n|^2}{\Omega^2 + |\omega_n|^2} d\Omega \Big|_{J=\eta\Omega} = -\eta |\omega_n|$$

Сравним мацубаровскую функцию отклика $\mathcal{K}(\omega_n)$ с запаздывающим откликом $K^R(\omega)$. Видно, что статические части откликов полностью совпадают, а динамические части также связаны друг с другом. В целом, мы обнаруживаем следующую общую связь между мацубаровским и запаздывающим откликами

$$\mathcal{K}(\omega_n) = K^R(\omega = i|\omega_n|)$$

Отметим, что запаздывающий отклик также веществен на положительной части мнимой оси комплексной переменной ω .

Чтобы найти временное поведение мацубаровского отклика $\mathcal{K}(\tau)$, мы выполним обратное преобразование функции $\mathcal{K}(\omega_n) = K_0 - \eta |\omega_n|$. Очевидно, что

$$\mathcal{K}(\tau) = K_0 \delta(\tau) + \mathcal{K}_1(\tau)$$

Вычисление $\mathcal{K}_1(\tau)$ рассмотрим отдельно:

$$\begin{aligned} \mathcal{K}_1(\tau) &= -\eta \frac{T}{\hbar} \sum_n |\omega_n| e^{-i\omega_n \tau} = -\eta \frac{iT}{\hbar} \frac{\partial}{\partial \tau} \sum_n \text{sgn}(\omega_n) e^{-i\omega_n \tau} = \\ &= -\eta \frac{iT}{\hbar} \frac{\partial}{\partial \tau} \left(\sum_{n=0}^\infty e^{-i\omega_n \tau} - \sum_{n=0}^\infty e^{i\omega_n \tau} \right) \end{aligned}$$

С математической точки зрения $\mathcal{K}_1(\tau)$ представляет собой обобщенную функцию. Для ее регуляризации можно добавить к τ в показателе экспоненты бесконечно малую часть $\pm i\delta$, чтобы иметь сходящиеся ряды. Для краткости мы бесконечно малую часть ниже будем опускать. Суммирование двух геометрических прогрессий дает

$$\begin{aligned}\mathcal{K}_1(\tau) &= -\eta \frac{iT}{\hbar} \frac{\partial}{\partial \tau} \left(\frac{1}{1 - e^{-2\pi iT\tau/\hbar}} - \frac{1}{1 - e^{2\pi iT\tau/\hbar}} \right) = \\ &= -\eta \frac{T}{\hbar} \frac{\partial}{\partial \tau} \operatorname{ctg} \left(\frac{\pi T\tau}{\hbar} \right) = \eta \frac{1}{\pi} \frac{(\pi T/\hbar)^2}{\sin^2(\pi T\tau/\hbar)}\end{aligned}$$

Вернемся к эффективному уравнению движения частицы, возникающего в результате исключения переменных среды x_α

$$\begin{aligned}\frac{\delta S_{\text{eif}}}{\delta q_\tau} &= -M\ddot{q} + U'_0(q) - \gamma'(q_\tau) \int_{-\hbar/2T}^{\hbar/2\tau} [K_0\delta(\tau-s) + \mathcal{K}_1(\tau-s)] \gamma(q_s) ds = \\ &= -M\ddot{q} + U'(q) - \gamma'(q_\tau) \int_{-\hbar/2T}^{\hbar/2T} \mathcal{K}_1(\tau-s) \gamma(q_s) ds = 0.\end{aligned}$$

Здесь через $U(q) = U_0(q) - K_0\gamma^2(q)/2$ мы обозначали перенормированный потенциал, который является результатом взаимодействия частицы со средой и в котором движется частица.

Найденное уравнение представляет вариацию эффективного действия частицы,

$$S_{\text{eff}}[q_\tau] = \int_{-\hbar/2T}^{\hbar/2T} \left(\frac{M\dot{q}_\tau^2}{2} + U(q_\tau) \right) d\tau - \frac{1}{2} \int_{-\hbar/2T}^{\hbar/2T} \int_{-\hbar/2T}^{\hbar/2T} d\tau ds \gamma(q_\tau) \mathcal{K}_1(\tau-s) \gamma(q_s)$$

в котором переменные среды удалось полностью исключить. Учитывая особое поведение $\mathcal{K}_1(\tau-s)$ в точке $\tau = s$, мы преобразуем второй интеграл к более удобному виду, в котором эта особенность не проявляется. Запишем

$$\begin{aligned}-2 \iint d\tau ds \gamma_\tau \mathcal{K}_1(\tau-s) \gamma_s &= \iint d\tau ds (\gamma_\tau - \gamma_s)^2 \mathcal{K}_1(\tau-s) - \\ &- \iint d\tau ds \gamma_\tau^2 \mathcal{K}_1(\tau-s) - \iint d\tau ds \gamma_s^2 \mathcal{K}_1(\tau-s) = \iint d\tau ds (\gamma_\tau - \gamma_s)^2 \mathcal{K}_1(\tau-s).\end{aligned}$$

Здесь при переходе к последнему равенству мы воспользовались тем, что два последних интеграла обращаются в нуль, поскольку имеет место интегрирование периодической функции по ее полному периоду, приводящее к нулевой фурье-компоненте. Действительно, например,

$$\int_{-\hbar/2T}^{\hbar/2T} ds \mathcal{K}_1(\tau-s) = \int_{-\hbar/2T}^{\hbar/2T} ds \mathcal{K}_1(s) = \mathcal{K}_1(\omega_n = 0) \equiv 0$$

Учитывая это равенство и явный вид $\mathcal{K}_1$, мы приходим к эффективному действию для частицы в форме

$$\begin{aligned}S_{\text{erf}}[q_T] &= \int_{-\hbar/2T}^{\hbar/2T} \left(\frac{M\dot{q}_\tau^2}{2} + U(q_\tau) \right) d\tau + \\ &+ \frac{\eta}{4\pi} \int_{-\hbar/2T}^{\hbar/2T} \int_{-\hbar/2T}^{\hbar/2T} [\gamma(q_\tau) - \gamma(q_s)]^2 \frac{(\pi T/\hbar)^2}{\sin^2[\pi T(\tau-s)/\hbar]} d\tau ds\end{aligned}$$

в которой особенность знаменателя в точке $\tau = s$ компенсируется занулением в той же точке числителя.

Как мы видели из предыдущих задач, между коэффициентом трения $\mu(q)$ и вершиной взаимодействия $\gamma(q)$ имеется простая связь

$$\mu(q) = \eta \left(\frac{\partial \gamma(q)}{\partial q} \right)^2 = (\sqrt{\eta} \gamma'(q))^2$$

с учетом которой удобно ввести множитель $\eta^{1/2}$ в определение $\gamma(q)$ согласно $\eta^{1/2}\gamma \rightarrow \gamma$. Тогда эффективное действие, которое соответствует движению частицы массой M в классически доступной области потенциала $U(q)$ с коэффициентом трения $\mu(q)$, примет вид

$$S_{\text{eII}}[q_\tau] = \int_{-\hbar/2T}^{\hbar/2T} \left(\frac{M\dot{q}_\tau^2}{2} + U(q_\tau) \right) d\tau + \\ + \frac{1}{4\pi} \int_{-\hbar/2T}^{\hbar/2T} \int_0^2 [\gamma(q_\tau) - \gamma(q_s)]^2 \frac{(\pi T/\hbar)^2}{\sin^2[\pi T(\tau-s)/\hbar]} d\tau ds.$$

Вершина $\gamma(q)$ определяется коэффициентом трения $\mu(q)$ из следующего соотношения:

$$\mu(q) = \gamma'^2(q) \quad \text{или} \quad \gamma(q) = \int^q \mu^{1/2} dq$$

Если $\mu(q) \sim q^k$, то $\gamma \sim q^{(k+2)/2}$. В важном случае омического $k = 0$ трения имеем $\gamma = \sqrt{\mu}q$.

Для нахождения скорости распада метастабильного состояния $\Gamma(T) \sim \exp(-A)$ мы должны найти минимальное значение $A = S_{\text{eII}}/\hbar$, вычисленное на периодической траектории $q(-\hbar/2T) = q(\hbar/2T)$. Из положительной определенности члена с трением сразу видно, что наличие диссипации в среде приводит к уменьшению вероятности квантового туннелирования и скорости распада метастабильного состояния.

Оценим вклад члена с трением в вероятность распада при $T = 0$. Пусть характерный размер барьера q_c (рис. 3.11) и характерное время движения под барьером τ_c . Тогда интеграл с трением по порядку величины примерно равен

$$S_\mu \sim \gamma^2(q_c) \frac{1}{\tau_c^2} \tau_c^2 \sim \gamma^2(q_c) \sim \frac{\gamma^2(q_c)}{q_c^2} q_c^2 \sim \gamma'^2(q_c) q_c^2 \sim \mu(q_c) q_c^2$$

Если ввести характерную скорость движения под барьером как $\dot{q}_c \sim q_c/\tau_c$, то последнему выражению можно придать смысл работы силы трения

или диссипированной энергии под барьером $[\mu(q_c) \dot{q}_c] q_c$, умноженной на время туннелирования τ_c .

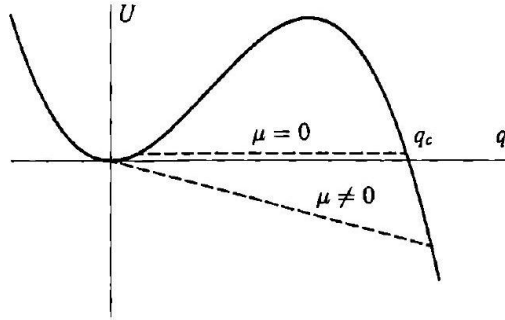


Рис. 3.11. Пунктиром показаны экстремальные траектории туннелирования частицы при $T = 0$ в бездиссипативной $\mu = 0$ и в диссипативной $\mu \neq 0$ средах. В диссипативном случае энергия частицы не сохраняется и точка выхода из барьера лежит правее q_c . Потери энергии частицы при туннелировании компенсируются меньшим значением потенциальной энергии, при которой выходит частица.

В целом, величину эффективного действия можно оценить как сумму бездиссипативного слагаемого S_0 при $\gamma = 0$ и диссипативного слагаемого S_μ . Тогда будем иметь

$$\Gamma(T) \sim \exp(-A), \quad \text{где} \quad A \sim \frac{S_0 + S_\mu}{\hbar}$$

При высоких температурах минимальный экстремум действия реализуется на классической стационарной траектории $q(\tau) = q_0$, где значение q_0 , соответствующее производной $U'(q_0) = 0$, отвечает максимуму потенциального барьера высотой U_0 . Классическая траектория дает аррениусовский ответ

$$S_{\text{eff}} = \frac{\hbar U_0}{T} \quad \text{и} \quad A = \frac{S_{\text{eff}}}{\hbar} = \frac{U_0}{T}.$$

Сравнивая показатели экспонент в этих двух случаях, мы получим оценку

$$T_q \sim \frac{\hbar U_0}{S_0 + S_\mu}$$

для температуры перехода с квантового режима распада на классический. Диссипация в среде уменьшает температурную область квантового распада.

БРМ-33. Macroscopic quantum tunneling

Частица массой M находится в потенциальной яме, образованной кубической параболой

$$U(q) = \frac{1}{2} M \omega^2 q^2 \left(1 - \frac{q}{q_c} \right).$$

Коэффициент трения μ очень велик, так что $\mu \gg M\omega$, и силы трения много больше сил инерции. Движение частицы в классически доступной области представляет собой аperiодическое затухание, отвечающее уравнению

$$\mu \dot{q} + U'(q) = 0.$$

Найти с экспоненциальной точностью скорость распада метастабильного состояния $\Gamma(T)$ в зависимости от температуры.

33.

Запишем на мнимом времени τ эффективное действие S_{eff} , которое соответствует уравнению движения частицы $\mu \dot{q}_t + U'(q_t) = 0$ в реальном времени t :

$$S_{\text{eff}}[q_\tau] = \int_{-\hbar/2T}^{\hbar/2T} \frac{M\omega^2 q_\tau^2}{2} \left(1 - \frac{q_\tau}{q_c} \right) d\tau - \frac{\mu}{2\pi} \int_{-\hbar/2T}^{\hbar/2T} \int_{-in}^{\hbar/2T} \gamma(q_\tau) \frac{(\pi T/\hbar)^2}{\sin^2[\pi T(\tau-s)/\hbar]} \gamma(q_s) d\tau ds$$

Чтобы найти вероятность распада $\Gamma(T) \sim \exp(-A)$ с экспоненциальной точностью, нам необходимо найти экстремальное значение S_{eff} для замкнутой симметричной траектории $q(-\hbar/2T) = q(\hbar/2T)$. При этом $A = S_{\text{eff}}/\hbar$. Решение удобнее провести с помощью разложения траектории $q(\tau)$ в ряд Фурье по мацубаровским частотам $\omega_n = 2\pi n T/\hbar$:

$$q(\tau) = \frac{T}{\hbar} \sum_n q_n e^{i\omega_n \tau} \quad (n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots)$$

Подставляя это разложение в выражение для действия, мы получим $S_{\text{eff}}[q_n] = \frac{T}{\hbar} \sum_n \frac{M\omega^2}{2} q_n q_{-n} - \left(\frac{T}{\hbar}\right)^2 \sum_{n,m} \frac{M\omega^2}{2q_c} q_n q_m q_{-(m+n)} + \frac{\mu T}{2\hbar} \sum_n |\omega_n| q_n q_{-n}$.

Так как $q(\tau)$ - действительная функция и экстремальную траекторию удобно выбрать четной функцией времени $q(\tau) = q(-\tau)$, то коэффициенты разложения q_n обладают симметричным свойством $q_{-n} = q_n$. Варьируя S_{eff} по q_n , мы найдем уравнение, определяющее экстремальную траекторию

$$\frac{\delta S_{\text{eff}}}{\delta q_n} = M\omega^2 q_n - \frac{3}{2} \frac{M\omega^2 T}{q_c} \sum_m q_m q_{m+n} + \mu |\omega_n| q_n = 0$$

Решение ищем в виде $q_n = B \exp(-b|n|)$. Пользуясь тем, что

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{-b|m+n|} e^{-b|m|} = (|n| + \text{cth } b) e^{-b|n|} \quad (b > 0)$$

получим простое уравнение для определения неизвестных B и b

$$M\omega^2 - \frac{3}{2} \frac{M\omega^2 T}{q_c} B(|n| + \text{cth } b) + 2\pi\mu \frac{T}{\hbar} |n| = 0$$

Затем отсюда находим, что

$$B = \frac{4\pi\mu q_c}{3M\omega^2} = \frac{2}{3} q_c \frac{\hbar}{T_q} \quad \left(T_q = \frac{\hbar M\omega^2}{2\pi\mu} \right)$$

$$\text{cth } b = \frac{\hbar M\omega^2}{2\pi\mu T} = \frac{T_q}{T}$$

Из решения видно, что при температуре $T = T_q$ параметр b обращается в бесконечность. Это означает, что все гармоники с $n \neq 0$ обращаются в нуль и $q(\tau) \equiv B T_q/\hbar = 2q_c/3 = q_0$. Точка q_0 отвечает точке, в которой потенциальный барьер достигает максимального значения U_0

$$U_0 = U(q_0) = \frac{2M\omega^2 q_c^2}{27}, \quad q_0 = \frac{2}{3} q_c$$

Таким образом, при температурах $T \geq T_q$ не существует траекторий, нетривиально зависящих от времени, а имеется только одна классическая траектория $q(\tau) \equiv q_0$ с $S_{\text{eff}} = \hbar U_0/T$.

Перейдем к вычислению экстремального значения S_{eff} . Нам дополнительно понадобится знание еще двух сумм

$$\sum_n e^{-2b|n|} = \text{cth } b \quad \text{и} \quad \sum_n |n| e^{-2b|n|} = \frac{1}{2} (\text{cth}^2 b - 1)$$

Подставляя решение $q_n = B \exp(-b|n|)$ в $S_{\text{eff}} [q_n]$, получим

$$\begin{aligned} S_{\text{eff}} &= \frac{T}{\hbar} B^2 \left[\frac{M\omega^2}{2} \text{cth } b - B \frac{T}{\hbar} \frac{M\omega^2}{2q_c} \frac{3 \text{cth}^2 b - 1}{2} + \frac{\pi\mu T}{\hbar} \frac{\text{cth}^2 b - 1}{2} \right] = \\ &= \frac{\pi\mu T^2 B^2}{2\hbar^2} \left(\text{cth}^2 b - \frac{1}{3} \right) = \frac{2\pi\mu q_c^2}{9} \left(1 - \frac{1}{3} \frac{T^2}{T_q^2} \right) = \frac{3}{2} \frac{\hbar U_0}{T_q} \left(1 - \frac{1}{3} \frac{T^2}{T_q^2} \right) \end{aligned}$$

Окончательно для экспоненты A в выражении для скорости распада имеем

$$A = A(T) = \begin{cases} \frac{3}{2} \frac{U_0}{T_q} \left(1 - \frac{1}{3} \frac{T^2}{T_q^2} \right), & T < T_q \\ \frac{U_0}{T}, & T > T_q \end{cases}$$

При температуре T_q происходит переход от квантового режима распада к классическому термоактивационному режиму, описываемый формулой Аррениуса.

В заключение найдем явный вид экстремальной траектории

$$\begin{aligned} q(\tau) &= \frac{BT}{\hbar} \sum_n e^{-b|n|} e^{2\pi i n T \tau / \hbar} = \frac{2q_c}{3} \frac{T}{T_q} \frac{1 - e^{-2b}}{1 - 2e^{-2b} \cos(2\pi T \tau / \hbar) + e^{-2b}} = \\ &= \frac{2q_c}{3} \frac{(1 - e^{-2b}) \text{th } b}{1 - 2e^{-b} \cos(2\pi T \tau / \hbar) + e^{-2b}} \end{aligned}$$

^

Поведение при нулевой $T = 0$ температуре можно получить, раскладывая экспоненты, тангенс и косинус в пределе малых аргументов:

$$q(\tau) = q_c \frac{4/3}{1 + (2\pi T_q \tau / \hbar)^2}$$

Отметим, что точка выхода из под барьера $q = 4q_c/3$ при наличии диссипации в среде лежит дальше обычной точки выхода $q = q_c$ в условиях бездиссипативного туннелирования.

BPM-34. Nucleation

Фазовый переход первого рода в конденсированной среде происходит путем возникновения зародышей стабильной фазы в метастабильной среде. Энергетически невыгодный эффект возникновения границы раздела между фазами компенсируется выигрышем в объемной энергии при достаточно большом размере зародыша. В результате тепловых гетерофазных флуктуаций возникает критический зародыш, который способен преодолеть потенциальный барьер.

Вблизи абсолютного нуля температур классический термоактивационный механизм не эффективен и распад метастабильной конденсированной среды обусловлен квантовыми гетерофазными флуктуациями, т. е. туннельным механизмом преодоления зародышем новой фазы потенциального барьера, отделяющего стабильное состояние системы от метастабильного. Квантовые явления, сопровождающие такой распад метастабильной конденсированной среды, получили название макроскопической квантовой нуклеации.

Физические системы, в которых существуют фазовые переходы первого рода и при нуле температуры, - это прежде всего гелиевые системы, в которых наблюдаются явления кристаллизации передавленного жидкого гелия, кавитации газовых пузырьков в жидкой фазе при отрицательных давлениях, фазового расслоения пересыщенных растворов изотопов гелия $^3\text{He} - ^4\text{He}$. Есть и более экзотические примеры такие как коллапс метастабильного конденсата в бозе-газе с притяжением или фазовый переход типа деконфайнмента с образованием кваркового вещества из ядерной материи в коре нейтронных звезд.

Итак, пусть в метастабильной жидкости плотностью ρ образуется сферический зародыш новой фазы радиусом R и плотностью $\rho' = \rho + \Delta\rho$ с энергией

$$U(R) = 4\pi\sigma R^2 - \frac{4\pi R^3}{3} \rho' \Delta\mu = 4\pi\sigma R^2 \left(1 - \frac{R}{R_c} \right),$$

где σ - поверхностное натяжение, $\Delta\mu > 0$ - разность термодинамических потенциалов, ответственная за степень неравновесности метастабильной фазы, и $R_c \sim 1/\Delta\mu$ - критический радиус зародыша. Определить кинетическую энергию зародыша $K(R, \dot{R})$, его эффективную массу $M(R)$ и найти с экспоненциальной точностью зависимость скорости распада метастабильной фазы $\Gamma(T) \sim \exp(-A)$ от ее температуры T . При решении воспользоваться приближениями макроскопического зародыша, его квазистационарного роста и бездиссипативной среды.

а) Считать, что метастабильная и стабильная фазы находятся достаточно близко к фазовому равновесию $\Delta\mu = 0$ и критический радиус зародыша R_c много больше межатомных расстояний, так что критический зародыш содержит большое число частиц, являясь макроскопическим образованием.

б) Считать жидкую фазу несжимаемой $\rho = \text{const}$, что оправдано при скоростях роста зародыша $\dot{R}(t)$ малых по сравнению со скоростью звука.

в) Пренебречь диссипативными процессами вязкости и теплопроводности, возникающими при росте зародыша новой фазы.

Solution (???)

Туннелирование как динамический процесс связан, прежде всего, с кинетической энергией частицы. Рост зародыша с плотностью $\rho' = \rho + \Delta\rho$, отличной от плотности окружающей его жидкости ρ , будет сопровождаться течением жидкости к зародышу или от него в зависимости от знака $\Delta\rho$, чтобы компенсировать разницу в плотностях фаз. Течение жидкости будет сопровождаться появлением кинетической энергией жидкости, дополнительной к энергии зародыша $U(R) = 4\pi\sigma R^2 (1 - R/R_c)$.

Итак, пусть радиус зародыша изменяется со временем как $R(t)$. Определим кинетическую энергию зародыша как кинетическую энергию всей жидкости

$$K = \frac{1}{2} \int \rho(\mathbf{r}) v^2(\mathbf{r}) d^3r$$

Чтобы определить распределение скоростей в несжимаемой жидкости, мы воспользуемся уравнениями непрерывности внутри и вне зародыша

$$\text{div } \mathbf{v}(\mathbf{r}) = 0 \quad \text{и} \quad \text{div } \mathbf{v}'(\mathbf{r}) = 0$$

В силу сферической симметрии зародыша распределение скоростей будет также сферически симметричным и мы сразу находим

$$\begin{aligned} v(r) &= v(R) \frac{R^2}{r^2}, \quad r > R(t), \\ v'(r) &= 0, \quad r < R(t). \end{aligned}$$

Как следствие несжимаемости новой фазы внутри зародыша скорость течения тождественно равна нулю, в противном случае мы бы имели неограниченную величину скорости в центре зародыша $r = 0$.

Чтобы определить скорость жидкости $v(R)$ на границе зародыша $r = R(t)$, мы воспользуемся условием непрерывности потока массы вещества через границу зародыша $r = R$, которая движется со скоростью $\dot{R}$,

$$\rho'(0 - \dot{R}) = \rho(v(R) - \dot{R})$$

Отсюда сразу найдем скорость жидкости на границе зародыша

$$v(R) = -\frac{\rho' - \rho}{\rho} \dot{R} = -\frac{\Delta\rho}{\rho} \dot{R}$$

и кинетическую энергию зародыша

$$K = \frac{1}{2} \int_{r>R(t)} \rho \left(-\frac{\Delta\rho}{\rho} \dot{R} \right)^2 \frac{R^4}{r^4} 4\pi r^2 dr = 4\pi \frac{(\Delta\rho)^2}{\rho} R^3 \frac{\dot{R}^2}{2} = M(R) \frac{\dot{R}^2}{2}$$

Здесь мы ввели массу зародыша $M(R) = 4\pi\rho_{\text{elf}}R^3$ с эффективной плотностью $\rho_{\text{eff}} = (\Delta\rho)^2/\rho$. В результате мы приходим к лагранжиану Рэ-лея-Плессе L , который описывает эволюцию зародыша

$$L(R, \dot{R}) = \frac{M(R)\dot{R}^2}{2} - U(R) = 4\pi\rho_{\text{erl}}R^3 \frac{\dot{R}^2}{2} - 4\pi\sigma R^2 \left(1 - \frac{R}{R_c} \right)$$

Чтобы найти вероятность образования критического зародыша или скорость распада метастабильного состояния жидкости, мы воспользуемся концепцией эффективного действия

$$S_{\text{eff}}[R(\tau)] = \int_{-\hbar/2T}^{\hbar/2T} \left(\frac{1}{2} M(R) \left(\frac{dR}{d\tau} \right)^2 + U(R) \right) d\tau$$

заданного на мнимом времени τ , и вычислим его экстремальное значение для периодической траектории $R(-\hbar/2T) = R(\hbar/2T)$.

Начнем с рассмотрения квантовой траектории. В отличие от туннелирования частиц с постоянной массой, где период движения может достигать бесконечной величины, в рассматриваемой задаче с переменной массой период движения остается всегда конечным даже для траектории, соответствующей дну потенциальной ямы с $E = 0$. Действительно, из уравнения

$$\frac{M(R)\dot{R}^2}{2} - U(R) = E = 0 \quad \text{или} \quad \left(\frac{dR}{d\tau}\right)^2 = \frac{2\sigma}{\rho_{\text{eff}} R} \left(1 - \frac{R}{R_c}\right)$$

находим следующий закон движения по траектории

$$\frac{|\tau(x)|}{\tau_c} = \frac{\pi}{2} - \arcsin \sqrt{x} + \sqrt{x(1-x)}$$

где обозначено $x = R/R_c$ и $\tau_c = \sqrt{M(R_c)/8\pi\sigma} = \sqrt{\rho_{\text{eff}} R_c^3/2\sigma}$. Период движения остается конечным и равен $\pi\tau_c$. Таким образом, пока температура T метастабильной жидкости остается достаточно малой, по крайней мере меньше, чем $\hbar/\pi\tau_c$, экстремальное значение эффективного действия достигается на границе возможного энергетического ин-

тервала при $E = 0$ и, следовательно, не зависит от температуры. Подстановка найденной зависимости $R(\tau)$ дает простой ответ

$$S_0 = 2 \int_0^{R_c} \sqrt{2M(R)U(R)} dR = \frac{5\sqrt{2}\pi^2}{16} \sqrt{\sigma\rho_{\text{eff}}} R_c^{7/2}, \quad T < \frac{\hbar}{\pi\tau_c}$$

С другой стороны всегда имеется классическая траектория $R(\tau) \equiv 2R_c/3$, которая соответствует экстремуму $U'(R) = 0$ и дает следующее экстремальное значение действия

$$S_{\text{кл}} = \frac{\hbar U_0}{T}, \quad U_0 = \frac{4}{27} 4\pi\sigma R_c^2$$

где U_0 - высота потенциального барьера. Нетрудно увидеть, что при температуре T_q

$$T_q = \frac{128}{135\pi} \hbar \left(\frac{2\sigma}{\rho_{\text{eff}} R_c^3} \right) = \frac{128}{135} \frac{\hbar}{\pi\tau_c} < \frac{\hbar}{\pi\tau_c}$$

сравниваются значения действия $S_{\text{eff}}(0)$ для квантовой траектории и $S_{\text{кл}}$ для классической траектории. Из этих двух возможных значений мы должны выбрать наименьшее. Поскольку оказалось, что период движения вдоль квантовой траектории $\pi\tau_c$ меньше, чем $\hbar/T_q$, то температура T_q и будет температурой перехода от термоактивационного режима распада к квантовому режиму. В результате для скорости распада метастабильной фазы с экспоненциальной точностью будем иметь

$$\Gamma(T) = B \exp(-A), \quad A(T) = \begin{cases} S_0/\hbar, & T < T_q \\ U_0/T, & T > T_q \end{cases}$$

На рис. 3.12 показано поведение экспоненты $A(T)$ в зависимости от температуры.

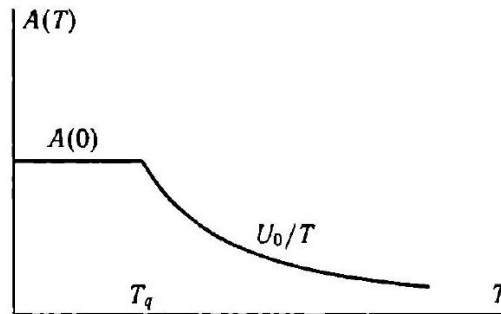


Рис. 3.12. Зависимость показателя экспоненты $A(T)$ от температуры

Предэкспоненциальный множитель B можно оценить как частоту попыток туннелирования ν , умноженную на число N возможных центров зародышеобразования в объеме V , т.е. как $B \sim \nu N$. Оценить частоту попыток или частоту гетерофазных флуктуаций можно по порядку величины как частоту движения в потенциале $U(R)$ при $R \ll R_c$ согласно уравнению

$$4\pi\rho_{\text{eff}} R^3 (\nu R)^2 \sim 4\pi\sigma R^2$$

Считая характерный пространственный масштаб гетерофазных флуктуаций R порядка нескольких межатомных расстояний a , оценим ν как

$$\nu \sim \sqrt{\frac{\sigma}{\rho_{\text{eff}} a^3}}$$

Число возможных центров нуклеации оцениваем как $N \sim V/(4\pi R_c^3/3)$.

35. При низких температурах длина пробега возбуждений $l(T)$ обычно быстро растет с понижением температуры и в зависимости от температуры возможен гидродинамический или баллистический режим роста зародыша. Вычисление скорости диссипации энергии зародыша $Q = -dE/dt$ в этих двух предельных случаях существенно различно. Начнем с более простого гидродинамического режима,

когда $R \gg l(T)$. В этом случае мы можем воспользоваться гидродинамической формулой для плотности диссипативной функции, проинтегрированной по всему объему системы

$$Q = Q_\eta + Q_\varkappa = \int \frac{\eta}{2} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_k} + \frac{\partial v_k}{\partial x_i} \right)^2 d^3r + \int \varkappa \frac{(\nabla T)^2}{T} d^3r.$$

Для вычисления вязкого вклада Q_η воспользуемся распределением скоростей $v(r)$, найденным в предыдущей задаче

$$v(r) = \begin{cases} -\frac{\Delta\rho}{\rho} \dot{R} \frac{R^2}{r^2} \frac{r}{r}, & r > R(t) \\ 0, & r < R(t) \end{cases}$$

В результате интегрирования получим

$$Q_\eta = 16\pi\eta \left(\frac{\Delta\rho}{\rho} \right)^2 R \dot{R}^2 = \mu_\eta(R) \dot{R}^2$$

Соответствующая сила сопротивления, замедляющая рост зародыша, аналогична силе Стокса для шара радиуса R , движущегося в вязкой жидкости со скоростью $v(R) = -(\Delta\rho/\rho)\dot{R}$.

Для вычисления теплопроводящего вклада, необходимо найти пространственное распределение температуры, которое становится неоднородным в результате ненулевой теплоты перехода $L(T)$. С этой целью воспользуемся уравнением переноса тепла для несжимаемой жидкости с теплоемкостью при постоянном давлении C_p

$$C_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + v \nabla T \right) = \varkappa \nabla^2 T + \frac{\eta}{2} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_k} + \frac{\partial v_k}{\partial x_i} \right)^2$$

которое мы решаем в пределе квазистационарного роста $\dot{R} \rightarrow 0$. Ожидая естественно, что вариация температуры δT пропорциональна скорости роста $\dot{R}$, все члены уравнения, кроме члена с $\nabla^2 T$, будут содержать члены, пропорциональные $\dot{R}^2$ или $\ddot{R}$ и которые более высокого порядка малости по скорости роста $\dot{R}$, и потому пренебрежимы. Таким образом, в первом приближении уравнение переноса тепла сводится к стационарному уравнению теплопроводности

$$\nabla^2 T = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial T}{\partial r} \right) = 0$$

которое с учетом сферической симметрии имеет общее решение

$$T(r) = \begin{cases} T + \delta T(t) \frac{R}{r}, & r > R(t) \\ T', & r < R(t) \end{cases}$$

Неизвестный скачок температуры $\delta T(t)$ на границе зародыша $r = R$ определим из условия непрерывности потока энергии через границу

$$(v' - \dot{R}) \rho' \left[\frac{(v' - \dot{R})^2}{2} + w' \right] + q' = (v - \dot{R}) \rho \left[\frac{(v - \dot{R})^2}{2} + w \right] + q$$

где величины со штрихом относятся к зародышу. Соответственно, $v' = 0, v = v(R), q$ и q' - диссипативные потоки тепла, и w' тепловые функции, отнесенные к единице массы. С учетом малости скоростей и $q' \sim \nabla T' = 0$ в линейном приближении по $\dot{R}$ получим

$$-\dot{R} \rho' w' = (v - \dot{R}) \rho w + q.$$

Используя условие непрерывности потока массы на границе зародыша: $-\rho' \dot{R} = \rho(v - \dot{R})$, мы найдем поток тепла на его границе $r = R$

$$q(r = R) = \rho' (w - w') \dot{R}.$$

Тепловая функция равна $w = \mu + Ts$, где μ - химический потенциал и s - энтропия. В разности $w - w' = (\mu - \mu') + (Ts - T's')$, чтобы оставаться в целом в рамках линейного приближения по $\dot{R}$, надо взять

значения химических потенциалов и энтропии при фазовом равновесии, т. е. при $\dot{R} \equiv 0$. Тогда, полагая $\mu' = \mu$ и $T' = T$, найдем

$$w - w' \approx T(s - s') = L,$$

где $L = L(T)$ - скрытая теплота перехода. Окончательно, поток тепла на границе зародыша равен

$$q(r = R) \approx \rho' L \dot{R}$$

В зависимости от знака L тепло отводится от растущего зародыша или подводится к зародышу. Величина потока пропорциональна скорости роста зародыша.

Теперь мы можем определить скачок температуры δT на границе зародыша. Из соотношения

$$q = -\kappa \nabla T = -\kappa \left(-\delta T \frac{R}{r^2} \right)_{r=R} = \frac{\kappa \delta T}{R} = \rho' L \dot{R}$$

находим δT , а затем распределение температуры

$$T(r) = \begin{cases} T + \frac{\rho' L}{\kappa} \frac{R^2}{r} \dot{R}, & r > R(t) \\ T, & r < R(t) \end{cases}$$

Выделение тепла при фазовом переходе $L > 0$ приводит к локальному повышению температуры вблизи растущего зародыша. Большая теплопроводность в окружающей его среде сглаживает этот эффект. Отрицательная теплота перехода $L < 0$, наоборот, ведет к локальному уменьшению температуры. Вычисление теплопроводящего вклада в скорость диссипации энергии теперь становится несложным

$$Q_\kappa = \int \kappa \frac{(\nabla T)^2}{T} d^3 r = 4\pi \frac{L^2}{\kappa T} R^3 \dot{R}^2 = \mu_\kappa(R) \dot{R}^2$$

Наличие вязкости и теплопроводности в метастабильной среде, окружающий зародыш, ведет к тому, что среда оказывает сопротивление, стремящееся замедлить рост зародыша. Энергия зародыша при этом диссипирует со скоростью

$$\frac{\partial E}{\partial t} = \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{R}} \dot{R} - L \right) = -\mu(R) \dot{R}^2, \quad \mu(R) = \mu_\eta(R) + \mu_\kappa(R)$$

и $L = L(R, \dot{R})$ - лагранжиан Рэлея-Плессе

$$L(R, \dot{R}) = \frac{1}{2} M(R) \dot{R}^2 - U(R)$$

Таким образом, квазистационарную динамику развития зародыша можно описать введением дополнительной силы сопротивления $F = -\mu(R) \dot{R}$, которая является линейной функцией скорости роста $\dot{R}$ и препятствует росту зародыша.

По мере понижения температуры длина свободного пробега элементарных возбуждений $l(T)$ в среде сильно возрастает и, когда она становится сопоставимой с характерным критическим размером R_c , гидродинамические соотношения для вычисления скорости диссипации энергии становятся неприменимыми. Здесь необходимо использовать кинетическое уравнение с граничными условиями на поверхности зародыша, которые зависят от характера взаимодействия элементарных возбуждений с поверхностью.

В баллистическом $l(T) \gg R_c$ режиме столкновения элементарных возбуждений друг с другом достаточно редки и, столкнувшись с поверхностью, возбуждения релаксируют в удаленной от зародыша области. В баллистическом режиме скорость диссипации полной энергии зародыша становится пропорциональной площади поверхности зародыша $4\pi R^2$ и может быть найдена с помощью общего уравнения переноса тепла

$$-\frac{dE}{dt} = Q = - \int \tau'_{ik} \frac{\partial v_i}{\partial x_k} d^3 r - \int q \frac{\nabla T}{T} d^3 r$$

где τ'_{ik} - диссипативная часть тензора плотности потока импульса и q - диссипативный поток тепла. Далее получим, считая изменение всех величин малыми в силу квазистационарного приближения $\dot{R} \rightarrow 0$,

$$-\frac{dE}{dt} = Q = 4\pi R^2 \tau'_{rr}(R) v(R) + 4\pi R^2 q(R) \frac{T(R) - T}{T}$$

где $\tau'_{rr}(R)$ - компонента тензора при $r = R$ в направлении, перпендикулярном к поверхности зародыша, и $T - T(R)$ - скачок температуры на поверхности. Величина $\tau'_{rr}(R)$ определяется потоком импульса, передаваемым от элементарных возбуждений поверхности зародыша, и пропорциональна скорости жидкости $v(R) = -(\Delta \rho / \rho) \dot{R}$ относительно поверхности зародыша

$$\tau'_{rr}(R) = \vartheta v(R)$$

По порядку величины коэффициент ϑ равен произведению плотности возбуждений ρ_{ex} на их характерную скорость u_{ex} т.е. $\vartheta \sim \rho_{ex} u_{ex}$.

Скачок температуры на границе между двумя средами связан с потоком тепла с помощью теплового сопротивления Кэпицы R_K согласно

$$T(R) - T = \frac{q(R)}{R_K}$$

Величина R_K порядка произведения теплоемкости C_p на типичную скорость возбуждений u_{ex} . Соответственно, $R_K \sim C_p u_{ex}$. В результате, мы приходим к

$$\frac{dE}{dt} = -4\pi R^2 \left[\vartheta v^2(R) + \frac{q^2(R)}{R_K T} \right] = 4\pi R^2 \left[\left(\frac{\Delta \rho}{\rho} \right)^2 \vartheta + \frac{(\rho' L)^2}{R_K T} \right] \dot{R}^2 = -\mu(R) \dot{R}^2.$$

Отметим, что зависимость диссипации от скорости роста зародыша $\dot{R}$ остается той же самой. Зависимость коэффициента сопротивления $\mu(R)$ от радиуса зародыша R изменяется и в баллистическом режиме перестает зависеть от длины свободного пробега $l(T)$.

Подчеркнем, что коэффициент сопротивления $\mu(R)$ также существенным образом зависит от температуры через входящие в него кинетические коэффициенты вязкости и теплопроводности, которые имеют разное температурное поведение в различных конденсированных средах, например в нормальных или сверхтекучих жидкостях.

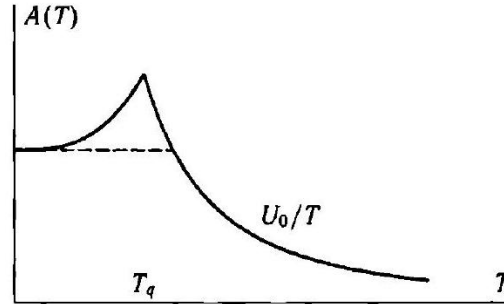


Рис. 3.13. Зависимость показателя экспоненты $A(T)$ от температуры диссипативной среды. Пунктир соответствует бездиссипативному случаю

Квантовое описание роста зародыша сводится к рассмотрению эффективного действия $S_{\text{eff}} [R_\tau]$ на мнимом времени τ с периодическими траекториями $R(-\hbar/2T) = R(\hbar/2T)$

$$S_{\text{eff}} [R_\tau] = \int_{-\hbar/2T}^{\hbar/2T} \left(\frac{M(R_\tau) \dot{R}_\tau^2}{2} + U(R_\tau) \right) d\tau + \frac{1}{4\pi} \iint_{-\hbar/2T}^{\hbar/2T} [\gamma(R_\tau) - \gamma(R_s)]^2 \frac{(\pi T/\hbar)^2}{\sin^2[\pi T(\tau - s)/\hbar]} d\tau ds$$

где $\gamma(R)$ определяется коэффициентом сопротивления $\mu(R)$ из соотношения

$$\mu(R) = \gamma'^2(R) \quad \text{или} \quad \gamma(R) = \int_0^R \sqrt{\mu(R)} dR$$

Нахождение экстремальных траекторий эффективного действия в общем случае представляет собой непростую задачу. Скорость распада $\Gamma(T) \sim \exp[-A(T)]$ метастабильной конденсированной среды с экспоненциальной точностью определится по порядку величины в соответствии с соотношением

$$A(T) = \begin{cases} [S_0(R_c) + \mu(R_c, T) R_c^2] / \hbar, & T < T_q(R_c) \\ U_0(R_c) / T, & T > T_q(R_c) \end{cases}$$

где $S_0(R_c)$ - экстремальное значение действия в бездиссипативной среде, найденное в предыдущей задаче, и $U_0(R_c)$ - высота потенциального барьера. Температура T_q определяет температуру перехода от классического режима распада к квантовому и примерно равна

$$T_q \sim \frac{\hbar U_0(R_c)}{S_0(R_c) + \mu(R_c, T_q) R_c^2}$$

Наличие диссипации в конденсированной среде, во-первых, замедляет скорость квантового распада и уменьшает температуру перехода на квантовый режим. Во-вторых, в квантовой области распада показатель экспоненты A начинает существенно зависеть от температуры благодаря зависимости кинетических коэффициентов от температуры. Пример поведения $A(T)$ в зависимости от температуры показан на рис. 3.13.

БРМ-35.

В предыдущей задаче, посвященной явлению макроскопической квантовой нуклеации в фазовых переходах первого рода, в примере о распаде метастабильной жидкости одно из упрощающих приближений было предположение о бездиссипативном характере роста зародыша новой стабильной фазы. В этом приближении полная энергия зародыша $E = K + U$, представляющая собой сумму кинетической $K(R, \dot{R})$ и потенциальной $U(R)$ энергий, сохраняется. Вообще говоря, это не так и рост зародыша новой фазы сопровождается диссипацией его энергии, связанной с наличием вязкости (внутреннего трения) и теплопроводности в метастабильной среде. Вязкость (внутреннее трение) возникает в результате неоднородного распределения скорости жидкости вокруг зародыша, а теплопроводность вследствие выделения или поглощения скрытой теплоты фазового перехода $L(T)$ на границе зародыша.

Рассмотреть влияние вязкости и теплопроводности на рост сферического зародыша, предполагая выполненными приближения макроскопичности и квазистационарного (медленного) роста зародыша. Найти уравнение роста зародыша и определить влияние вязкости и теплопроводности на температурное поведение вероятности распада метастабильного состояния жидкости $\Gamma(T)$. Рассмотреть два режима роста:

- а) гидродинамический, когда критический радиус зародыша R_c много больше длины свободного пробега $l(T)$ возмущений в среде;
- б) баллистический, когда критический радиус зародыша R_c много меньше длины свободного пробега $l(T)$ возмущений. Коэффициенты вязкости и теплопроводности равны $\eta(T)$ и $\kappa(T)$, соответственно.

Solution

(??? no solution yet)

18.3.2 Problems about Transformations of Lindblad Equation

me. Lindblad operators for BCS superconductor

In our model k_1, k_2 runs over all Brillouin zone, and the spin indices p_1, p_2 are having values $\uparrow, \downarrow$.

By $\gamma_{i,k_1 k_2}(T_b)$ we mean $\gamma_{i,k_1 k_2, p_1, p_2}(T_b)$, but we suppress spin indices for shortness.

Each Lindblad operator corresponds to coupling to a one bath. So if we have two baths, then there would be two Lindblad operators (of the same form), but with different T_b -s.

Also, we assume that there are many processes, so in general our Lindblad for coupling to one bath L is a sum of three operators that are responsible for different processes (L_1, L_2, L_3).

(WRITE HERE A TASK TO CHECK THE DETAILED BALANCE!!!)

Dynamics in case of $L_{1,k_1 k_2} \sim b_{k_1, p_1}^\dagger b_{k_2, p_2}$

Let's choose

$$L_{1,k_1 k_2} = \sum_{k_1, k_2, p_1, p_2} \sqrt{\gamma_{1,k_1 k_2}} b_{k_1, p_1}^\dagger b_{k_2, p_2}, \quad \gamma_{1,k_1 k_2} := e^{-(\varepsilon_{k_1, p_1} - \varepsilon_{k_2, p_2})/2T_b}$$

By sum over all k we mean that whole spectrum of the superconductor plays role (not some region in the spectrum). By sum over all p we mean that all spin projections are affected, though later we will see that only some will give a nonzero contribution.

Then the dynamics of $\langle \dot{n}_m \rangle$ is governed by

$$\langle \dot{n}_m \rangle = 2\epsilon \left[- \sum_k e^{-(\varepsilon_k - \varepsilon_m)/2T_b} \langle n_m \rangle (1 - \langle n_k \rangle) + \sum_k e^{-(\varepsilon_m - \varepsilon_k)/2T_b} \langle n_k \rangle (1 - \langle n_m \rangle) \right].$$

Here the first term is responsible for contribution to the change of averaged distribution of a excitations over the ground state from scatterings of particles with average momenta $\langle n_m \rangle$ to all $\langle n_k \rangle$ -s. The second – for scatterings of particles with average momenta $\langle n_k \rangle$ -s to $\langle n_m \rangle$. This is because $\langle n \rangle$ can be bigger (up to 1), if the state is occupied for scattering from $\langle n_m \rangle$ to $\langle n_k \rangle$, and for scattering from $\langle n_k \rangle$ to $\langle n_m \rangle$ it is vice versa. So or first or second term will give the major contribution to $\langle \dot{n} \rangle$. The strength is determined by the energy difference of the states that participate in the scattering.

Proof. By $\langle \dot{n}_m \rangle$ we mean that there is an average number of excitation over the superconductor with a certain projection of a spin. So, total number of particles with momenta m is $2\langle \dot{n}_m \rangle$.

We will transform equation of dynamics of $\langle n_m \rangle$ as follows:

$$\begin{aligned} \langle \dot{n}_m \rangle &= \epsilon \sum_{k_1, k_2, p_1, p_2} \langle L_j^\dagger n_m L_j \rangle - \langle L_j^\dagger L_j n_m \rangle = \\ &= \epsilon \sum_{k_1, k_2, p_1, p_2} \gamma_{1,k_1 k_2} \left(\langle b_{k_2 p_2}^\dagger b_{k_1 p_1} b_m^\dagger b_m b_{k_1 p_1}^\dagger b_{k_2 p_2} \rangle - \langle b_{k_2 p_2}^\dagger b_{k_1 p_1} b_{k_1 p_1}^\dagger b_{k_2 p_2} b_m^\dagger b_m \rangle \right). \end{aligned}$$

Let us define new indexes:

$$p' := k_2 p_2; \quad q := k_1 p_1; \quad p := k_1 p_1; \quad p' := k_2 p_2.$$

This is done just to plug them to the known correct transformation and get some results.

We transform the first term:

$$\begin{aligned}
\langle b_{p'}^\dagger b_p b_m^\dagger b_m b_p^\dagger b_{p'} \rangle &= \langle b_{p'}^\dagger b_p b_m^\dagger (\delta_{m,p} - b_p^\dagger b_m) b_{p'} \rangle = \langle b_{p'}^\dagger b_p b_m^\dagger b_{p'} \rangle \delta_{m,p} + \langle b_{p'}^\dagger b_p b_m^\dagger b_p^\dagger b_{p'} b_m \rangle = \\
&= \langle b_{p'}^\dagger b_p b_m^\dagger b_{p'} \rangle \delta_{m,p} + \langle b_{p'}^\dagger b_p (-b_p^\dagger b_m^\dagger) b_{p'} b_m \rangle = \langle b_{p'}^\dagger (\delta_{m,p} - b_m^\dagger b_p) b_{p'} \rangle \delta_{m,p} - \langle b_{p'}^\dagger b_p b_p^\dagger (\delta_{m,p'} - b_{p'}^\dagger b_m^\dagger) b_m \rangle = \\
&= \langle b_{p'}^\dagger b_{p'} \rangle \delta_{m,p} \delta_{m,p} - \langle b_{p'}^\dagger b_m^\dagger b_p b_{p'} \rangle \delta_{m,p} - \langle b_{p'}^\dagger b_p b_p^\dagger b_m \rangle \delta_{m,p'} + \langle b_{p'}^\dagger b_p b_p^\dagger b_{p'} b_m^\dagger b_m \rangle = \\
&= \langle b_{p'}^\dagger b_{p'} \rangle \delta_{m,p} \delta_{m,p} - \langle b_{p'}^\dagger b_m^\dagger b_p b_{p'} \rangle \delta_{m,p} + \langle b_{p'}^\dagger b_p^\dagger b_p b_m \rangle \delta_{m,p'} - \langle b_{p'}^\dagger b_m \rangle \delta_{p,p} \delta_{m,p'} + \langle b_{p'}^\dagger b_p b_p^\dagger b_{p'} b_m^\dagger b_m \rangle \rightarrow \\
&\rightarrow \langle b_{k_2 p_2}^\dagger b_{k_2 p_2} \rangle \delta_{m, k_1 p_1} - \langle b_{k_2 p_2}^\dagger b_m^\dagger b_{k_1 p_1} b_{k_2 p_2} \rangle \delta_{m, k_1 p_1} + \langle b_{k_2 p_2}^\dagger b_{k_1 p_1}^\dagger b_{k_1 p_1} b_m \rangle \delta_{m, k_2 p_2} - \\
&\quad - \langle b_{k_2 p_2}^\dagger b_m \rangle \delta_{m, k_2 p_2} + \langle b_{k_2 p_2}^\dagger b_{k_1 p_1} b_{k_1 p_1}^\dagger b_{k_2 p_2} b_m^\dagger b_m \rangle.
\end{aligned}$$

Here the last term cancels with the second term of the initial expression. By the definition of distribution function $\langle n_p \rangle := \langle b_p^\dagger b_p \rangle$ and Wick's theorem we have:

$$\begin{aligned}
\langle b_{p'}^\dagger b_{p'} \rangle &= \langle n_{p'} \rangle \delta_{p', p'}; \\
\langle b_{p'}^\dagger b_m^\dagger b_p b_{p'} \rangle &= \langle b_{p'}^\dagger b_{p'} \rangle \langle b_m^\dagger b_p \rangle - \langle b_{p'}^\dagger b_p \rangle \langle b_m^\dagger b_{p'} \rangle = \langle n_{p'} \rangle \langle n_p \rangle \delta_{p', p'} \delta_{m, p} - \langle n_{p'} \rangle \langle n_m \rangle \delta_{p', p} \delta_{m, p'}; \\
\langle b_{p'}^\dagger b_p^\dagger b_p b_m \rangle &= \langle b_{p'}^\dagger b_m \rangle \langle b_p^\dagger b_p \rangle - \langle b_{p'}^\dagger b_p \rangle \langle b_p^\dagger b_m \rangle = \langle n_{p'} \rangle \langle n_p \rangle \delta_{p', m} \delta_{p, p} - \langle n_{p'} \rangle \langle n_m \rangle \delta_{p', p} \delta_{m, p}; \\
\langle b_{p'}^\dagger b_m \rangle &= \langle n_{p'} \rangle \delta_{p', m}.
\end{aligned}$$

And totally we have:

$$\begin{aligned}
\mathcal{O}_1 &:= \langle n_{p'} \rangle \delta_{p', p'} \delta_{m, p} \delta_{m, p} - (\langle n_{p'} \rangle \langle n_p \rangle \delta_{p', p'} \delta_{m, p} - \langle n_{p'} \rangle \langle n_m \rangle \delta_{p', p} \delta_{m, p'}) \delta_{m, p} + \\
&\quad + (\langle n_{p'} \rangle \langle n_p \rangle \delta_{p', m} \delta_{p, p} - \langle n_{p'} \rangle \langle n_m \rangle \delta_{p', p} \delta_{m, p}) \delta_{m, p'} - \langle n_{p'} \rangle \delta_{p', m} \delta_{p, p} \delta_{m, p'} = \\
&= \langle n_{p'} \rangle (\delta_{p', p'} \delta_{m, p} \delta_{m, p} - \delta_{p', m} \delta_{p, p} \delta_{m, p'}) + \langle n_{p'} \rangle \langle n_p \rangle (\delta_{p', m} \delta_{p, p} \delta_{m, p'} - \delta_{p', p'} \delta_{m, p} \delta_{m, p}) + \\
&\quad + \langle n_{p'} \rangle \langle n_m \rangle (\delta_{p', p} \delta_{m, p'} \delta_{m, p} - \delta_{p', p} \delta_{m, p} \delta_{m, p'}).
\end{aligned}$$

We are left with

$$\langle \dot{n}_m \rangle = \epsilon \sum_{k_1, k_2, p_1, p_2} \gamma_{1, k_1 k_2} \left(\langle n_{p'} \rangle (\delta_{p', p'} \delta_{m, p} \delta_{m, p} - \delta_{p', m} \delta_{p, p} \delta_{m, p'}) + \langle n_{p'} \rangle \langle n_p \rangle (\delta_{p', m} \delta_{p, p} \delta_{m, p'} - \delta_{p', p'} \delta_{m, p} \delta_{m, p}) \right).$$

Now, we use that $p' := k_2 p_2$; $p := k_1 p_1$, so

$$\langle n_{p'} \rangle = \langle n_{k_2 p_2} \rangle = \langle n_{k_2} \rangle; \quad \langle n_p \rangle = \langle n_{k_1 p_1} \rangle = \langle n_{k_1} \rangle;$$

so totally for this model, we have

$$\begin{aligned}
\langle \dot{n}_m \rangle &= \epsilon \sum_{k_1, k_2, p_1, p_2} \gamma_{1, k_1 k_2} \left(\langle n_{k_2} \rangle (\delta_{m, k_1} - \delta_{k_2, m}) + \langle n_{k_2} \rangle \langle n_{k_1} \rangle (\delta_{k_2, m} - \delta_{m, k_1}) \right) = \\
&= \epsilon \sum_{k_1, k_2, p_1, p_2} \gamma_{1, k_1 k_2} \langle n_{k_2} \rangle \left(\langle n_{k_1} \rangle - 1 \right) (\delta_{k_2, m} - \delta_{m, k_1}) = \\
&= \epsilon \sum_{k, p} \gamma_{1, k, m} \langle n_m \rangle \left(\langle n_k \rangle - 1 \right) - \epsilon \sum_{k, p} \gamma_{1, m, k} \langle n_k \rangle \left(\langle n_m \rangle - 1 \right) \stackrel{2 \text{ from } \Sigma_p}{=} \\
&= 2\epsilon \left[- \sum_k e^{-(\varepsilon_k - \varepsilon_m)/2T_b} \langle n_m \rangle (1 - \langle n_k \rangle) + \sum_k e^{-(\varepsilon_m - \varepsilon_k)/2T_b} \langle n_k \rangle (1 - \langle n_m \rangle) \right]
\end{aligned}$$

□

Dynamics in case of $L_{2,k_1k_2} \sim b_{k_1,p_1}^\dagger b_{k_2,p_2}^\dagger$

(I am in the process of writing it)
Let's do the same as before, but for

$$L_{2,k_1k_2} = \sum_{k_1,k_2,p_1,p_2} \sqrt{\gamma_{2,k_1k_2}} b_{k_1,p_1}^\dagger b_{k_2,p_2}^\dagger, \quad \gamma_{2,k_1k_2} := e^{-(\varepsilon_{k_1,p_1} + \varepsilon_{k_2,p_2})/2T_b}$$

Then the dynamics of $\langle \dot{n}_m \rangle$ is governed by

$$\langle \dot{n}_m \rangle = 2\epsilon \left[\left(2 \sum_k e^{-(\varepsilon_m + \varepsilon_k)/2T_b} (1 - \langle n_k \rangle) (1 - \langle n_m \rangle) \right) - e^{-2\varepsilon_m/2T_b} (1 - \langle n_m \rangle)^2 \right].$$

Proof.

$$\begin{aligned} \langle \dot{n}_m \rangle &= \epsilon \sum_{k_1,k_2,p_1,p_2} \langle L_j^\dagger n_m L_j \rangle - \langle L_j^\dagger L_j n_m \rangle = \\ &= \epsilon \sum_{k_1,k_2,p_1,p_2} \gamma_{2,k_1k_2} \left(\langle b_{k_2,p_2} b_{k_1,p_1} b_m^\dagger b_m b_{k_1,p_1}^\dagger b_{k_2,p_2}^\dagger \rangle - \langle b_{k_2,p_2} b_{k_1,p_1} b_{k_1,p_1}^\dagger b_{k_2,p_2}^\dagger b_m^\dagger b_m \rangle \right). \end{aligned}$$

$$p' := k_2 p_2; \quad p := k_1 p_1;$$

$$\begin{aligned} \langle b_{p'} b_p b_m^\dagger b_m b_{p'}^\dagger \rangle &= \langle b_{p'} b_p b_m^\dagger (\delta_{m,p} - b_p^\dagger b_m) b_{p'}^\dagger \rangle = \langle b_{p'} b_p b_m^\dagger b_{p'}^\dagger \rangle \delta_{m,p} + \langle b_{p'} b_p b_p^\dagger b_m^\dagger b_m b_{p'}^\dagger \rangle = \\ &= \langle b_{p'} (\delta_{m,p} - b_m^\dagger b_p) b_{p'}^\dagger \rangle \delta_{m,p} + \langle b_{p'} b_p b_p^\dagger b_m^\dagger (\delta_{p',m} - b_p^\dagger b_m) \rangle = \\ &= \langle b_{p'} b_{p'}^\dagger \rangle \delta_{m,p} - \langle b_{p'} b_m^\dagger b_p b_{p'}^\dagger \rangle \delta_{m,p} + \langle b_{p'} b_p b_p^\dagger b_m^\dagger \rangle \delta_{p',m} + \underbrace{\langle b_{p'} b_p b_p^\dagger b_{p'}^\dagger b_m^\dagger b_m \rangle}_{\text{cancels w right init term}} = \\ &= (1 - \langle n_{p'} \rangle) \delta_{m,p} - \langle (\delta_{m,p'} - b_m^\dagger b_{p'}) (\delta_{p,p'} - b_p^\dagger b_p) \rangle \delta_{m,p} + \langle b_{p'} (1 - b_p^\dagger b_p) b_m^\dagger \rangle \delta_{p',m} = \\ &= \delta_{m,p} - \langle n_{p'} \rangle \delta_{m,p} - \delta_{p,p'} \delta_{m,p} + \langle b_p^\dagger b_p \rangle \delta_{m,p'} \delta_{m,p} + \langle b_m^\dagger b_{p'} \rangle \delta_{p,p'} \delta_{m,p} - \langle b_m^\dagger b_{p'} b_{p'}^\dagger b_p \rangle \delta_{m,p} + \\ &\quad + \langle b_{p'} b_m^\dagger \rangle \delta_{p',m} - \langle b_{p'} b_p^\dagger b_p b_m^\dagger \rangle \delta_{p',m} = \\ &= \delta_{m,p} - \langle n_{p'} \rangle \delta_{m,p} - \delta_{p,p'} \delta_{m,p} + \langle b_m^\dagger b_m \rangle \delta_{m,p'} \delta_{m,p} + \langle b_m^\dagger b_m \rangle \delta_{p,p'} \delta_{m,p} - \\ &\quad - \langle b_m^\dagger (1 - b_p^\dagger b_p) b_p \rangle \delta_{m,p} + \delta_{m,p'} - \langle b_m^\dagger b_{p'} \rangle \delta_{p',m} - \langle (\delta_{p,p'} - b_p^\dagger b_p) (\delta_{m,p} - b_m^\dagger b_p) \rangle \delta_{p',m} = \\ &= \delta_{m,p} - \langle n_{p'} \rangle \delta_{m,p} - \delta_{p,p'} \delta_{m,p} + 2 \langle b_m^\dagger b_m \rangle \delta_{m,p'} \delta_{m,p} - \langle b_m^\dagger b_m \rangle \delta_{m,p} + \langle b_m^\dagger b_{p'}^\dagger b_{p'} b_p \rangle \delta_{m,p} + \delta_{m,p'} - \\ &\quad - \langle b_m^\dagger b_{p'} \rangle \delta_{p',m} - \delta_{p,p'} \delta_{m,p} \delta_{p',m} + \langle b_m^\dagger b_p \rangle \delta_{p,p'} \delta_{p',m} + \langle b_p^\dagger b_{p'} \rangle \delta_{m,p} \delta_{p',m} - \langle b_p^\dagger b_{p'} b_m^\dagger b_p \rangle \delta_{p',m} = \\ &= \delta_{m,p} - \langle n_{p'} \rangle \delta_{m,p} - \delta_{p,p'} \delta_{m,p} + 2 \langle b_m^\dagger b_m \rangle \delta_{m,p'} \delta_{m,p} - \langle b_m^\dagger b_m \rangle \delta_{m,p} + \langle b_m^\dagger b_{p'}^\dagger b_{p'} b_p \rangle \delta_{m,p} + \delta_{m,p'} - \\ &\quad - \langle b_m^\dagger b_m \rangle \delta_{p',m} - \delta_{p,p'} \delta_{m,p} + \langle b_m^\dagger b_m \rangle \delta_{p,p'} \delta_{p',m} + \langle b_m^\dagger b_m \rangle \delta_{m,p} \delta_{p',m} - \langle b_p^\dagger (1 - b_m^\dagger b_{p'}) b_p \rangle \delta_{p',m} = \\ &= \delta_{m,p} + \delta_{m,p'} - 2 \delta_{p,p'} \delta_{m,p} + \underline{4 \langle b_m^\dagger b_m \rangle \delta_{m,p'} \delta_{m,p}} - \langle n_{p'} \rangle \delta_{m,p} - \underline{\langle b_m^\dagger b_m \rangle \delta_{m,p}} - \underline{\langle b_m^\dagger b_m \rangle \delta_{p',m}} + \\ &\quad + \langle b_m^\dagger b_{p'}^\dagger b_{p'} b_p \rangle \delta_{m,p} - \langle b_p^\dagger b_p \rangle \delta_{p',m} + \langle b_p^\dagger b_m^\dagger b_{p'} b_p \rangle \delta_{p',m} = \\ &= \delta_{m,p} + \delta_{m,p'} - 2 \delta_{p,p'} \delta_{m,p} - \langle n_{p'} \rangle \delta_{m,p} + \underline{\langle n_m \rangle (4 \delta_{m,p'} \delta_{m,p} - \delta_{m,p} - \delta_{p',m})} - \langle n_p \rangle \delta_{p',m} + \\ &\quad + \langle b_m^\dagger b_{p'}^\dagger b_{p'} b_p \rangle \delta_{m,p} + \langle b_p^\dagger b_m^\dagger b_{p'} b_p \rangle \delta_{p',m}. \end{aligned}$$

Now, we use the Wick's theorem, and that $p := k_1 p_1$; $p' := k_2 p_2$:

$$\begin{aligned}\langle b_m^\dagger b_{p'}^\dagger b_p b_p \rangle &= \langle b_m^\dagger b_p \rangle \langle b_{p'}^\dagger b_{p'} \rangle - \langle b_m^\dagger b_{p'} \rangle \langle b_p^\dagger b_p \rangle = \langle n_m \rangle \langle n_{p'} \rangle \delta_{m,p} - \langle n_m \rangle \langle n_{p'} \rangle \delta_{m,p'} \delta_{p',p}; \\ \langle b_p^\dagger b_m^\dagger b_{p'} b_p \rangle &= \langle b_p^\dagger b_p \rangle \langle b_m^\dagger b_{p'} \rangle - \langle b_p^\dagger b_{p'} \rangle \langle b_m^\dagger b_p \rangle = \langle n_p \rangle \langle n_{p'} \rangle \delta_{m,p'} - \langle n_p \rangle \langle n_m \rangle \delta_{p,p'} \delta_{m,p}.\end{aligned}$$

We will suppress spin p index in δ -function, since we can always restore it by looking at momenta k index (they are always together). We have:

$$\begin{aligned}\langle \dot{n}_m \rangle &= \epsilon \sum_{k_1, k_2, p_1, p_2} \gamma_{2, k_1 k_2} \left[(1 - \langle n_{p'} \rangle - \langle n_m \rangle) \delta_{m,p} + (1 - \langle n_p \rangle - \langle n_m \rangle) \delta_{m,p'} - 2(1 - 2\langle n_m \rangle) \delta_{p,p'} \delta_{m,p} + \right. \\ &\quad \left. + \langle n_m \rangle \langle n_{p'} \rangle \delta_{m,p} \delta_{m,p} - \langle n_m \rangle \langle n_{p'} \rangle \delta_{m,p'} \delta_{p',p} \delta_{m,p} + \langle n_p \rangle \langle n_{p'} \rangle \delta_{m,p'} \delta_{p',m} - \langle n_p \rangle \langle n_m \rangle \delta_{p,p'} \delta_{m,p} \delta_{p',m} \right] \equiv \\ &\equiv \epsilon \sum_{k_1, k_2, p_1, p_2} \gamma_{2, k_1 k_2} \left[(1 - \langle n_{k_2} \rangle - \langle n_m \rangle) \delta_{m, k_1} + (1 - \langle n_{k_1} \rangle - \langle n_m \rangle) \delta_{m, k_2} - 2(1 - 2\langle n_m \rangle) \delta_{k_1, k_2} \delta_{m, k_1} + \right. \\ &\quad \left. + \langle n_m \rangle \langle n_{k_2} \rangle \delta_{m, k_1} - \langle n_m \rangle \langle n_{k_2} \rangle \delta_{m, k_2} \delta_{m, k_1} + \langle n_{k_1} \rangle \langle n_{k_2} \rangle \delta_{m, k_2} - \langle n_{k_1} \rangle \langle n_m \rangle \delta_{k_1, k_2} \delta_{m, k_1} \right] = \\ &\quad \text{(restore in } \delta\text{-functions spin indices)} \\ &= \epsilon \sum_{k, p} \gamma_{2, m, k} (1 - \langle n_k \rangle - \langle n_m \rangle) + \epsilon \sum_{k, p} \gamma_{2, k, m} (1 - \langle n_k \rangle - \langle n_m \rangle) - \epsilon \gamma_{2, m, m} \cdot 2(1 - 2\langle n_m \rangle) + \\ &\quad + \epsilon \sum_{k, p} \gamma_{2, m, k} \langle n_m \rangle \langle n_k \rangle - \epsilon \gamma_{2, m, m} \langle n_m \rangle^2 + \epsilon \sum_{k, p} \gamma_{2, k, m} \langle n_k \rangle \langle n_m \rangle - \epsilon \gamma_{2, m, m} \langle n_m \rangle^2 \Big] = \\ &= \epsilon \sum_{k, p} \gamma_{2, m, k} (1 - \langle n_k \rangle - \langle n_m \rangle) + \epsilon \sum_{k, p} \gamma_{2, k, m} (1 - \langle n_k \rangle - \langle n_m \rangle) - 2(1 - 2\langle n_m \rangle) \epsilon \gamma_{2, m, m} + \\ &\quad + 2\epsilon \sum_{k, p} \gamma_{2, m, k} \langle n_k \rangle \langle n_m \rangle - 2\epsilon \gamma_{2, m, m} \langle n_m \rangle^2 = \\ &\quad \text{(sum over } p \text{ is trivial, so there is a factor 2)} \\ &= 2\epsilon \left[2 \sum_k \gamma_{2, m, k} (1 - \langle n_k \rangle - \langle n_m \rangle + \langle n_k \rangle \langle n_m \rangle) - \gamma_{2, m, m} (1 - 2\langle n_m \rangle + \langle n_m \rangle^2) \right] = \\ &= 2\epsilon \left[2 \sum_k \gamma_{2, m, k} (1 - \langle n_k \rangle) (1 - \langle n_m \rangle) - \gamma_{2, m, m} (1 - \langle n_m \rangle)^2 \right] = \\ &= 2\epsilon \left[2 \sum_k e^{-(\varepsilon_{m, pm} + \varepsilon_{k, +})/2T_b} (1 - \langle n_k \rangle) (1 - \langle n_m \rangle) - e^{-2\varepsilon_{m, pm}/2T_b} (1 - \langle n_m \rangle)^2 \right].\end{aligned}$$

Above we have used that $\gamma_{2, m, k} = \gamma_{2, k, m}$, which follows from their definition. For other γ -s this will not work.

Also, the energies do not depend on the spin, so I'll omit this index, and thus obtain what was stated. $\square$

Dynamics in case of $L_{3, k_1 k_2} \sim b_{k_1, p_1} b_{k_2, p_2}$

Let's do the same as before, but for

$$L_{3, k_1 k_2} = \sum_{k_1, k_2, p_1, p_2} \sqrt{\gamma_{3, k_1 k_2}} b_{k_1, p_1} b_{k_2, p_2}, \quad \gamma_{3, k_1 k_2} := e^{(\varepsilon_{k_1, p_1} + \varepsilon_{k_2, p_2})/2T_b}$$

Then the dynamics of $\langle \dot{n}_m \rangle$ is governed by

$$\langle \dot{n}_m \rangle = 2\epsilon e^{2\epsilon_m/2T_b} \langle n_m \rangle^2 - 4\epsilon \langle n_m \rangle \sum_k e^{(\epsilon_m + \epsilon_k)/2T_b} \langle n_k \rangle.$$

All terms in the sum correspond to a decay of two particles to a bath (??? they just disappear?? so the dissipation occurs). This is because each term in the sum is nonzero only if two states are occupied ($\langle n_m \rangle$ and $\langle n_k \rangle$ are around 1).

Proof.

$$\begin{aligned} \langle \dot{n}_m \rangle &= \epsilon \sum_{k_1, k_2, p_1, p_2} \langle L_j^\dagger n_m L_j \rangle - \langle L_j^\dagger L_j n_m \rangle = \\ &= \epsilon \sum_{k_1, k_2, p_1, p_2} \gamma_{3, k_1 k_2} \left(\langle b_{k_2, p_2}^\dagger b_{k_1, p_1}^\dagger b_m^\dagger b_m b_{k_1, p_1} b_{k_2, p_2} \rangle - \langle b_{k_2, p_2}^\dagger b_{k_1, p_1}^\dagger b_{k_1, p_1} b_{k_2, p_2} b_m^\dagger b_m \rangle \right). \end{aligned}$$

$$p' := k_2 p_2; \quad p := k_1 p_1;$$

$$\begin{aligned} \langle b_{p'}^\dagger b_p^\dagger b_m^\dagger b_m b_p b_{p'} \rangle &= \langle b_{p'}^\dagger b_p^\dagger b_m^\dagger b_p b_{p'} b_m \rangle = \langle b_{p'}^\dagger b_p^\dagger (\delta_{p, m} - b_p b_m^\dagger) b_{p'} b_m \rangle = \\ &= \langle b_{p'}^\dagger b_p^\dagger b_{p'} b_m \rangle \delta_{p, m} - \langle b_{p'}^\dagger b_p^\dagger b_p b_m^\dagger b_{p'} b_m \rangle = \langle b_{p'}^\dagger b_p^\dagger b_{p'} b_m \rangle \delta_{p, m} - \langle b_{p'}^\dagger b_p^\dagger b_p (\delta_{p', m} - b_{p'} b_m^\dagger) b_m \rangle = \\ &= \langle b_{p'}^\dagger b_p^\dagger b_{p'} b_m \rangle \delta_{p, m} - \langle b_{p'}^\dagger b_p^\dagger b_p b_m \rangle \delta_{p', m} + \underbrace{\langle b_{p'}^\dagger b_p^\dagger b_p b_{p'} b_m^\dagger b_m \rangle}_{\text{cancels w right init term}}. \\ \langle b_{p'}^\dagger b_p^\dagger b_{p'} b_m \rangle &= \langle b_{p'}^\dagger b_m \rangle \langle b_p^\dagger b_{p'} \rangle - \langle b_{p'}^\dagger b_{p'} \rangle \langle b_p^\dagger b_m \rangle = \langle n_{p'} \rangle \langle n_p \rangle \delta_{p', m} \delta_{p', p} - \langle n_{p'} \rangle \langle n_m \rangle \delta_{m, p}; \\ \langle b_{p'}^\dagger b_p^\dagger b_p b_m \rangle &= \langle n_{p'} \rangle \langle n_p \rangle \delta_{p', m} - \langle n_{p'} \rangle \langle n_m \rangle \delta_{p', p} \delta_{m, p}; \end{aligned}$$

And we have:

$$\begin{aligned} \langle \dot{n}_m \rangle &= \epsilon \sum_{k_1, k_2, p_1, p_2} \gamma_{3, k_1 k_2} \left(\langle n_{p'} \rangle \langle n_p \rangle \delta_{p', m} \delta_{p', p} - \langle n_{p'} \rangle \langle n_m \rangle \delta_{m, p} - \right. \\ &\quad \left. - (\langle n_{p'} \rangle \langle n_p \rangle \delta_{p', m} - \langle n_{p'} \rangle \langle n_m \rangle \delta_{p', p} \delta_{m, p}) \right) \equiv \\ &\equiv \epsilon \sum_{k_1, k_2, p_1, p_2} \gamma_{3, k_1 k_2} \left(\langle n_{k_2} \rangle \langle n_{k_1} \rangle \delta_{k_2, m} \delta_{k_2, k_1} - \langle n_{k_2} \rangle \langle n_m \rangle \delta_{m, k_1} - \right. \\ &\quad \left. - (\langle n_{k_2} \rangle \langle n_{k_1} \rangle \delta_{k_2, m} - \langle n_{k_2} \rangle \langle n_m \rangle \delta_{k_2, k_1} \delta_{m, k_1}) \right) = \\ &= \epsilon \gamma_{3, m, m} \langle n_m \rangle^2 - \epsilon \sum_{k, p} \gamma_{3, m, k} \langle n_k \rangle \langle n_m \rangle - \epsilon \sum_{k, p} \gamma_{3, k, m} \langle n_m \rangle \langle n_k \rangle + \epsilon \gamma_{3, m, m} \langle n_m \rangle^2 = \\ &= 2\epsilon \gamma_{3, m, m} \langle n_m \rangle^2 - 2\epsilon \sum_{k, p} \gamma_{3, m, k} \langle n_k \rangle \langle n_m \rangle \stackrel{2 \text{ from } \sum_p}{=} \\ &= 2\epsilon e^{2\epsilon_m/2T_b} \langle n_m \rangle^2 - 4\epsilon \langle n_m \rangle \sum_k e^{(\epsilon_m + \epsilon_k)/2T_b} \langle n_k \rangle. \end{aligned}$$

□

Why there are no cross-terms???

(???????????????? write this question. that indeed, we should have also terms with different Lindbladians. why don't we consider them???)

Origin of the Lindblad operators

Here we will answer, why the candidates for Lindblad operators

$$\begin{aligned} L_{1,k_1 k_2} &= \sqrt{\gamma_{1,k_1 k_2}} b_{k_1, p_1}^\dagger b_{k_2, p_2}, & \gamma_{1,k_1 k_2} &= e^{-(\varepsilon_{k_1, p_1} - \varepsilon_{k_2, p_2})/2T_b} \\ L_{2,k_1 k_2} &= \sqrt{\gamma_{2,k_1 k_2}} b_{k_1, p_1}^\dagger b_{k_2, p_2}^\dagger, & \gamma_{2,k_1 k_2} &= e^{-(\varepsilon_{k_1, p_1} + \varepsilon_{k_2, p_2})/2T_b} \\ L_{3,k_1 k_2} &= \sqrt{\gamma_{3,k_1 k_2}} b_{k_1, p_1} b_{k_2, p_2}, & \gamma_{3,k_1 k_2} &= e^{+(\varepsilon_{k_1, p_1} + \varepsilon_{k_2, p_2})/2T_b} \end{aligned}$$

are like this? This is the most important question.

(here will be comments about signs in the exponents, they are not the same for all Lindblad operators)

Also, it is interesting that only with such different γ -s there will be a detailed balance (if all three operators are active) (??? currently, I don't understand, why?)

Fixed point of these scattering equations for all Lindblads

If we have all three Lindblads, then for the thermal distribution $\langle n_k \rangle = e^{-\varepsilon_k/T_b} / (1 + e^{-\varepsilon_k/T_b})$ we have:

$$\begin{aligned} \langle \dot{n}_m \rangle &= 2\epsilon \left[- \sum_k e^{-(\varepsilon_k - \varepsilon_m)/2T_b} \langle n_m \rangle (1 - \langle n_k \rangle) + \sum_k e^{-(\varepsilon_m - \varepsilon_k)/2T_b} \langle n_k \rangle (1 - \langle n_m \rangle) \right] + \\ &\quad + 2\epsilon \left[\left(2 \sum_k e^{-(\varepsilon_m + \varepsilon_k)/2T_b} (1 - \langle n_k \rangle) (1 - \langle n_m \rangle) \right) - e^{-\varepsilon_m/T_b} (1 - \langle n_m \rangle)^2 \right] + \\ &\quad + 2\epsilon e^{\varepsilon_m/T_b} \langle n_m \rangle^2 - 4\epsilon \langle n_m \rangle \sum_k e^{(\varepsilon_m + \varepsilon_k)/2T_b} \langle n_k \rangle = \\ &= 2\epsilon \left[- \sum_k \frac{e^{-(\varepsilon_k - \varepsilon_m)/2T_b} e^{-\varepsilon_m/T_b}}{1 + e^{-\varepsilon_m/T_b}} \left(1 - \frac{e^{-\varepsilon_k/T_b}}{1 + e^{-\varepsilon_k/T_b}} \right) + \sum_k \frac{e^{-(\varepsilon_m - \varepsilon_k)/2T_b} e^{-\varepsilon_k/T_b}}{1 + e^{-\varepsilon_k/T_b}} \left(1 - \frac{e^{-\varepsilon_m/T_b}}{1 + e^{-\varepsilon_m/T_b}} \right) + \right. \\ &\quad + \left(2 \sum_k e^{-(\varepsilon_m + \varepsilon_k)/2T_b} \left(1 - \frac{e^{-\varepsilon_k/T_b}}{1 + e^{-\varepsilon_k/T_b}} \right) \left(1 - \frac{e^{-\varepsilon_m/T_b}}{1 + e^{-\varepsilon_m/T_b}} \right) \right) - e^{-\varepsilon_m/T_b} \left(1 - \frac{e^{-\varepsilon_m/T_b}}{1 + e^{-\varepsilon_m/T_b}} \right)^2 + \\ &\quad \left. + e^{\varepsilon_m/T_b} \frac{e^{-2\varepsilon_m/T_b}}{(1 + e^{-\varepsilon_m/T_b})^2} - 2e^{-\varepsilon_m/T_b} \sum_k \frac{e^{(\varepsilon_m + \varepsilon_k)/2T_b} e^{-\varepsilon_k/T_b}}{(1 + e^{-\varepsilon_m/T_b})(1 + e^{-\varepsilon_k/T_b})} \right] = \\ &= 2\epsilon \left[- \sum_k \frac{e^{-\varepsilon_k/2T_b - \varepsilon_m/2T_b}}{1 + e^{-\varepsilon_m/T_b}} \left(\frac{1}{1 + e^{-\varepsilon_k/T_b}} \right) + \sum_k \frac{e^{-\varepsilon_m/2T_b - \varepsilon_k/2T_b}}{1 + e^{-\varepsilon_k/T_b}} \left(\frac{1}{1 + e^{-\varepsilon_m/T_b}} \right) + \right. \\ &\quad + \left(2 \sum_k e^{-(\varepsilon_m + \varepsilon_k)/2T_b} \left(\frac{1}{1 + e^{-\varepsilon_k/T_b}} \right) \left(\frac{1}{1 + e^{-\varepsilon_m/T_b}} \right) \right) - 2e^{-\varepsilon_m/T_b} \sum_k \frac{e^{(\varepsilon_m + \varepsilon_k)/2T_b} e^{-\varepsilon_k/T_b}}{(1 + e^{-\varepsilon_m/T_b})(1 + e^{-\varepsilon_k/T_b})} - \\ &\quad \left. - e^{-\varepsilon_m/T_b} \left(1 - \frac{e^{-\varepsilon_m/T_b}}{1 + e^{-\varepsilon_m/T_b}} \right)^2 + e^{\varepsilon_m/T_b} \frac{e^{-2\varepsilon_m/T_b}}{(1 + e^{-\varepsilon_m/T_b})^2} \right] = \\ &= 2\epsilon \left[\underbrace{\sum_k \frac{-e^{-\varepsilon_k/2T_b - \varepsilon_m/2T_b} + e^{-\varepsilon_m/2T_b - \varepsilon_k/2T_b} + 2e^{-(\varepsilon_m + \varepsilon_k)/2T_b} - 2e^{-\varepsilon_m/2T_b - \varepsilon_k/2T_b}}{(1 + e^{-\varepsilon_m/T_b})(1 + e^{-\varepsilon_k/T_b})}}_{\equiv 0} - \right. \\ &\quad \left. \underbrace{-e^{-\varepsilon_m/T_b} \left(\frac{1}{1 + e^{-\varepsilon_m/T_b}} \right)^2 + \frac{e^{-\varepsilon_m/T_b}}{(1 + e^{-\varepsilon_m/T_b})^2}}_{\equiv 0} \right] = 0. \end{aligned}$$

So, indeed, the thermal Fermi-Dirac distribution is the stationary distribution.

Convergence to a thermal distribution

Suppose initially we have a thermal distribution with $T \neq T_b$. If three Lindblads are applied, it will converge to the thermal distribution with $T = T_b$.

Firs, we rewrite in a way that is more comfortable for numerical methods:

If we have all three Lindblads, then for the thermal distribution $\langle n_k \rangle = e^{-\varepsilon_k/T_b} / (1 + e^{-\varepsilon_k/T_b})$ we have:

$$\begin{aligned} \langle \dot{n}_m \rangle = 2\epsilon \left[\langle n_m \rangle e^{\varepsilon_m/2T_b} \sum_k e^{-\varepsilon_k/2T_b} \left(-1 + \langle n_k \rangle \right) + \left(1 - \langle n_m \rangle \right) e^{-\varepsilon_m/2T_b} \sum_k e^{\varepsilon_k/2T_b} \langle n_k \rangle + \right. \\ \left. + 2 \left(1 - \langle n_m \rangle \right) e^{-\varepsilon_m/2T_b} \sum_k e^{-\varepsilon_k/2T_b} \left(1 - \langle n_k \rangle \right) - 2 \langle n_m \rangle e^{\varepsilon_m/2T_b} \sum_k e^{\varepsilon_k/2T_b} \langle n_k \rangle + \right. \\ \left. + e^{\varepsilon_m/T_b} \langle n_m \rangle^2 - e^{-\varepsilon_m/T_b} \left(1 - \langle n_m \rangle \right)^2 \right] \end{aligned}$$

And we can model it by

```
import numpy as np; import matplotlib.pyplot as plt

L = 50
ti = 0; tf = 5; dt = 0.05
N = int((tf-ti)/dt)

beta_init = 1
two_t_bath = 10
epsil = 0.02
tttt = 0.3 # hopping param

momenta = 2*np.pi/L * (np.arange(1, L+1)-1/2)
disp = tttt*np.cos(momenta)

def nmdot_fromn(nfix, momenta):

    nqdot = nfix*np.exp(disp/two_t_bath)* np.sum(np.exp(-disp/two_t_bath)*(-1 + nfix))

    nqdot +=(1-nfix)*np.exp(-disp/two_t_bath)* np.sum(np.exp(disp/two_t_bath)*nfix)

    nqdot += 2*(1-nfix)*np.exp(-disp/two_t_bath)* np.sum(np.exp(-disp/two_t_bath)*(1-nfix))

    nqdot -=2*nfix*np.exp(disp/two_t_bath)* np.sum(np.exp(disp/two_t_bath)*nfix)

    nqdot += np.exp(disp/two_t_bath)*nfix*nfix

    nqdot -= np.exp(-disp/two_t_bath)*(1-nfix)*(1-nfix)

    return 2*epsil*nqdot

nqji = np.empty((N+1, L))

# initial thermal distribution.
nqji[0] = np.exp(-beta_init*disp)/(1 + np.exp(-beta_init*disp))

for n in range(N):
    ndot = nmdot_fromn(nqji[n], momenta)
    nqji[n+1] = nqji[n] + ndot * dt
```

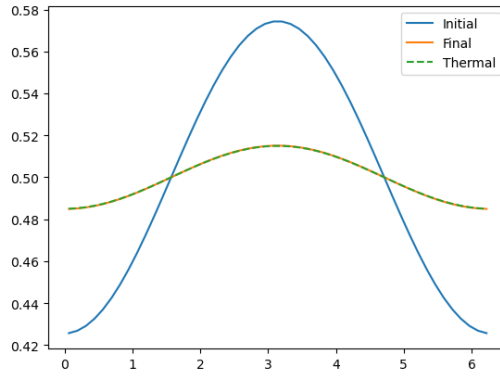
and then plot the results

```
plt.plot(momenta, nqji[0], label='Initial')
plt.plot(momenta, nqji[30], label='Final')

plt.legend()
plt.plot(momenta, np.exp(-disp/(two_t_bath/2))/(1 + np.exp(-disp/(two_t_bath/2))),
         linestyle='dashed', label='Thermal')

plt.show()
```

We get



Here `epsil` should be little (comparing to 1). I checked that nothing important depends on the hopping parameter, just the distribution becomes slightly different.

Also, the convergence should be not only for initial thermal distribution, but also for any initial. One can check this (I haven't done it yet, but it is easy).

Case of two baths

Suppose we have two baths. Then, coupling with them is described by

$$\begin{aligned}
 \langle \dot{n}_m \rangle = & 2\epsilon_1 \left[\langle n_m \rangle e^{\epsilon_m/2T_b} \sum_k e^{-\epsilon_k/2T_b} (-1 + \langle n_k \rangle) + (1 - \langle n_m \rangle) e^{-\epsilon_m/2T_b} \sum_k e^{\epsilon_k/2T_b} \langle n_k \rangle + \right. \\
 & + 2(1 - \langle n_m \rangle) e^{-\epsilon_m/2T_b} \sum_k e^{-\epsilon_k/2T_b} (1 - \langle n_k \rangle) - 2\langle n_m \rangle e^{\epsilon_m/2T_b} \sum_k e^{\epsilon_k/2T_b} \langle n_k \rangle + \\
 & \left. + e^{\epsilon_m/T_b} \langle n_m \rangle^2 - e^{-\epsilon_m/T_b} (1 - \langle n_m \rangle)^2 \right] + \\
 & + \\
 & + 2\epsilon_2 \left[\langle n_m \rangle e^{\epsilon_m/2T_b} \sum_k e^{-\epsilon_k/2T_b} (-1 + \langle n_k \rangle) + (1 - \langle n_m \rangle) e^{-\epsilon_m/2T_b} \sum_k e^{\epsilon_k/2T_b} \langle n_k \rangle + \right. \\
 & + 2(1 - \langle n_m \rangle) e^{-\epsilon_m/2T_b} \sum_k e^{-\epsilon_k/2T_b} (1 - \langle n_k \rangle) - 2\langle n_m \rangle e^{\epsilon_m/2T_b} \sum_k e^{\epsilon_k/2T_b} \langle n_k \rangle + \\
 & \left. + e^{\epsilon_m/T_b} \langle n_m \rangle^2 - e^{-\epsilon_m/T_b} (1 - \langle n_m \rangle)^2 \right].
 \end{aligned}$$

And we can model it by

```

import numpy as np; import matplotlib.pyplot as plt

L = 50

ti = 0; tf = 5; dt = 0.05
N = int((tf-ti)/dt)

beta_init = 0.2
two_t1_bath = 10
two_t2_bath = 5

epsil = 0.02 # A constant in front. It should be really little!!!!
tttt = 0.4 # the hopping parameter

def nmdot_T1(nfix, momenta):

    nqdot = nfix*np.exp(displ/two_t1_bath)* np.sum(np.exp(-displ/two_t1_bath)*(-1 + nfix))

    nqdot +=(1-nfix)*np.exp(-displ/two_t1_bath)* np.sum(np.exp(displ/two_t1_bath)*nfix)

    nqdot += 2*(1-nfix)*np.exp(-displ/two_t1_bath)* np.sum(np.exp(-displ/two_t1_bath)*(1-nfix))

    nqdot -=2*nfix*np.exp(displ/two_t1_bath)* np.sum(np.exp(displ/two_t1_bath)*nfix)

    nqdot += np.exp(displ/two_t1_bath)*nfix*nfix

```

```

nqdot -= np.exp(-disp/two_t1_bath)*(1-nfix)*(1-nfix)

return 2*epsil*nqdot

def nmdot_T2(nfix, momenta):

    nqdot = nfix*np.exp(disp/two_t2_bath)* np.sum(np.exp(-disp/two_t2_bath)*(-1 + nfix))

    nqdot +=(1-nfix)*np.exp(-disp/two_t2_bath)* np.sum(np.exp(disp/two_t2_bath)*nfix)

    nqdot += 2*(1-nfix)*np.exp(-disp/two_t2_bath)* np.sum(np.exp(-disp/two_t2_bath)*(1-nfix))

    nqdot -=2*nfix*np.exp(disp/two_t2_bath)* np.sum(np.exp(disp/two_t2_bath)*nfix)

    nqdot += np.exp(disp/two_t2_bath)*nfix*nfix

    nqdot -= np.exp(-disp/two_t2_bath)*(1-nfix)*(1-nfix)

    return 2*epsil*nqdot

momenta = 2*np.pi/L * (np.arange(1, L+1)-1/2)

disp = tttt*np.cos(momenta)

nqji = np.empty((N+1, L))

# initial thermal distribution. Actually, for an arbitrary function, it still should converge
nqji[0] = np.exp(-beta_init*disp)/(1 + np.exp(-beta_init*disp))

for n in range(N):
    ndot = nmdot_T1(nqji[n], momenta) + nmdot_T2(nqji[n], momenta)
    nqji[n+1] = nqji[n] + ndot * dt

```

Then we plot the result with comparison to the thermal distribution with the averaged temperature:

```

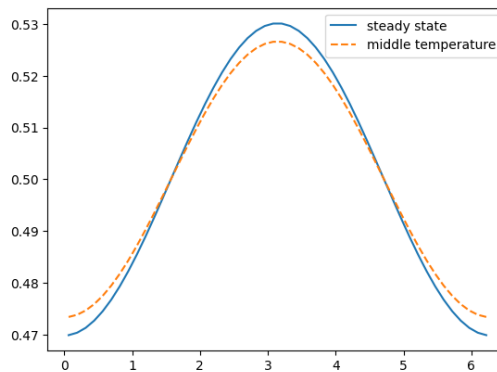
plt.plot(momenta, nqji[90], label='steady state')

plt.plot(momenta, np.exp(-disp/((two_t1_bath+two_t2_bath)/(2*2)))/
        (1 + np.exp(-disp/((two_t1_bath+two_t2_bath)/(2*2)))), linestyle='dashed',
        label='middle temperature')

plt.legend()
plt.show()

```

And we get:



me. Equation for GGE

(intro words about GGE)

Show that equation $\langle \dot{n}_q \rangle(t) \approx \text{Tr} [n_q \hat{\mathcal{D}}[\rho_\mu(t)]]$. can be written as

$$\langle \dot{n}_q \rangle = \epsilon \sum_j \langle L_j^\dagger n_q L_j \rangle - \langle n_q L_j^\dagger L_j \rangle$$

Solution

$$\begin{aligned}
 \langle \dot{n}_q \rangle &= \epsilon \text{Tr} \left[n \left(\sum L_i \rho L_i^\dagger - \frac{1}{2} \{L_i^\dagger L_i, \rho\} \right) \right] = \epsilon \sum \text{Tr} \left[n L_i \rho L_i^\dagger - \frac{1}{2} n L_i^\dagger L_i \rho - \frac{1}{2} n \rho L_i^\dagger L_i \right] = \\
 &= \epsilon \sum \text{Tr} \left[n L_i \rho L_i^\dagger \right] - \epsilon \sum \text{Tr} \left[\frac{1}{2} n L_i^\dagger L_i \rho \right] - \epsilon \sum \text{Tr} \left[\frac{1}{2} n \rho L_i^\dagger L_i \right] = \\
 &= \epsilon \sum \text{Tr} \left[L_i^\dagger n L_i \rho \right] - \frac{1}{2} \epsilon \sum \text{Tr} \left[n L_i^\dagger L_i \rho \right] - \frac{1}{2} \epsilon \sum \text{Tr} \left[L_i^\dagger L_i n \rho \right].
 \end{aligned}$$

We know that there is a real expression under trace, so Lindblad operators are such that

$$\text{Tr} \left[L_i^\dagger L_i n \rho \right] = \text{Tr} \left[L_i^\dagger L_i n \rho \right]^\dagger = \text{Tr} \left[\rho^\dagger n^\dagger L_i^\dagger L_i \right] = \text{Tr} \left[\rho n L_i^\dagger L_i \right] = \text{Tr} \left[n L_i^\dagger L_i \rho \right]$$

and this is two last sums are the same.

18.3.3 Problems about Very Specific Models of Quantum Kinetics

19 Other problems of kinetics

19.1 Problems about kinetics of special systems

19.1.1 Problems about Kinetics of Neutrons

Колоколов-6. Замедление нейтронов

Найти стационарное пространственное распределение в зависимости от энергии для точечного источника моноэнергетических нейтронов, замедляющихся в среде в результате упругого рассеяния на ядрах массой $A \gg 1$, считая сечение рассеяния не зависящим от энергии нейтрона.

Качественное рассмотрение.

При рассеянии легкой частицы массой m (нейтрона), движущейся со скоростью v , на неподвижной частице массой $M \approx At$, переданный импульс меняется от нулевого до максимального $\Delta P \approx 2mv$, так что теряемая энергия $\Delta \epsilon \approx (\Delta P)^2 / 2M \sim (m/M)\epsilon$. Тогда для того, чтобы замедлиться от энергии ϵ_0 до ϵ , нейтрону потребуется испытать число соударений N , определяемое из соотношения $(1 - m/M)^N \sim \epsilon / \epsilon_0$, т. е. $N \sim (M/m) \ln(\epsilon_0 / \epsilon)$.

Если длина свободного пробега равна λ , то вероятность $P(r)$ оказаться на расстоянии r за N шагов длиной λ в результате случайного блуждания пропорциональна

$$P(r) \sim \exp \left(-\frac{3r^2}{2N\lambda^2} \right) = \exp \left(-\frac{3r^2}{2\lambda^2(M/m) \ln(\epsilon_0 / \epsilon)} \right).$$

Эта же величина определяет и распределение числа нейтронов по энергии с точностью до предэкспоненциального множителя.

Описание замедления нейтронов с помощью уравнения Фоккера - Планка.

Для количественного описания процесса замедления нейтронов рассмотрим кинетическое уравнение для функции распределения нейтронов $f(\vec{r}, \vec{p})$ по импульсам $\vec{p}$ и координатам $\vec{r}$ в стационарном случае при отсутствии внешних полей:

$$\vec{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} = \int d^3 \vec{p}_1 [w(\vec{p}, \vec{p}_1) f(\vec{p}_1) - w(\vec{p}_1, \vec{p}) f(\vec{p})],$$

где $w(\vec{p}_1, \vec{p}) d^3 \vec{p}_1$ - вероятность рассеяния в единицу времени нейтрона из состояния с импульсом $\vec{p}$ в состояние с импульсом $\vec{p}_1$ в интервале $d^3 \vec{p}_1$.

При рассеянии нейтронов на тяжелых ядрах с массой $M \gg m$ относительное изменение энергии нейтрона мало, и если им вовсе пренебречь, то в правой части в интеграле столкновений надо положить

$|\vec{p}_1| = |\vec{p}|$. В этом случае вероятность рассеяния $w(\vec{p}_1, \vec{p})$ симметрична относительно перестановки импульсов и интеграл столкновений I_0 принимает вид

$$I_0[f] = \int d^3\vec{p}_1 w(\vec{p}_1, \vec{p}) [f(\vec{p}_1) - f(\vec{p})]$$

Ищем решение кинетического уравнения в виде

$$f(\vec{r}, \vec{p}) = f_0(\vec{r}, |\vec{p}|) + g(\vec{r}, \vec{p}),$$

где f_0 зависит лишь от модуля импульса, и, следовательно, $I_0[f_0] = 0$, а g является малой поправкой. Получающемуся кинетическому уравнению

$$\vec{v} \cdot \frac{\partial f_0}{\partial \vec{r}} = \int d^3\vec{p}_1 w(\vec{p}_1, \vec{p}) [g(\vec{p}_1) - g(\vec{p})]$$

удовлетворяет функция

$$g(\vec{r}, \vec{p}) = -\vec{v} \cdot \frac{\partial f_0}{\partial \vec{r}} \tau(|\vec{p}|),$$

где

$$\tau^{-1}(|\vec{p}|) = \int d^3\vec{p}_1 w(\vec{p}_1, \vec{p}) [1 - \cos \theta],$$

а θ - угол между импульсами $\vec{p}$ и $\vec{p}_1$. По порядку величины τ - время свободного пробега нейтрона между столкновениями.

Поскольку нас интересует функция распределения нейтронов $f(\vec{r}, \varepsilon)$ по энергиям ε и координатам $\vec{r}$, в кинетическом уравнении (661) нужно усреднить функцию $f(\vec{r}, \vec{p})$ по всем направлениям импульсов:

$$f(\vec{r}, \varepsilon) = \langle f(\vec{r}, \vec{p}) \rangle = \int \frac{d\Omega_p}{4\pi} f(\vec{r}, \vec{p}).$$

Тогда при усреднении в левой части кинетического уравнения от члена $\langle \vec{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} \rangle$ останется лишь вклад от g : $\langle \vec{v} \cdot \frac{\partial g}{\partial \vec{r}} \rangle = \langle \vec{v} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{r}} (-\tau \vec{v} \cdot \frac{\partial f_0}{\partial \vec{r}}) \rangle = -\tau v^2 \frac{\partial^2 f_0}{\partial r_i \partial r_j} \int \frac{d\Omega_p}{4\pi} \frac{p_i p_j}{p^2} = -\frac{\tau v^2}{3} \frac{\partial^2 f_0}{\partial r^2}$. (668) Представив вероятность перехода в единицу времени $w(\vec{p}_1, \vec{p}) d^3\vec{p}_1 = v N d\sigma$, где N - плотность числа рассеивающих нейтроны ядер, $d\sigma$ - дифференциальное сечение рассеяния, выражение для τ можно переписать в виде

$$\tau^{-1}(|\vec{p}|) = \int d^3\vec{p}_1 w(\vec{p}_1, \vec{p}) [1 - \cos \theta] = \int v N d\sigma [1 - \cos \theta] = v N \sigma_{tr} \equiv \frac{v}{\lambda},$$

где величину $\sigma_{tr} \equiv \int d\sigma [1 - \cos \theta]$ называют транспортным сечением столкновений, а $\lambda \equiv 1/N\sigma_{tr}$ - длина свободного пробега нейтрона. Тогда коэффициент диффузии нейтронов D равен $\tau v^2/3 = \lambda v/3$

Учтем теперь в интеграле столкновений небольшое изменение энергии нейтрона при рассеянии на тяжелых ядрах ($\Delta\varepsilon/\varepsilon \sim m/M$). Для этого выделим явно из вероятности перехода $w(\vec{p}_1, \vec{p})$ дельтафункцию, учитывающую законы сохранения энергии и импульса при упругом рассеянии нейтрона на ядрах:

$$w(\vec{p}_1, \vec{p}) = W \delta(\varepsilon - \varepsilon' - \Delta), \quad w(\vec{p}, \vec{p}_1) = W \delta(\varepsilon - \varepsilon' + \Delta),$$

где $\Delta = (\vec{p} - \vec{p}_1)^2/2M$ - энергия отдачи ядра при рассеянии нейтрона, а W зависит от $|\vec{p}|, |\vec{p}_1|$ и θ - угла между импульсами и симметрична относительно перестановки $\vec{p}$ и $\vec{p}_1$. (Например, по теории возмущений

$$dw(\vec{p}_1, \vec{p}) = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle \vec{p}_1 | \hat{V} | \vec{p} \rangle \right|^2 \delta(\varepsilon_i - \varepsilon_f) d^3\vec{p}_1,$$

где $\hat{V}$ - рассеивающий потенциал ядра, $\varepsilon_i, \varepsilon_f$ - начальная и конечная энергия системы "нейтрон + ядро".)

Тогда часть интеграла столкновений I_1 , связанная с изменением энергии нейтрона при рассеянии, есть

$$I_1 = \int d^3\vec{p}_1 W [-f_0(\varepsilon) \delta(\varepsilon - \varepsilon' - \Delta) + f_0(\varepsilon') \delta(\varepsilon - \varepsilon' + \Delta)]$$

Здесь в функции распределения взят только основной вклад f_0 . Разлагая выражение в квадратных скобках по малому параметру Δ , получаем

$$I_1 = \int d^3\vec{p}_1 W \Delta \left[2f_0(\varepsilon) \delta'(\varepsilon - \varepsilon') + \frac{\partial f_0(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \delta(\varepsilon - \varepsilon') \right].$$

Первый член запишем как

$$\begin{aligned} 2f_0 \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \int d^3 \vec{p}_1 W \Delta \delta(\varepsilon - \varepsilon') - 2f_0 \int d^3 \vec{p}_1 W \delta(\varepsilon - \varepsilon') \frac{\partial \Delta}{\partial \varepsilon} = \\ = 2f_0 \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \left[\frac{2m\varepsilon}{M} \frac{v}{\lambda} \right] - 2f_0 \frac{m}{M} \frac{v}{\lambda} = \frac{4f_0 m v}{M \lambda}, \end{aligned}$$

где использовано $v = \sqrt{2\varepsilon/m}$ и

$$\delta(\varepsilon - \varepsilon') \Delta = \delta(\varepsilon - \varepsilon') \frac{2m\varepsilon}{M} (1 - \cos \theta), \quad \delta(\varepsilon - \varepsilon') \frac{\partial \Delta}{\partial \varepsilon} = \delta(\varepsilon - \varepsilon') \frac{m}{M} (1 - \cos \theta).$$

Второй член в I_1 дает вклад

$$\frac{\partial f_0(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \int d^3 \vec{p}_1 W \Delta \delta(\varepsilon - \varepsilon') = \frac{\partial f_0(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \frac{2m\varepsilon}{M} \frac{v}{\lambda}.$$

Суммируя вклады, получаем

$$I_1 = \frac{2m}{M\lambda} \left(2f_0 v + v\varepsilon \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) = \frac{2\sqrt{2m}}{M\lambda} \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} \frac{\partial}{\partial \varepsilon} (f_0 \varepsilon^2).$$

Более общий способ приведения интеграла столкновений к дивергентному виду приведен в приложении.

Для стационарного распределения, с учетом $\lambda = \text{Const}$, $v = \sqrt{2\varepsilon/m}$, получаем

$$-\frac{\lambda}{3} \sqrt{\frac{2\varepsilon}{m}} \frac{\partial^2 f_0}{\partial r^2} = \frac{2\sqrt{2m}}{M\lambda} \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} \frac{\partial}{\partial \varepsilon} (f_0 \varepsilon^2)$$

После умножения этого уравнения на $\varepsilon^{3/2}$, имеем

$$-\frac{\lambda^2}{6} \frac{M}{m} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (\varepsilon^2 f) = \varepsilon \frac{\partial}{\partial \varepsilon} (\varepsilon^2 f)$$

Вводя обозначения

$$q \equiv \varepsilon^2 f, \quad \tau \equiv \frac{\lambda^2}{6} \frac{M}{m} \ln \frac{\varepsilon_0}{\varepsilon},$$

где ε_0 - начальная энергия нейтрона, так что значение $\varepsilon = \varepsilon_0$ соответствует $\tau = 0$, получаем окончательно уравнение типа теплопроводности:

$$\frac{\partial q}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 q}{\partial r^2}$$

Начальному условию при $\tau = 0$ (т. е. $\varepsilon = \varepsilon_0$) $f(\varepsilon_0, r) \sim \delta(r)$ - точечный источник моноэнергетических нейтронов в начале координат - соответствует решение

$$q = A \exp \left(-\frac{r^2}{4\tau} \right)$$

Возвращаясь к исходным обозначениям, имеем

$$f(\varepsilon, r) = \frac{A}{\varepsilon^2} \exp \left[-\frac{3r^2}{2\lambda^2 (M/m) \ln (\varepsilon_0/\varepsilon)} \right].$$

Из этого выражения следует, что вероятность найти нейтрон с энергией ε заметно отлична от нуля на расстояниях, не превышающих

$$r_\varepsilon \sim \lambda \sqrt{\frac{M}{m} \ln (\varepsilon_0/\varepsilon)}$$

Вблизи начала координат плотность потока нейтронов в единичном энергетическом интервале $\Phi(\varepsilon)$, равная произведению скорости на плотность числа нейтронов, есть

$$\Phi(\varepsilon) = f(\varepsilon) \rho(\varepsilon) v \sim \frac{1}{\varepsilon^2} \sqrt{\varepsilon} \sqrt{\varepsilon} \sim \frac{1}{\varepsilon},$$

что выражает хорошо известный "закон" Ферми. Естественно, что гауссово распределение устанавливается на расстоянии от источника $r > \lambda$. Однако оно нарушается и на достаточно больших расстояниях, так как там доминируют нейтроны, пролетевшие расстояние r без столкновений, поскольку вероятность этого пропорциональна $\exp(-r/\lambda)$ и спадает гораздо медленнее гауссового распределения. Приравнявая показатели экспонент для этих двух распределений, получаем оценку максимального расстояния от источника, где еще применимо диффузионное приближение

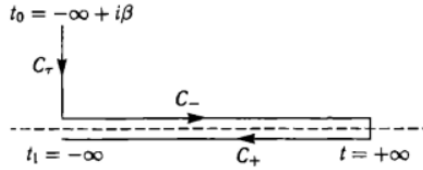
$$r_{\max} \sim \lambda \frac{M}{m} \ln (\varepsilon_0/\varepsilon).$$

Отметим, что $r_{\max} \gg r_\varepsilon$ для $M \gg m, \varepsilon_0 \gg \varepsilon$.

19.1.2 Problems about Keldysh Technique

БРМ-36.

Одним из систематических методов нахождения квантового кинетического уравнения является использование контура Келдыш из точки $t_0 = -\infty + i\beta$, где $\beta = 1/T$ - обратная температура, и заканчивающийся в точке $t_1 = -\infty$, можно схематически изобразить в виде последовательности трех линий $C = C_\tau + C_- + C_+$ (рис. 2.2). Линия C_τ выходит из точки $t_0 = -\infty + i\beta$ и приходит в точку $-\infty + i\delta$, из которой начинается линия C_- , идущая вдоль действительной оси времени t и приходящая в точку $t = +\infty$. Далее контур поворачивает в обратном направлении к конечной точке $t_1 = -\infty$ и проходит под действительной осью времени t , образуя часть C_+ общего контура C . На контуре Келдыша C вводится упорядочение по времени, показанное стрелками на рис. 2.2, т. е. момент времени t на части контура C_- всегда раньше момента времени t' на части контура C_+ . (В этой и последующих задачах мы подразумеваем систему единиц, в которой постоянная Планка равна единице $\hbar = 1$.)



а) Найти для электрона, энергия которого $\varepsilon = \varepsilon_p - \mu$, функцию Грина $G(t, t')$, удовлетворяющую уравнению

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t} - \varepsilon \right) G(t, t') = \delta(t - t')$$

где время t и t' меняется вдоль контура Келдыша C . Функция Грина электрона, как частицы отвечающей ферми-статистике, подчиняется условию антипериодичности

$$G(t_1, t) = -G(t_0, t).$$

б) Отдельно рассмотреть значения функции Грина $G(t, t')$, когда моменты времени t и t' лежат на одинаковых и разных частях контура Келдыша C

36

а) Рассмотрим решение уравнения

$$\begin{cases} (i \frac{\partial}{\partial t} - \varepsilon) g(t) = f(t) \\ g(t_0) = -g(t_1) \end{cases}$$

с общей правой частью $f(t)$, где время t изменяется вдоль контура Келдыша C (рис. 3.14). Согласно определению функции Грина $G(t, t')$ общее решение уравнения можно выразить через функцию Грина $G(t, t') = G(t - t')$ следующим образом:

$$g(t) = \int_C G(t - t') f(t') dt'$$

где интегрирование производится вдоль всего контура C . Представим решение уравнения в виде суммы решения однородного уравнения с

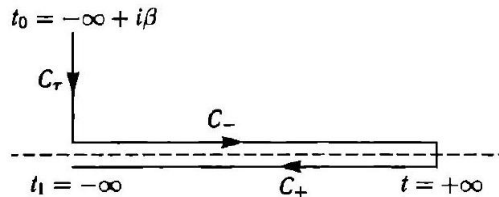


Рис. 3.14. Контур Келдыша произвольной постоянной A и частного решения уравнения с правой частью $f(t)$

$$g(t) = Ae^{-i\varepsilon t} - ie^{-i\varepsilon t} \int_{t_0}^t e^{i\varepsilon t'} f(t') dt'$$

Воспользовавшись условием антипериодичности, найдем неизвестную постоянную A из соотношения

$$-Ae^{-i\varepsilon t_0} = Ae^{-i\varepsilon t_1} - ie^{-i\varepsilon t_1} \int_C e^{i\varepsilon t'} f(t') dt'$$

где интегрирование производится по всему контуру C от начала до конца. Таким образом,

$$A = in_f(\varepsilon) \int_C e^{i\varepsilon t'} f(t') dt'$$

где $n_f(\varepsilon) = 1/(e^{\varepsilon/\tau} + 1)$ - распределение Ферми. Теперь решение можно записать в виде

$$g(t) = \int_C i[n_f(\varepsilon) - \theta_c(t-t')] e^{-i\varepsilon(t-t')} f(t') dt'$$

где мы ввели функцию Хевисайда $\theta_c(t-t')$, определенную на контуре Келдыша C как

$$\theta_c(t-t') = \begin{cases} 1, & t \geq t' \\ 0, & t < t' \end{cases}$$

Индекс c означает упорядочение по времени в смысле контура C , т.е. $t < t'$ подразумевает, что момент времени t лежит на контуре раньше, чем момент времени t' . Очевидны следующие свойства контурной функции Хевисайда:

$$\int_C \theta_c(t-t') dt' = \int_{t_0}^t dt', \quad \theta_c(t_0-t') \equiv 0, \quad \theta_c(t_1-t') \equiv 1$$

Итак, функция Грина электрона дается простым выражением

$$G(t, t') = G(t-t') = i[n_f(\varepsilon) - \theta_c(t-t')] e^{-i\varepsilon(t-t')}$$

б)

На действительной части контура $C_K = C_- + C_+$ в зависимости от взаимного расположения точек времени t и t' на его частях C_- и C_+ имеется четыре возможности. Соответственно, структуру функции Грина $G(t, t')$ удобно представить в виде матрицы 2×2 :

$$G(t, t') \rightarrow \begin{pmatrix} G^{--} & G^{-+} \\ G^{+-} & G^{++} \end{pmatrix}$$

Пусть оба момента времени t и t' одновременно лежат на верхнем контуре C_- , т.е. $t \in C_-$ и $t' \in C_-$. В этом случае контурная функция Хевисайда $\theta_c(t-t')$ совпадает с обычной функцией Хевисайда $\theta(t-t')$. Тогда соответствующая компонента функции Грина равна

$$G(t-t') \equiv G^{--}(t-t') = i[n_f - \theta(t-t')] e^{-i\varepsilon(t-t')}$$

Ее фурье-компонента определяется как

$$G^{--}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} G^{--}(t) e^{i\omega t} dt = i \int_{-\infty}^{\infty} [n_f - \theta(t)] e^{i(\omega-\varepsilon)t} dt$$

$$G^{--}(\omega) = \mathcal{P} \frac{1}{\omega - \varepsilon} - i\pi(1 - 2n_f) \delta(\omega - \varepsilon)$$

где $\mathcal{P}(1/x)$ - главное значение интеграла от $1/x$.

2) Пусть момент времени t лежит на верхнем контуре C_- , а момент t' на нижнем C_+ , т.е. $t \in C_-$ и $t' \in C_+$. В этом случае t всегда раньше t' и $\theta_c(t-t') \equiv 0$. Соответствующая компонента функции Грина равна

$$G(t-t') \equiv G^{-+}(t-t') = in_f e^{-i\varepsilon(t-t')}$$

Также принято обозначение меньше: $G^< = G^{-+}$. Фурье-компоненту определим как

$$G^{-+}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} G^{-+}(t) e^{i\omega t} dt = in_f \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(\omega-\varepsilon)t} dt = 2\pi in_f \delta(\omega - \varepsilon)$$

3) Пусть время t лежит на нижнем контуре C_+ , а время t' на верхнем C_- , т.е. $t \in C_+$ и $t' \in C_-$. В этом случае t всегда позже t' и $\theta_C(t - t') \equiv 1$. Соответствующая компонента функции Грина равна

$$G(t - t') \equiv G^{+-}(t - t') = -i(1 - n_f) e^{-i\varepsilon(t - t')}$$

Также принято обозначение больше: $G^> = G^{+-}$. Фурье-компоненту определяем как

$$G^{+-}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} G^{+-}(t) e^{i\omega t} dt = -2\pi i (1 - n_f) \delta(\omega - \varepsilon)$$

В термодинамическом равновесии: $G^< = -e^{-\beta\varepsilon} G^>$.

4) Оба момента времени t и t' лежат на нижней части контура C_+ , т.е. $t \in C_+$ и $t' \in C_+$. Так как принято считать, что обычное время изменяется от $-\infty$ до $+\infty$ в направлении действительной оси времени, то направление времени на контуре C_+ будет противоположным. Поэтому, если на обычной действительной оси времени момент времени t раньше момента времени t' , то на контуре C_+ , наоборот, момент t' будет раньше момента t . Тогда контурная функция $\theta_c(t - t')$ будет равна обычной функции Хевисайда с переставленными аргументами, т.е. $\theta_c(t - t') = \theta(t' - t)$. Итак, определяем

$$G(t - t') = G^{++}(t - t') = i[n_f(\varepsilon) - \theta(t' - t)] e^{-i\varepsilon(t - t')}$$

Соответствующая фурье-компонента равна

$$G^{++}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} G^{++}(t) e^{i\omega t} dt = i \int_{-\infty}^{\infty} [n_f - \theta(-t)] e^{i(\omega - \varepsilon)t} dt$$

$$G^{++}(\omega) = -\mathcal{P} \frac{1}{\omega - \varepsilon} - i\pi(1 - 2n_f) \delta(\omega - \varepsilon)$$

Нетрудно также увидеть общее свойство компонент:

$$G^{++}(\omega) = -[G^{--}(\omega)]^*$$

Ниже мы дадим ряд полезных определений. Определим запаздывающую функцию Грина G^R как

$$G^R(t) = G^{--}(t) - G^{+-}(t) = \theta(t) [G^>(t) - G^<(t)] = -i\theta(t) e^{-i\varepsilon t}$$

и введем ее фурье-компоненту обычным образом

$$G^R(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} G^R(t) e^{i\omega t} dt = \frac{1}{\omega - \varepsilon + i\delta}$$

Полюс фурье-компоненты $\omega = \varepsilon - i\delta$ лежит в нижней полуплоскости ω , как и положено для запаздывающих функций.

Соответствующее определение опережающей функции Грина G^A вводится согласно

$$G^A(t) = G^{-+}(t) - G^{++}(t) = -\theta(-t) [G^>(t) - G^<(t)] = i\theta(-t) e^{-i\varepsilon t}$$

Ее фурье-компонента равна

$$G^A(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} G^A(t) e^{i\omega t} dt = \frac{1}{\omega - \varepsilon - i\delta}$$

Наоборот, здесь полюс фурье-компоненты $\omega = \varepsilon + i\delta$ лежит в верхней полуплоскости ω . Наконец введем аномальную функцию Келдыша G^K

$$G^K(t) = G^{--}(t) + G^{++}(t) = G^>(t) + G^<(t) = -i(1 - 2n_f) e^{-i\varepsilon t}$$

фурье-компонента которой равна

$$G^K(\omega) = -2\pi i (1 - 2n_f) \delta(\omega - \varepsilon) = -2\pi i \operatorname{th} \frac{\omega}{2T} \delta(\omega - \varepsilon)$$

При термодинамическом равновесии аномальная функция G^K может быть выражена через G^R и G^A :

$$G^K(\omega) = [G^R(\omega) - G^A(\omega)] \operatorname{th} \frac{\omega}{2T}$$

в) В заключение рассмотрим область контура, когда оба момента времени t и t' лежат на мнимой оси времени. Удобно ввести вещественную переменную $\tau = it$ и, соответственно, $\tau - \tau' = i(t - t')$. Разность времен $\tau - \tau'$ меняется в области от $-\beta$ до $+\beta$ и функция Грина G будет определена в области $[-\beta, +\beta]$.

Определим мацубаровскую функцию Грина $\mathfrak{G}(\tau)$, считая $\tau = it$,

$$\mathfrak{G}(\tau) = -iG(-i\tau)$$

Поскольку на этой части контура $\theta_c(t - t') = \theta(\tau - \tau')$, то мацубаровская функция Грина $\mathfrak{G}(\tau)$ будет равна

$$\mathcal{G}(\tau) = [n_f(\varepsilon) - \theta(\tau)] e^{-\varepsilon\tau}$$

При этом легко увидеть, что

$$\begin{cases} \mathfrak{G}(\tau > 0) = -(1 - n_f(\varepsilon)) e^{-\varepsilon\tau} \\ \mathfrak{G}(\tau < 0) = n_f(\varepsilon) e^{-\varepsilon\tau} \end{cases}$$

Проверим свойство антипериодичности мацубаровской функции Грина для ферми-статистики:

$$\mathfrak{G}(\tau < 0) = n_f e^{-\varepsilon\tau} = (1 - n_f) e^{-\beta\varepsilon} e^{-\varepsilon\tau} = -\mathfrak{G}(\tau + \beta)$$

Благодаря последнему свойству функция $\mathfrak{G}(\tau)$ может быть разложена в ряд Фурье по нечетным мацубаровским частотам $\omega_n = \pi T(2n + 1)$, где $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ - целые числа. В результате имеем

$$\mathfrak{G}(\tau) = T \sum_{n=-\infty}^{\infty} \mathfrak{G}(\omega_n) e^{-i\omega_n\tau}, \quad \mathfrak{G}(\omega_n) = \frac{1}{2} \int_{-\beta}^{\beta} \mathfrak{G}(\tau) e^{i\omega_n\tau} d\tau = \frac{1}{i\omega_n - \varepsilon}$$

БРМ-37.

Функция Грина $G(t, t')$ бозе-частицы с энергией $\varepsilon = \varepsilon_p - \mu$ на контуре Келдыша C подчиняется тому же уравнению, что и функция Грина электрона

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t} - \varepsilon\right) G(t, t') = \delta(t - t').$$

Время t и t' меняется вдоль контура Келдыша C . Отличие бозевской статистики от статистики Ферми состоит только в условии периодичности. Для бозевских частиц накладывается следующее граничное условие

$$G(t_1, t) = +G(t_0, t).$$

Найти функцию Грина бозе-частицы $G(t, t')$ на контуре Келдыша C и ее значения, когда моменты времени t и t' лежат на одинаковых и разных частях контура C .

37

Решение аналогично рассмотрению предыдущей задачи. Общее решение уравнения

$$\begin{cases} \left(i \frac{\partial}{\partial t} - \varepsilon\right) g(t) = f(t) \\ g(t_0) = g(t_1) \end{cases}$$

дается соотношением

$$g(t) = Ae^{-i\varepsilon t} - ie^{-i\varepsilon t} \int_{t_0}^t e^{i\varepsilon t'} f(t') dt'$$

Условие периодичности

$$Ae^{-i\varepsilon t_0} = Ae^{-i\varepsilon t_1} - ie^{-i\varepsilon t_1} \int_C e^{i\varepsilon t'} f(t') dt'$$

где интегрирование производится по всему контуру C от начала до конца, приводит к

$$A = -in_b(\varepsilon) \int_C e^{i\varepsilon t'} f(t') dt'$$

где $n_b(\varepsilon) = 1/(e^{\varepsilon/T} - 1)$ - распределение Бозе. В результате решение уравнения дается выражением

$$g(t) = -i \int_C [n_b(\varepsilon) + \theta_c(t - t')] e^{-i\varepsilon(t-t')} f(t') dt'$$

где $\theta_c(t-t')$ - контурная функция Хевисайда. Соответственно, функция Грина равна

$$G(t, t') = G(t-t') = -i[n_b(\varepsilon) + \theta_c(t-t')]e^{-i\varepsilon(t-t')}$$

б) На действительной части контура $C_K = C_- + C_+$ также имеется четыре возможности для взаимного расположения моментов времени t и t' . Структура функции Грина $G(t, t')$ также представима в виде матрицы 2×2 :

$$G(t, t') \rightarrow \begin{pmatrix} G^{--} & G^{-+} \\ G^{+-} & G^{++} \end{pmatrix}$$

Оба момента времени t и t' лежат на верхнем контуре C_- . В этом случае находим

$$G(t-t') \equiv G^{--}(t-t') = -i[n_b + \theta(t-t')]e^{-i\varepsilon(t-t')}$$

$$G^{--}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} G^{--}(t)e^{i\omega t}dt = \mathcal{P}\frac{1}{\omega - \varepsilon} - \pi i(1 + 2n_b)\delta(\omega - \varepsilon)$$

где $\mathcal{P}(1/x)$ - главное значение интеграла от $1/x$.

2) Время t лежит на верхнем контуре C_- , а t' на нижнем C_+ . В результате получим

$$G(t-t') \equiv G^{-+}(t-t') = -in_b e^{-i\varepsilon(t-t')}$$

$$G^{-+}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} G^{-+}(t)e^{i\omega t}dt = -2\pi in_b \delta(\omega - \varepsilon)$$

3) Время t лежит на нижнем контуре C_+ , а t' на верхнем C_- . Тогда имеем

$$G(t-t') \equiv G^{+-}(t-t') = -i(n_b + 1)e^{-i\varepsilon(t-t')}$$

$$G^{+-}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} G^{+-}(t)e^{i\omega t}dt = -2\pi i(n_b + 1)\delta(\omega - \varepsilon)$$

4) Оба момента времени t и t' одновременно лежат на нижней части контура C_+ . В итоге приходим к следующему ответу:

$$G(t-t') \equiv G^{++}(t-t') = -i[n_b + \theta(t'-t)]e^{-i\varepsilon(t-t')}$$

$$G^{++}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} G^{++}(t)e^{i\omega t}dt = -\mathcal{P}\frac{1}{\omega - \varepsilon} - \pi i(1 + 2n_b)\delta(\omega - \varepsilon)$$

В бозевском случае также сохраняется общая связь между компонентами функции Грина

$$G^{++}(\omega) = -[G^{--}(\omega)]^*$$

Запаздывающая $G^R(t)$ и опережающая $G^A(t)$ функции Грина вводятся по аналогии с предыдущей задачей

$$G^R(t) = G^{--}(t) - G^{-+}(t) = \theta(t)[G^>(t) - G^<(t)] = -i\theta(t)e^{-i\varepsilon t}$$

$$G^A(t) = G^{-+}(t) - G^{++}(t) = -\theta(-t)[G^>(t) - G^<(t)] = i\theta(-t)e^{-i\varepsilon t}$$

Их фурье-компоненты отличаются знаком мнимой части

$$G^{R(A)}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} G^{R(A)}(t)e^{i\omega t}dt = \frac{1}{\omega - \varepsilon \pm i\delta}$$

Аномальная функция Келдыша $G^K(t)$ вводится соотношением

$$G^K(t) = G^{--}(t) + G^{++}(t) = G^>(t) + G^<(t) = -i(1 + 2n_b)e^{-i\varepsilon t}$$

и ее фурье-компонента равна

$$G^K(\omega) = -2\pi i(1 + 2n_b)\delta(\omega - \varepsilon) = -2\pi i \operatorname{cth} \frac{\omega}{2T} \delta(\omega - \varepsilon)$$

При термодинамическом равновесии аномальная функция G^K может быть выражена через G^R и G^A :

$$G^K(\omega) = [G^R(\omega) - G^A(\omega)] \operatorname{cth} \frac{\omega}{2T}$$

в) Наконец рассмотрим область контура, когда оба момента времени t и t' лежат на мнимой оси времени. Также вводим вещественную переменную $\tau = it$. Разность времен $\tau - \tau'$ меняется в области от $-\beta$ до $+\beta$. Функция Грина G будет определена в области $[-\beta, +\beta]$.

Определим мадубаровскую функцию Грина $\mathfrak{G}(\tau)$, считая $\tau = it$,

$$\mathfrak{G}(\tau) = -iG(-i\tau)$$

Поскольку на этой части контура $\theta_c(t - t') = \theta(\tau - \tau')$, то мадубаровская функция Грина $\mathfrak{G}(\tau)$ равна

$$\mathfrak{G}(\tau) = -[n_b(\varepsilon) + \theta(\tau)] e^{-\varepsilon\tau}$$

При этом легко увидеть, что

$$\begin{cases} \mathfrak{G}(\tau > 0) = -(n_b(\varepsilon) + 1) e^{-\varepsilon\tau} \\ \mathfrak{G}(\tau < 0) = -n_b(\varepsilon) e^{-\varepsilon\tau} \end{cases}$$

Проверим свойство периодичности мадубаровской функции Грина для бозе-статистики:

$$\mathfrak{G}(\tau < 0) = -n_b e^{-\varepsilon\tau} = -(1 + n_b) e^{-\beta\varepsilon} e^{-\varepsilon\tau} = +\mathfrak{G}(\tau + \beta)$$

Благодаря последнему свойству функция $\mathfrak{G}(\tau)$ может быть разложена в ряд Фурье по четным мадубаровским частотам $\omega_n = 2\pi nT$, где $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ - целые числа. В результате получим

$$\mathfrak{G}(\tau) = T \sum_{n=-\infty}^{\infty} \mathfrak{G}(\omega_n) e^{-i\omega_n\tau}, \quad \mathfrak{G}(\omega_n) = \frac{1}{2} \int_{-\beta}^{\beta} \mathfrak{G}(\tau) e^{i\omega_n\tau} d\tau = \frac{1}{i\omega_n - \varepsilon}$$

БРМ-38.

Контурная функция Грина $\widehat{G}$ в пространстве Келдыша может быть реализована в виде матрицы 2×2 :

$$\widehat{G} = \begin{pmatrix} G^{--} & G^{-+} \\ G^{+-} & G^{++} \end{pmatrix}.$$

Компоненты матрицы не являются линейно независимыми и связаны с запаздывающей G^R , опережающей G^A и аномальной G^K функциями Грина следующими тождествами:

$$\begin{aligned} G^R &= G^{--} - G^{-+} = G^{+-} - G^{++}, \\ G^A &= G^{--} - G^{+-} = G^{-+} - G^{++}, \\ G^K &= G^{-+} + G^{+-} = G^{--} + G^{++}. \end{aligned}$$

С помощью преобразования поворота R в пространстве Келдыша можно привести контурную функцию Грина $\widehat{G}$ к треугольному виду - антидиагональному

$$R^{-1} \widehat{G} R \rightarrow \widehat{G} = \begin{pmatrix} 0 & G^A \\ G^R & G^K \end{pmatrix}$$

или, дополняя вращение R матрицей отражения P , можно привести к диагональному виду Ларкина-Овчинникова

$$R^{-1} P \widehat{G} R \rightarrow \widehat{G} = \begin{pmatrix} G^R & G^K \\ 0 & G^A \end{pmatrix}.$$

Найти матрицы преобразования R и P .

38

а) Прямым вычислением убеждаемся в том, что матрица R и ее обратная матрица R^{-1}

$$R = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{и} \quad R^{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$

приводят к искомому антидиагональному представлению

$$\begin{aligned} & \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G^{--} & G^{-+} \\ G^{+-} & G^{++} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} = \\ & = \begin{pmatrix} (G^{--} - G^{+-} - G^{+-} + G^{++}) & (G^{--} - G^{+-} + G^{+-} - G^{++}) \\ (G^{--} - G^{+-} + G^{+-} - G^{++}) & (G^{--} + G^{++} + G^{+-} + G^{+-}) \end{pmatrix} = 2 \begin{pmatrix} 0 & G^A \\ G^R & G^K \end{pmatrix} \end{aligned}$$

б) Искомые матрицы R и P , приводящие к диагональному представлению Ларкина-Овчинникова, имеют вид

$$R = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}, \quad P = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad \text{и} \quad R^{-1}P = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}.$$

Равенство

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G^{--} & G^{+-} \\ G^{+-} & G^{++} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} = 2 \begin{pmatrix} G^R & G^K \\ 0 & G^A \end{pmatrix}$$

легко проверяется с помощью соотношений между компонентами матричной функции Грина $\widehat{G}$.

БРМ-39.

Функция Грина $D_{\omega_0}(t, t')$ фононов с дисперсией $\omega_0 = \omega_0(k)$, где k - волновой вектор, удовлетворяет уравнению

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \omega_0^2(k) \right) D_{\omega_0}(t, t') = \omega_0^2(k) \delta(t - t').$$

Время t и t' изменяются вдоль контура Келдыша C (рис. 2.2). Фононы как бесспиновые частицы подчиняются статистике Бозе и на функцию Грина $D_{\omega_0}(t, t')$ накладывается условие периодичности

$$D_{\omega_0}(t_0, t') = D_{\omega_0}(t_1, t'),$$

которое выполняется тождественно при произвольной зависимости от фоновой частоты $\omega_0 = \omega_0(k)$ и связывает значения функции Грина в начальной t_0 и конечной t_1 точках контура Келдыша C .

Найти функцию Грина фононов $D_{\omega_0}(t, t')$ на контуре Келдыша C .

39.

Запишем уравнение

$$\begin{cases} \left(-\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \omega_0^2 \right) d(t) = \omega_0^2 f(t) \\ d(t_0) = d(t_1) \end{cases}$$

с общей правой частью $f(t)$ и временем t , лежащем на контуре Келдыша C с начальной точкой t_0 и конечной точкой t_1 . Решение уравнения выразим через функцию Грина $D_{\omega_0}(t, t') = D_{\omega_0}(t - t')$ согласно

$$d(t) = \int_C D_{\omega_0}(t - t') f(t') dt'$$

Представим общее решение в виде суммы решений однородного уравнения и частного решения исходного уравнения с правой частью

$$d(t) = Ae^{-i\omega_0 t} + Be^{i\omega_0 t} - \frac{i\omega_0}{2} e^{-i\omega_0 t} \int_{t_0}^t e^{i\omega_0 t'} f(t') dt' + \frac{i\omega_0}{2} e^{i\omega_0 t} \int_{t_0}^t e^{-i\omega_0 t'} f(t') dt'.$$

Перепишем это выражение с помощью функции Хевисайда $\theta_c(t - t')$, определенной на контуре C

$$\begin{aligned} d(t) = & Ae^{-i\omega_0 t} + Be^{i\omega_0 t} - \\ & - \frac{i\omega_0}{2} \int_C \theta_c(t - t') e^{-i\omega_0(t-t')} f(t') dt' + \frac{i\omega_0}{2} \int_C \theta_c(t - t') e^{i\omega_0(t-t')} f(t') dt' \end{aligned}$$

Условие периодичности $d(t_0) = d(t_1)$ в начальной $t_0 = -\infty + i\beta$ и конечной $t_1 = -\infty - i\delta$ точках контура C дает соотношение

$$\begin{aligned} Ae^{-i\omega_0 t_0} + Be^{i\omega_0 t_0} = & Ae^{-i\omega_0 t_1} + Be^{i\omega_0 t_1} - \\ & - \frac{i\omega_0}{2} e^{-i\omega_0 t_1} \int_C e^{i\omega_0 t'} f(t') dt' + \frac{i\omega_0}{2} e^{i\omega_0 t_1} \int_C e^{-i\omega_0 t'} f(t') dt' \end{aligned}$$

Поскольку это условие должно выполняться для произвольной частоты $\omega_0 = \omega_0(k)$, мы имеем отсюда два равенства для каждой из линейнонезависимых экспонент

$$\begin{aligned} Ae^{-i\omega_0 t_0} = & Ae^{-i\omega_0 t_1} - \frac{i\omega_0}{2} e^{-i\omega_0 t_1} \int_C e^{i\omega_0 t'} f(t') dt' \\ Be^{i\omega_0 t_0} = & Be^{i\omega_0 t_1} + \frac{i\omega_0}{2} e^{i\omega_0 t_1} \int_C e^{-i\omega_0 t'} f(t') dt' \end{aligned}$$

Далее находим неопределенные коэффициенты A и B

$$A = -\frac{i\omega_0}{2} n_p(\omega_0) \int_C e^{i\omega_0 t'} f(t') dt'$$

$$B = -\frac{i\omega_0}{2} (1 + n_p(\omega_0)) \int_C e^{-i\omega_0 t'} f(t') dt'$$

где $n_p(\omega_0) = 1/(e^{\beta\omega_0} - 1)$ - распределение Планка. В результате приходим к следующей функции Грина фононов:

$$D_{\omega_0}(t, t') = -\frac{i\omega_0}{2} \times$$

$$\times \left\{ [n_p(\omega_0) + \theta_c(t - t')] e^{-i\omega_0(t-t')} + [n_p(\omega_0) + \theta_c(t' - t)] e^{i\omega_0(t-t')} \right\}$$

Здесь мы учли, что $1 - \theta_c(t - t') = \theta_c(t' - t)$. Отметим следующее свойство симметрии $D_{\omega_0}(t, t') = D_{\omega_0}(t', t)$.

Структура функции Грина фононов представима в виде матрицы 2×2 в зависимости от расположения моментов времени t и t' на действительной части контура Келдыша $C_K = C_- + C_+$:

$$D_{\omega_0}(t, t') \rightarrow \begin{pmatrix} D_{\omega_0}^{--}(t, t') & D_{\omega_0}^{-+}(t, t') \\ D_{\omega_0}^{+-}(t, t') & D_{\omega_0}^{++}(t, t') \end{pmatrix}$$

Если оба момента времени t и t' лежат на верхней части контура C_- , то имеем

$$D_{\omega_0}^{--}(t, t') = D_{\omega_0}^{--}(t - t') =$$

$$= -\frac{i\omega_0}{2} \left\{ [n_p(\omega_0) + \theta(t - t')] e^{-i\omega_0(t-t')} + [n_p(\omega_0) + \theta(t' - t)] e^{i\omega_0(t-t')} \right\}$$

Фурье-гармоника $D_{\omega_0}^{--}$ равна

$$D^{--}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} D_{\omega_0}^{--}(t) e^{i\omega t} dt =$$

$$= \mathcal{P} \frac{\omega_0^2}{\omega^2 - \omega_0^2} - \frac{i\pi\omega_0}{2} (2n_p(\omega_0) + 1) [\delta(\omega - \omega_0) + \delta(\omega + \omega_0)]$$

где $\mathcal{P}(1/x)$ - главное значение интеграла от $1/x$.

2) Время t лежит на верхнем контуре C_- , а t' на нижнем C_+ . Тогда с учетом, что $\theta_c(t - t') \equiv 0$ и $\theta_c(t' - t) \equiv 1$, имеем

$$D_{\omega_0}^{-+}(t, t') = -\frac{i\omega_0}{2} \left\{ n_p(\omega_0) e^{-i\omega_0(t-t')} + (n_p(\omega_0) + 1) e^{i\omega_0(t-t')} \right\}$$

$$D^{-+}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} D_{\omega_0}^{-+}(t) e^{i\omega t} dt =$$

$$= -i\pi\omega_0 [n_p(\omega_0) \delta(\omega - \omega_0) + (n_p(\omega_0) + 1) \delta(\omega + \omega_0)]$$

Запаздывающую функцию Грина $D_{\omega_0}^R(t)$ определим следующим образом:

$$D_{\omega_0}^R(t) = D_{\omega_0}^{--}(t) - D_{\omega_0}^{+-}(t) = -\theta(t)\omega_0 \sin \omega_0 t$$

Ее фурье-гармоника будет равна

$$D^R(\omega) = \frac{1}{2} \left(\frac{\omega_0}{\omega - \omega_0 + i\delta} - \frac{\omega_0}{\omega + \omega_0 + i\delta} \right)$$

с полюсами $\omega = \pm\omega_0 - i\delta$, лежащими в нижней полуплоскости ω .

3) Пусть моменты времени t и t' лежат на нижней C_+ и верхней C_- частях контура Келдыша C_K . Тогда $\theta_c(t - t') \equiv 1$, $\theta_c(t' - t) \equiv 0$ и в результате получим саму функцию $D_{\omega_0}^{+-}(t, t')$ и ее фурье-гармонику

$$\begin{aligned}
D_{\omega_0}^{+-}(t, t') &= -\frac{i\omega_0}{2} \left\{ (n_p(\omega_0) + 1) e^{-i\omega_0(t-t')} + n_p(\omega_0) e^{i\omega_0(t-t')} \right\} \\
D^{+-}(\omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} D_{\omega_0}^{+-}(t) e^{i\omega t} dt = \\
&= -i\pi\omega_0 [(n_p(\omega_0) + 1) \delta(\omega - \omega_0) + n_p(\omega_0) \delta(\omega + \omega_0)]
\end{aligned}$$

4) Пусть теперь оба момента времени t и t' лежат на нижней C_+ части контура Келдыша C_K . Тогда находим

$$\begin{aligned}
D_{\omega_0}^{++}(t, t') &= D_{\omega_0}^{++}(t - t') = \\
&= -\frac{i\omega_0}{2} \left\{ [n_p(\omega_0) + \theta(t' - t)] e^{-i\omega_0(t-t')} + [n_p(\omega_0) + \theta(t - t')] e^{i\omega_0(t-t')} \right\}
\end{aligned}$$

Соответствующая фурье-гармоника $D_{\omega_0}^{++}(\omega)$ будет равна

$$\begin{aligned}
D^{++}(\omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} D_{\omega_0}^{++}(t) e^{i\omega t} dt = \\
&= -\mathcal{P} \frac{\omega_0^2}{\omega^2 - \omega_0^2} - \frac{i\pi\omega_0}{2} (2n_p(\omega_0) + 1) [\delta(\omega - \omega_0) + \delta(\omega + \omega_0)]
\end{aligned}$$

Опережающую функцию Грина $D_{\omega_0}^A(t)$ определим как

$$D_{\omega_0}^A(t) = D_{\omega_0}^{-+}(t) - D_{\omega_0}^{++}(t) = \theta(-t)\omega_0 \sin \omega_0 t$$

Ее фурье-гармоника будет равна

$$D^A(\omega) = \frac{1}{2} \left(\frac{\omega_0}{\omega - \omega_0 - i\delta} - \frac{\omega_0}{\omega + \omega_0 - i\delta} \right)$$

Оба полюса $\omega = \pm\omega_0 + i\delta$ лежат в верхней полуплоскости ω .

Аномальная функция Келдыша $D_{\omega_0}^K(t)$ для фононов вводится обычным образом

$$D_{\omega_0}^K(t) = D_{\omega_0}^{--}(t) + D_{\omega_0}^{++}(t) = -i\omega_0 (1 + 2n_p(\omega_0)) \cos \omega_0 t$$

и ее фурье-компонента равна

$$\begin{aligned}
D^K(\omega) &= -i\pi\omega_0 \operatorname{cth}(\beta\omega_0/2) [\delta(\omega - \omega_0) + \delta(\omega + \omega_0)] = \\
&= -i\pi\omega_0 \operatorname{cth}(\beta\omega/2) [\delta(\omega - \omega_0) - \delta(\omega + \omega_0)]
\end{aligned}$$

При термодинамическом равновесии аномальная функция $D^K(\omega)$ выражается через $D^R(\omega)$ и $D^A(\omega)$ согласно:

$$D^K(\omega) = [D^R(\omega) - D^A(\omega)] \operatorname{cth}(\beta\omega/2)$$

5) Мацубаровская функция Грина фононов $\mathfrak{D}_{\omega_0}(\tau)$ на мнимой части контура C , где мы положим $\tau = it$, определяется соотношением $\mathfrak{D}_{\omega_0}(\tau) = -iD_{\omega_0}(-i\tau)$ и равна

$$\mathfrak{D}_{\omega_0}(\tau) = -\frac{\omega_0}{2} \left\{ [n_p(\omega_0) + \theta(\tau)] e^{-\omega_0\tau} + [n_p(\omega_0) + \theta(-\tau)] e^{\omega_0\tau} \right\}$$

Свойство периодичности $\mathfrak{D}_{\omega_0}(\tau < 0) = \mathfrak{D}_{\omega_0}(\tau + \beta)$ для мацубаровской функции Грина фононов позволяет разложить функцию $\mathfrak{D}_{\omega_0}(\tau)$ в ряд Фурье по четным мацубаровским частотам $\omega_n = 2\pi nT$, где $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ - целые числа. В результате получим

$$\mathfrak{D}_{\omega_0}(\tau) = T \sum_{n=-\infty}^{\infty} \mathfrak{D}(\omega_n) e^{-i\omega_n\tau}, \quad \mathfrak{D}(\omega_n) = \frac{1}{2} \int_{-\beta}^{\beta} \mathfrak{D}(\tau) e^{i\omega_n\tau} d\tau = -\frac{\omega_0^2}{\omega_n^2 + \omega_0^2}$$

БРМ-40.

Во внешнем поле потенциала $U(t)$ функция Грина $G(t, t')$ электрона, энергия которого ξ , удовлетворяет следующему уравнению:

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t} - \xi - U(t)\right) G(t, t') = \delta(t - t'),$$

где оба моменты времени t и t' лежат на контуре Келдыша C (рис. 2.2).

а) Найти поправку первого порядка $\delta G(t, t')$ по возмущающему потенциалу $U(t)$ к функции Грина свободного электрона $G_0(t, t') = G_0(t - t')$

б) Определить возмущение распределения плотности электронов $\delta n(t)$ под действием потенциала $U(t)$, используя соотношение

$$n(t) = -2iG^{-+}(t, t),$$

которое связывает распределение плотности частиц $n(t)$ с компонентой функции Грина $G^{-+}(t, t')$. Коэффициент 2 учитывает наличие спина у электрона.

Разложить возмущение $\delta n(t)$ в интеграл Фурье по частоте ω и, получив соотношение $\delta n(\omega) = \chi(\omega)U(\omega)$, выразить восприимчивость или функцию линейного отклика $\chi(\omega)$ через запаздывающую G_0^R и опережающую G_0^A функции Грина, предполагая тепловое равновесие электронов с температурой T .

Записать выражение для мацубаровской восприимчивости $\chi^M(\omega_n) = \chi(\omega = i\omega_n)$ на четных мацубаровских частотах $\omega_n = 2\pi nT$ ($n = 0, \pm 1, \pm 2 \dots$), используя мацубаровские частотные функции Грина $b(\varepsilon_k)$, которые для фермионов определены на нечетных мацубаровских частотах $\varepsilon_k = \pi T(2k + 1)$

40

а) Перепишем дифференциальное уравнение для функции Грина $G(t, t')$ в эквивалентном интегральном виде

$$G(t, t') = G_0(t, t') + \int_{C_K} G_0(t, t'') U(t'') G(t'', t') dt''$$

где интеграл вычисляется вдоль всего контура Келдыша C_K . Отсюда легко написать поправку первого порядка по потенциалу внешнего поля $U(t)$

$$\delta G(t, t') = \int_{C_K} G_0(t, t'') U(t'') G_0(t'', t')_0 dt''$$

Изменяя пределы интегрирования на нижней ветви контура C_K согласно равенству

$$\int_{C_K} dt'' = \int_{-\infty}^{\infty} dt'' - \int_{-\infty}^{\infty} dt''$$

удобно представить поправку δG и потенциал U в матричной форме в виде двухкомпонентных матриц в пространстве Келдыша

$$\delta \widehat{G}(t, t') = \int_{-\infty}^{\infty} \widehat{G}_0(t, t'') \widehat{U}(t'') \widehat{G}_0(t'', t') dt'' \equiv \widehat{G}_0 \otimes \widehat{U} \widehat{G}_0$$

где введены матрицы

$$\widehat{G} = \begin{pmatrix} G^{--} & G^{-+} \\ G^{+-} & G^{++} \end{pmatrix}, \quad \widehat{U} = \begin{pmatrix} U & 0 \\ 0 & -U \end{pmatrix} = U \widehat{\tau}_3 \quad \text{и} \quad \widehat{\tau}_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Далее мы определим фурье-компоненты функции Грина как

$$\widehat{G}(\omega, \omega') = \int_{-\infty}^{\infty} \widehat{G}(t, t') e^{i\omega t - i\omega' t'} dt dt'$$

и, используя свойство однородности $G_0(t, t') = G_0(t - t')$ свободной функции Грина, найдем частотное представление для ее первой поправки

$$\begin{aligned} \delta \widehat{G}(\omega, \omega') &= \widehat{G}_0(\omega) \widehat{U}(\omega - \omega') \widehat{G}_0(\omega') = \\ &= \begin{pmatrix} G_0^{--} U G_0^{--} - G_0^{-+} U G_0^{+-} & G_0^{--} U G_0^{++} - G_0^{-+} U G_0^{++} \\ G_0^{+-} U G_0^{--} - G_0^{++} U G_0^{+-} & G_0^{+-} U G_0^{++} - G_0^{++} U G_0^{++} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Соответственно, для совпадающих моментов времени t и t' имеем

$$\delta \widehat{G}(t, t) = \iint \frac{d\omega}{2\pi} \frac{d\omega'}{2\pi} \widehat{G}_0(\omega) \widehat{U}(\omega - \omega') \widehat{G}_0(\omega') e^{-i(\omega - \omega')t}$$

а ее фурье-компонента примет вид

$$[\delta \widehat{G}(t, t)]_\omega = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon}{2\pi} \widehat{G}_0\left(\varepsilon + \frac{\omega}{2}\right) \widehat{U}(\omega) \widehat{G}_0\left(\varepsilon - \frac{\omega}{2}\right)$$

Отсюда интересующая нас компонента $[\delta G^{-+}(t, t)]_\omega$ матрицы $[\delta \widehat{G}(t, t)]_\omega$, которая определяет изменение плотности распределения $\delta n(\omega)$, будет равна

$$[\delta G^{-+}(t, t)]_\omega = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon}{2\pi} \left[G_0^{-+}\left(\varepsilon + \frac{\omega}{2}\right) U(\omega) G_0^{-+}\left(\varepsilon - \frac{\omega}{2}\right) - \right. \\ \left. - G_0^{-+}\left(\varepsilon + \frac{\omega}{2}\right) U(\omega) G_0^{++}\left(\varepsilon - \frac{\omega}{2}\right) \right]$$

б) Перейдем к определению плотности распределения согласно $n(t) = -2iG^{-+}(t, t)$. Для равновесной невозмущенной системы: $G_0(t, t') = n_f(\xi) e^{-i\xi(t-t')}$, где $n_f(\xi)$ - распределение Ферми, и $n_0 = -2iG_0^{-+}(t, t) = 2n_f$. Таким образом возмущение плотности распределения можно записать как $\delta n(\omega) = -2i[\delta G^{-+}(t, t)]_\omega$. Чтобы выразить это соотношение через запаздывающую G_0^R , опережающую G_0^A и аномальную G_0^K функции, мы воспользуемся следующими соотношениями между компонентами функции Грина $\widehat{G}$:

$$G_0^R = G_0^{--} - G_0^{-+}, \quad G_0^A = G_0^{-+} - G_0^{++}, \quad G_0^K = G_0^{--} - G_0^{++}$$

С помощью этих соотношений находим

$$\delta n(\omega) = \chi(\omega) U(\omega)$$

где восприимчивость $\chi(\omega)$ определяется формулой

$$\chi(\omega) = -2i \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon}{2\pi} \times \\ \times [G_0^A(\varepsilon_+) G_0^A(\varepsilon_-) - G_0^R(\varepsilon_+) G_0^R(\varepsilon_-) + G_0^R(\varepsilon_+) G_0^K(\varepsilon_-) + G_0^K(\varepsilon_+) G_0^A(\varepsilon_-)]$$

с обозначением $\varepsilon_{\pm} = \varepsilon \pm \omega/2$. Подставив сюда соотношение $G_0^K(\omega) = [G_0^R(\omega) - G_0^A(\omega)] \text{th}(\omega/2T)$ для равновесной ферми-системы, находим

$$\chi(\omega) = -i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon}{2\pi} \left[G_0^A(\varepsilon_+) G_0^A(\varepsilon_-) \left(1 - \text{th} \frac{\varepsilon_+}{2T}\right) - \right. \\ \left. - G_0^R(\varepsilon_+) G_0^R(\varepsilon_-) \left(1 - \text{th} \frac{\varepsilon_-}{2T}\right) + G_0^R(\varepsilon_+) G_0^A(\varepsilon_-) \left(\text{th} \frac{\varepsilon_+}{2T} - \text{th} \frac{\varepsilon_-}{2T}\right) \right]$$

Чтобы придать этому выражению окончательный вид, мы воспользуемся следующим равенством:

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon G_0^{R(A)}(\varepsilon_+) G_0^{R(A)}(\varepsilon_-) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon}{(\varepsilon + \omega/2 - \xi \pm i\delta)(\varepsilon - \omega/2 - \xi \pm i\delta)} = 0$$

которое является следствием того, что оба полюса лежат одновременно в одной из полуплоскостей ε и подынтегральная функция спадает при $|\varepsilon| \rightarrow \infty$ быстрее, чем $1/\varepsilon$. Таким образом, окончательно имеем

$$\chi(\omega) = -i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon}{2\pi} \left[G_0^R(\varepsilon_+) G_0^R(\varepsilon_-) \text{th} \frac{\varepsilon_-}{2T} - G_0^A(\varepsilon_+) G_0^A(\varepsilon_-) \text{th} \frac{\varepsilon_+}{2T} + \right. \\ \left. + G_0^R(\varepsilon_+) G_0^A(\varepsilon_-) \left(\text{th} \frac{\varepsilon_+}{2T} - \text{th} \frac{\varepsilon_-}{2T}\right) \right]$$

б) Чтобы вычислить мацубаровскую восприимчивость $\chi^M(\omega_n)$, удобно сдвинуть переменную интегрирования ε на $\pm\omega/2$ и представить исходное выражение выше в виде суммы следующих интегралов:

$$\begin{aligned}
\chi(\omega) &= \chi^{RR}(\omega) + \chi^{RA}(\omega) + \chi^{AR}(\omega) + \chi^{AA}(\omega) = \\
&= -i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon}{2\pi} G_0^R(\varepsilon + \omega) G_0^R(\varepsilon) \operatorname{th} \frac{\varepsilon}{2T} + i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon}{2\pi} G_0^R(\varepsilon + \omega) G_0^A(\varepsilon) \operatorname{th} \frac{\varepsilon}{2T} - \\
&- i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon}{2\pi} G_0^R(\varepsilon) G_0^A(\varepsilon - \omega) \operatorname{th} \frac{\varepsilon}{2T} + i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon}{2\pi} G_0^A(\varepsilon) G_0^A(\varepsilon - \omega) \operatorname{th} \frac{\varepsilon}{2T}.
\end{aligned}$$

Начнем с простого случая $n = 0$, чтобы увидеть общий подход к определению мацубаровской восприимчивости $\chi^M(\omega_n)$. При $n = 0$ имеем $\omega = i\omega_0 = 0$ и остаются только два интеграла:
 $\chi^M(0) = \chi_0^{RR} + \chi_0^{RA} =$

$$= -i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon}{2\pi} G_0^R(\varepsilon) G_0^R(\varepsilon) \operatorname{th} \frac{\varepsilon}{2T} + i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon}{2\pi} G_0^A(\varepsilon) G_0^A(\varepsilon) \operatorname{th} \frac{\varepsilon}{2T}$$

При вычислении интегралов χ_0^{RR} и χ_0^{AA} мы будем пользоваться аналитичностью функции $G_0^R(\varepsilon)$ при $\operatorname{Im} \varepsilon > 0$ и аналитичностью функции $G_0^A(\varepsilon)$ при $\operatorname{Im} \varepsilon < 0$.

В силу достаточно быстрого $\sim 1/\varepsilon^2$ спада произведения $G_0^R(\varepsilon)G_0^R(\varepsilon)$ и $G_0^A(\varepsilon)G_0^A(\varepsilon)$ при $\varepsilon \rightarrow \infty$ мы можем к интегрированию по действительной оси ε добавить без изменения результата интегрирование по бесконечно удаленной полуокружности в верхней полуплоскости Π^+ комплексной переменной ε (рис. 3.15) при вычислении интеграла χ_0^{RR} и, соответственно, интегрирование по бесконечно удаленной полуокружности в нижней полуплоскости Π^- комплексной переменной ε (рис. 3.15) при вычислении интеграла χ_0^{AA} .

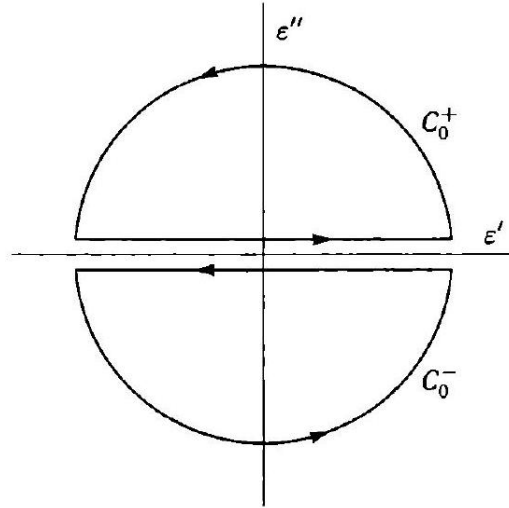


Рис. 3.15. Контуры интегрирования

Далее мы применим теорему о вычетах для вычисления значения интеграла по замкнутому контуру. Благодаря аналитичности произведения функций Грина $G_0^R G_0^R$ и $G_0^A G_0^A$ и отсутствию у них полюсов в соответствующих полуплоскостях Π^+ и Π^- вычисление интегралов χ_0^{RR} и χ_0^{AA} сведется к сумме вычетов, взятых во всех соответствующих полюсах $\varepsilon = i\varepsilon_k = i\pi T(2k + 1)$ функции $\operatorname{th}(\varepsilon/2T)$ при целых k .

В результате мы получим

$$\chi^M(0) = -\frac{i}{2\pi} \left[2\pi i \sum_{k \geq 0} 2T G_0^R(i\varepsilon_k) G_0^R(i\varepsilon_k) - (-2\pi i) \sum_{k < 0} 2T G_0^A(i\varepsilon_k) G_0^A(i\varepsilon_k) \right]$$

Далее мы воспользуемся следующей связью мацубаровской функцией Грина с запаздывающей и опережающей функциями Грина

$$G_0^R(i\varepsilon_k) = \mathfrak{G}_0(\varepsilon_k) \quad \text{при} \quad \varepsilon_k > 0 \quad \text{и} \quad G_0^A(i\varepsilon_k) = \mathfrak{G}_0(\varepsilon_k) \quad \text{при} \quad \varepsilon_k < 0$$

и легко найдем ответ

$$\chi^M(0) = 2T \left(\sum_{k \geq 0} + \sum_{k < 0} \right) \mathfrak{G}_0(\varepsilon_k) \mathfrak{G}_0(\varepsilon_k) = 2T \sum_{k=-\infty}^{\infty} \mathfrak{G}_0(\varepsilon_k) \mathfrak{G}_0(\varepsilon_k)$$

Перейдем теперь к случаю произвольного целого n и для определенности будем считать мадубаровскую частоту положительной $\omega_n > 0$. Запишем первые два интеграла при $\omega = i\omega_n$ следующим образом:

$$\begin{aligned}\chi_n^{RR} + \chi_n^{RA} = & -i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon}{2\pi} G_0^R(\varepsilon + i\omega_n) G_0^R(\varepsilon) \operatorname{th} \frac{\varepsilon + i\omega_n}{2T} + \\ & + i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon}{2\pi} G_0^R(\varepsilon + i\omega_n) G_0^A(\varepsilon) \operatorname{th} \frac{\varepsilon + i\omega_n}{2T}\end{aligned}$$

Здесь мы использовали тот факт, что

$$\operatorname{th} \frac{\varepsilon}{2T} = \operatorname{th} \frac{\varepsilon + i\omega_n}{2T} \quad \text{при} \quad \omega_n = 2\pi nT, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2 \dots$$

Эти интегралы можно представить в виде следующих интегралов от комплексной переменной ε

$$-i \int_{C_n} \frac{d\varepsilon}{2\pi} G_0^R(\varepsilon) G_0^R(\varepsilon - i\omega_n) \operatorname{th} \frac{\varepsilon}{2T} + i \int_{C_n} \frac{d\varepsilon}{2\pi} G_0^R(\varepsilon) G_0^A(\varepsilon - i\omega_n) \operatorname{th} \frac{\varepsilon}{2T}$$

взятых вдоль прямолинейного контура C_n , параллельного действительной оси и проходящего через точку $\operatorname{Im} \varepsilon = \omega_n$ на мнимой оси (рис. 3.16). Аналогично оставшиеся два интеграла

$$\begin{aligned}\chi_n^{AR} + \chi_n^{AA} = & \\ = & -i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon}{2\pi} G_0^R(\varepsilon) G_0^A(\varepsilon - i\omega_n) \operatorname{th} \frac{\varepsilon}{2T} + i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon}{2\pi} G_0^A(\varepsilon) G_0^A(\varepsilon - i\omega_n) \operatorname{th} \frac{\varepsilon}{2T}\end{aligned}$$

представляют собой интегралы вдоль контура C_0 , совпадающего с действительной осью $\operatorname{Im} \varepsilon = 0$ в комплексной плоскости переменной ε (рис. 3.16).

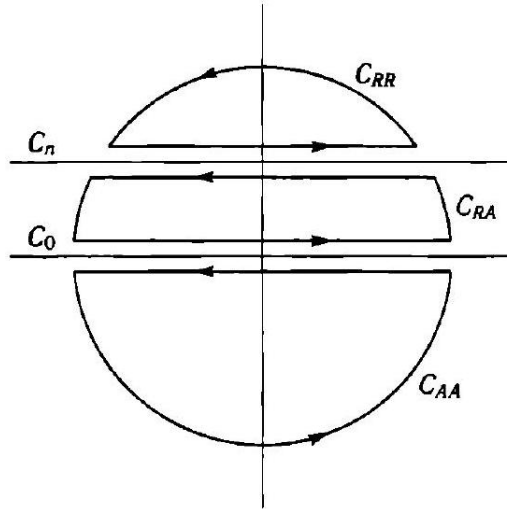


Рис. 3.16. Контурны интегрирования

Чтобы применить теорему вычета к вычислению интегралов, мы разобьем всю комплексную плоскость ε на три области: $D_{AA} : \operatorname{Im} \varepsilon < 0$, $D_{RA} : 0 < \operatorname{Im} \varepsilon < \omega_n$ и $D_{RR} : 0 < \omega_n < \operatorname{Im} \varepsilon$. Затем мы дополним четыре прямолинейных контура интегрирования соответствующими дугами бесконечно удаленной окружности, интегралы вдоль которых в силу быстрого $\sim 1/\varepsilon^2$ спада произведения двух функций Грина дают нулевой вклад, и получим (рис. 3.16) три замкнутых контура интегрирования C_{AA} , C_{RA} и C_{RR} для произведений $G_0^A(\varepsilon) G_0^A(\varepsilon - i\omega_n)$, $G_0^R(\varepsilon) G_0^A(\varepsilon - i\omega_n)$ и $G_0^R(\varepsilon) G_0^R(\varepsilon - i\omega_n)$, каждое из которых аналитично в соответствующей области. Эти три контура в сумме охватывают всю бесконечную последовательность полюсов $\operatorname{th}(\varepsilon/2T)$, которые имеются в точках $i\varepsilon_k = \pi iT(2k+1)$ при целочисленном k . Сумма вычетов подынтегральных выражений в каждом из этих полюсов даст ответ. Итак, находим

$$\begin{aligned}\chi^M(\omega_n) = & -\frac{i}{2\pi} 2\pi i \left(2T \sum_{k \geq n} G_0^R(i\varepsilon_k) C_0^R(i\varepsilon_k - i\omega_n) + \right. \\ & \left. + 2T \sum_{n > k \geq 0} G_0^R(i\varepsilon_k) C_0^A(i\varepsilon_k - i\omega_n) + 2T \sum_{k < 0} G_0^A(i\varepsilon_k) C_0^A(i\varepsilon_k - i\omega_n) \right)\end{aligned}$$

Далее, учитывая связь между $G^R(i\varepsilon_k), G^A(i\varepsilon_k)$ и мацубаровской функцией $\mathfrak{G}(\varepsilon_k)$, которая уже использовалась при вычислении χ_0 , мы получим окончательный ответ

$$\begin{aligned}\chi^M(\omega_n) &= 2T \left(\sum_{k \geq n} + \sum_{n > k \geq 0} + \sum_{k < 0} \right) \mathfrak{G}_0(\varepsilon_k) \mathfrak{G}_0(\varepsilon_k - \omega_n) = \\ &= 2T \sum_{k=-\infty}^{\infty} \mathfrak{G}_0(\varepsilon_k) \mathfrak{G}_0(\varepsilon_k - \omega_n) = 2T \sum_{k=-\infty}^{\infty} \mathfrak{G}_0(\varepsilon_k + \omega_n) \mathfrak{G}_0(\varepsilon_k)\end{aligned}$$

Случай $\omega_n < 0$ можно рассмотреть аналогично или, используя общие свойства функций Грина, можно показать, что мацубаровская восприимчивость $\chi^M(\omega_n)$ - четная функция мацубаровских частот

$$\chi^M(\omega_n) = \chi^M(|\omega_n|)$$

Тем самым, мы убедились в общем соотношении между мацубаровской восприимчивостью $\chi^M(\omega_n)$ и обычной запаздывающей восприимчивостью $\chi(\omega)$, а именно:

$$\chi^M(\omega_n) = \chi(\omega = i|\omega_n|)$$

Подобная связь между мацубаровской функцией отклика и функцией запаздывающего отклика прослеживалась, например, в задаче 32 о макроскопическом квантовом туннелировании. Свойство $\mathfrak{G}_0^*(\varepsilon_k) = \mathfrak{G}_0(-\varepsilon_k)$ приводит к вещественности мацубаровской восприимчивости χ^M .

Обратная задача о восстановлении восприимчивости или функции линейного отклика $\chi(\omega)$ на действительных частотах ω по известной функции мацубаровского отклика $\chi^M(\omega_n)$, определенной на счетном множестве мацубаровских частот ω_n , носит название аналитического продолжения с мнимых частот на действительные.

19.1.3 Problems about Synchronization

Белан-л10.31. В Курамото r от K при а) $K - K_c \ll K_c$, б) $K \gg K_c$

Для модели Курамото найдите амплитуду параметра порядка r как функцию от константы взаимодействия K в предположении а) $K - K_c \ll K_c$, б) $K \gg K_c$.

Solution а)

Уравнение самосогласования в первом порядке и дает ответ.

При $K - K_c \ll K_c$ из

$$\frac{\pi}{2} g(\Omega_0) K + \frac{\pi}{16} g''(\Omega_0) K^3 r^2 = 1$$

находим

$$r \approx \frac{4}{\pi} \frac{\sqrt{K - K_c}}{\sqrt{|g''(\Omega_0)| K_c^2}}.$$

Solution б)

Уравнение самосогласования после каких-то преобразований (????? чет за пару минут и не понял, какие они?) дает ответ.

При $K \gg K_c$ из

$$K \int_{-\pi/2}^{+\pi/2} d\theta \cos^2 \theta g(\Omega_0 + Kr \sin \theta) = 1$$

имеем

$$\begin{aligned}
 K \int_{-\pi/2}^{+\pi/2} d\theta (1 - \theta^2) g(\Omega_0 + Kr\theta) &\approx 1 \\
 \frac{1}{r} \int_{-\pi Kr/2}^{+\pi Kr/2} d\omega \left(1 - \frac{\omega^2}{K^2 r^2}\right) g(\Omega_0 + \omega) &\approx 1 \\
 \frac{1}{r} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega g(\Omega_0 + \omega) - \frac{1}{K^2 r^3} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \omega^2 g(\Omega_0 + \omega) &\approx 1 \\
 \frac{1}{r} - \frac{\sigma_\Omega^2}{K^2 r^3} &\approx 1
 \end{aligned}$$

Так как в рассматриваемом пределе $r = 1 - \delta$, где $\delta \ll 1$, то

$$\begin{aligned}
 1 + \delta - \frac{\sigma_\Omega^2}{K^2} (1 + 3\delta) &\approx 1 \\
 \delta &\approx \frac{\sigma_\Omega^2}{K^2}
 \end{aligned}$$

Итак

$$r \approx 1 - \frac{\sigma_\Omega^2}{K^2}$$

Белан-л10.32. В Курамото r от K при $g(\Omega) = \frac{\gamma}{\pi(\gamma^2 + (\Omega - \Omega_0)^2)}$

В модели Курамото найдите амплитуду параметра порядка как функцию от константы взаимодействия, если $g(\Omega) = \frac{\gamma}{\pi(\gamma^2 + (\Omega - \Omega_0)^2)}$.

Белан-л10.33. K_c в Сакагучи-Курамото, если $g(\Omega) = \frac{\gamma}{\pi(\gamma^2 + (\Omega - \Omega_0)^2)}$

В модели Сакагучи-Курамото определите критическую константу взаимодействия K_c , если $g(\Omega) = \frac{\gamma}{\pi(\gamma^2 + (\Omega - \Omega_0)^2)}$

Белан-л10.34.

В модели Сакагучи-Курамото определите зависимость параметра порядка $r(K)$ от константы взаимодействия чуть выше точки перехода K_c , если собственные частоты всех осцилляторов одинаковы.

Solution задачи 4

Если $K \gg D$, то фазы соседних осцилляторов близки друг у другу, так что можно перейти к континуальному пределу

$$\partial_t \theta(n, t) = K \partial_n^2 \theta(n, t) + \xi(n, t)$$

где

$$\langle \xi(n, t) \rangle = 0, \quad \langle \xi(n, t_1) \xi(m, t_2) \rangle = 2D \delta(n - m) \delta(t_1 - t_2).$$

Выполним преобразование Фурье по координате и времени

$$\theta(n, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} dq d\omega e^{iqn - i\omega t} \tilde{\theta}(q, \omega)$$

где

$$\tilde{\theta}(q, \omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dn dt}{(2\pi)^2} e^{-iqn + i\omega t} \theta(n, t).$$

На Фурье-компоненты получаем алгебраическое уравнение

$$-i\omega \tilde{\theta}(q, \omega) = -K q^2 \tilde{\theta}(q, \omega) + \tilde{\xi}(q, \omega)$$

решение которого имеет вид

$$\tilde{\theta}(q, \omega) = \frac{\tilde{\xi}(q, \omega)}{Kq^2 + i\omega}$$

Подставляем в (52)

$$\theta(n, t) = \int dq d\omega e^{iqn - i\omega t} \frac{\tilde{\xi}(q, \omega)}{Kq^2 + i\omega}$$

Тогда разность фаз равна

$$\theta(n, t) - \theta(m, t) = \int dq d\omega e^{-i\omega t} (e^{iqn} - e^{iqm}) \frac{\tilde{\xi}(q, \omega)}{Kq^2 + i\omega}$$

Белан-л10.35.

Рассмотрим модель Сакагучи-Курамото, где все осцилляторы имеют одинаковые частоты. Покажите, что состояние с равномерным распределением осцилляторов по фазе линейно неустойчиво к малым возмущениям при $K > K_c$.

Белан-л10.36. Коррелятор двух Сакагуч-Курамото

Рассмотрим неограниченно большой ансамбль фазовых осцилляторов, собственная частота каждого из которых равна Ω_0 . Осцилляторы расположены в узлах линейной решетки и взаимодействуют только со своими ближайшими соседями. Эволюция фазы n -го осциллятора подчиняется уравнению

$$\dot{\theta}_n = \Omega_0 + K \sin(\theta_{n+1} - \theta_n) + K \sin(\theta_{n-1} - \theta_n) + \xi_n(t)$$

где $K > 0$ - константа взаимодействия, $\xi_n(t)$ - гауссов белый шум с нулевым первым моментом $\langle \xi_n(t) \rangle = 0$ и парным коррелятором $\langle \xi_n(t_1) \xi_m(t_2) \rangle = 2D \delta_{nm} \delta(t_1 - t_2)$. Предполагая, что $K \gg D$, вычислите статистически-стационарную корреляционную функцию $\langle (\theta_n(t) - \theta_m(t))^2 \rangle$.

Solution задачи 6

Вычисляем среднеквадратичное значение

$$\begin{aligned} \langle (\theta(n, t) - \theta(m, t))^2 \rangle &= \int dq_1 dq_2 d\omega_1 d\omega_2 e^{-i(\omega_1 + \omega_2)t} (e^{iq_1 n} - e^{iq_1 m}) (e^{iq_2 n} - e^{iq_2 m}) \frac{\langle \tilde{\xi}(q_1, \omega_1) \tilde{\xi}(q_2, \omega_2) \rangle}{(Kq_1^2 + i\omega_1)(Kq_2^2 + i\omega_2)} = \\ &= \int dq_1 dq_2 d\omega_1 d\omega_2 e^{-i(\omega_1 + \omega_2)t} (e^{iq_1 n} - e^{iq_1 m}) (e^{iq_2 n} - e^{iq_2 m}) \frac{2D \delta(q_1 + q_2) \delta(\omega_1 + \omega_2)}{(Kq_1^2 + i\omega_1)(Kq_2^2 + i\omega_2)} = \\ &= 8D \int \frac{dq d\omega}{K^2 q^4 + \omega^2} \sin^2 \left[\frac{q(n-m)}{2} \right] = \\ &= \frac{8\pi D}{K} \int \frac{dq}{q^2} \sin^2 \left[\frac{q(n-m)}{2} \right] = \\ &= \frac{4\pi D}{K} |n-m| \int \frac{dx}{x^2} \sin^2 x = \\ &= \frac{4\pi^2 D}{K} |n-m| \end{aligned}$$

где мы учили, что

$$\begin{aligned} \langle \tilde{\xi}(q_1, \omega_1) \tilde{\xi}(q_2, \omega_2) \rangle &= \int \frac{dn_1 dn_2 dt_1 dt_2}{(2\pi)^4} e^{-iq_1 n_1 + i\omega_1 t_1} e^{-iq_2 n_2 + i\omega_2 t_2} \langle \xi(n_1, t_1) \xi(n_2, t_2) \rangle = \\ &= 2D \int \frac{dn dt}{(2\pi)^2} e^{-i(q_1 + q_2)n + i(\omega_1 + \omega_2)t} = 2D \delta(q_1 + q_2) \delta(\omega_1 + \omega_2). \end{aligned}$$

Длина корреляции l , то есть характерный масштаб вдоль цепи в пределах на которого осцилляторы синхронизованы, оценивается из условия $\langle (\theta(n, t) - \theta(n+l, t))^2 \rangle \sim 1$. Значит $l \sim K/D$.

Аппендикс: важный интеграл для данной задачи

(в матем тоже впишу его.)

Для вычисления интеграла $\int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{\sin^2 x}{x^2}$ рассмотрим функцию $f(u) = \int_0^{+\infty} dx \frac{\sin^2(ux)}{x^2}$. Ее Лаплас образ равен

$$\tilde{f}(s) \equiv \int_0^{+\infty} du e^{-su} f(u) = \int_0^{+\infty} \frac{dx}{x^2} \int_0^{+\infty} du e^{-su} \sin^2(ux) = \frac{2}{s} \int_0^{+\infty} \frac{dx}{4x^2 + s^2} = \frac{\pi}{2s^2}$$

где мы использовали следующую цепочку равенств

$$\begin{aligned} \int_0^{+\infty} du e^{-su} \sin^2(ux) &= -\frac{1}{s} \int_0^{+\infty} d(e^{-su}) \sin^2(ux) = \\ &= -\frac{1}{s} e^{-su} \sin^2(ux) \Big|_0^{+\infty} + \frac{2x}{s} \int_0^{+\infty} du e^{-su} \sin(ux) \cos(ux) = \\ &= \frac{x}{s} \int_0^{+\infty} du e^{-su} \sin(2ux) = \frac{x}{s} \operatorname{Im} \left[\int_0^{+\infty} du e^{(2ix-s)u} \right] = \frac{x}{s} \operatorname{Im} \left[\frac{1}{2ix-s} \right] = \frac{2x^2}{s(s^2 + 4x^2)} \end{aligned}$$

Выполним обратное преобразование Лапласа

$$f(u) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma} e^{su} \tilde{f}(s) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma} \frac{\pi e^{su}}{2s^2} = \frac{\pi}{2} \operatorname{res}_{s=0} \frac{e^{su}}{s^2} = \frac{\pi}{2} \lim_{s \rightarrow 0} \frac{de^{su}}{ds} = \frac{\pi}{2} u$$

Значит $\int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{\sin^2 x}{x^2} = 2f(1) = \pi$.

Белан-л10.з?. В модели Сакагуч-Курамото $r(K)$ при $g(\Omega) = \delta(\Omega - \Omega_0)$.

В модели Сакагуч-Курамото найти $r(K)$ при $g(\Omega) = \delta(\Omega - \Omega_0)$.

Solution

В случае $g(\Omega) = \delta(\Omega - \Omega_0)$ стационарное решение уравнения Фоккера-Планка $\partial_t n(\theta|\omega) = -\partial_\theta[(\omega - Kr \sin \theta)n(\theta|\omega)] + D\partial_\theta^2 n(\theta|\omega)$, удовлетворяющее периодическому граничному условию $n(\theta) = n(\theta + 2\pi)$, имеет вид

$$n(\theta) = C \exp\left(\frac{Kr}{D} \cos \theta\right)$$

Из условия нормировки $\int_{-\pi}^{+\pi} n(\theta) d\theta = 1$ находим

$$C = \frac{1}{2\pi I_0\left(\frac{Kr}{D}\right)}$$

где $I_n(z) = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi d\alpha e^{z \cos \alpha + in\alpha}$ - модифицированная функция Бесселя первого рода. Запишем уравнение самосогласования

$$r = \int_{-\pi}^{+\pi} e^{i\theta} n(\theta) d\theta = \frac{I_1\left(\frac{Kr}{D}\right)}{I_0\left(\frac{Kr}{D}\right)}$$

Так как $I_0(0) = 1$ и $I_1(0) = 0$, то при любом K имеется тривиальное нулевое решение r . Пусть $r \neq 0$ и $Kr \ll 1$. Используя разложения $I_0(z) = 1 + \frac{z^2}{4} + o(z^2)$ и $I_1(z) = \frac{z}{2} + \frac{z^3}{16} + o(z^3)$, запишем

$$r \approx \frac{Kr}{2D} - \frac{K^3 r^3}{16D^3}$$

Отсюда видно, что при $K > K_c = 2D$ появляется ненулевое решение. Если $K - K_c \ll K_c$, то

$$r \approx \sqrt{\frac{K - K_c}{K_c}}$$

Белан-?.7

Рассмотрим ансамбль из $N \gg 1$ фазовых осцилляторов, собственные частоты которых статистически независимы друг от друга и имеют плотность распределения $g(\Omega) = \frac{\gamma}{\pi(\gamma^2 + (\Omega - \Omega_0)^2)}$. Динамика фазы i -го осциллятора описывается уравнением

$$\dot{\theta}_i = \Omega_i + \frac{K}{N} \sum_{j=1}^N \sin(\theta_j - \theta_i)$$

где $K > 0$ - константа взаимодействия. Найдите амплитуду $r(K)$ параметра порядка $r \equiv \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N e^{i\theta_i}$ как функцию от константы взаимодействия K .

Белан-?.8

Плотность распределения z -координаты частицы в статистически стационарном турбулентном течении описывается уравнением

$$\partial_t n(z; t) = \partial_z [D_{zz}(z) \partial_z n(z; t)]$$

где $D_{zz} = \mu z^2 + \kappa$. Вычислите статистический момент $\langle z^2(t) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dz z^2 n(z; t)$, если $z(0) = 0$.

19.1.4 Problems about nucleation and bubbles

(???)

19.1.5 Problems about Kinetics of Polymers

Белан-ВШЭ-л10.2. Радиус инерции идеальной цепи-кольца

Вычислите радиус инерции длинной идеальной цепи, замкнутой в кольцо. Ответ выразите через контурную длину цепи L и длину Куна $l_{\text{eff}} \ll L$.

Solution

(???)

Радиус инерции R_g полимерного кольца определен как

$$R_g^2 = \frac{1}{2L^2} \int_0^L \int_0^L dl_1 dl_2 \langle (\vec{r}(l_1) - \vec{r}(l_2))^2 \rangle,$$

где вектор $\vec{r}(l)$ задает положение в пространстве участка кольца, имеющего контурную координату l , а угловые скобки $\langle \dots \rangle$ обозначают усреднение по случайным конформациям. Плотность распределения $P_{\text{coil}}(\vec{R}; s, L)$ вектора $\vec{R} \equiv \vec{r}(l_1) - \vec{r}(l_2)$, соединяющего два участка полимерного кольца, разделенных контурным расстоянием $s = |l_1 - l_2|$, имеет вид где $\vec{r}(s)$ - случайная координата трехмерного процесса Винера в момент времени s , $\text{Pr}_d[\dots]$ обозначает плотность распределения координаты трехмерного процесса Винера при заданном наборе условий, а $P(\vec{R}; s) \equiv \text{Pr}_d[\vec{r}(s) = \vec{R} | \vec{r}(0) = \vec{0}]$ дается формулой (3).

Из (13) находим среднеквадратичное расстояние между двумя участками кольца

$$\langle (\vec{r}(l_1) - \vec{r}(l_2))^2 \rangle = \frac{l_{\text{eff}}}{L} s(L - s).$$

Подстановка в формулу для радиуса инерции дает

$$\begin{aligned} R_g^2 &= \frac{l_{\text{eff}}}{2L^3} \int_0^L \int_0^L dl_1 dl_2 |l_1 - l_2| (L - |l_1 - l_2|) = \\ &= \frac{l_{\text{eff}}}{L^3} \int_0^L dl_1 \int_0^{l_1} dl_2 (l_1 - l_2) (L - l_1 + l_2) = \frac{l_{\text{eff}}}{12} L \end{aligned}$$

Таким образом, радиус инерции полимерного кольца в $\sqrt{2}$ раз меньше радиуса инерции линейной цепи той же контурной длины.

Колоколовл.-5.1. Коррелятор концов цепи Рауза

Найти корреляционную функцию расстояния между концами цепи $\langle \mathbf{R}(t)\mathbf{R}(0) \rangle$, используя уравнение Ланжевена.

Указание (!?!?!?!?)

Solution

В качестве примера применения уравнения Ланжевена рассмотрим динамику полимерной цепи в жидкости при температуре T . Конкретнее, найдем корреляционную функцию

$$\langle \mathbf{R}(t)\mathbf{R}(0) \rangle$$

Решение В качестве примера применения уравнения Ланжевена рассмотрим динамику полимерной цепи в жидкости при температуре T . Конкретнее, найдем корреляционную функцию

$$\langle \mathbf{R}(t)\mathbf{R}(0) \rangle$$

где $\mathbf{R}(t)$ - расстояние между концами полимерной цепи в момент времени t . Эта величина (точнее, ее фурье-образ) связана с интенсивностью неупругого рассеяния света полимерной цепью.

Если интересоваться крупномасштабным поведением полимерной цепи, например, если длина волны рассеиваемого излучения $\lambda \gg a \sim 10^{-7}$ см - характерного размера звена цепи, то детали строения полимера несущественны и можно использовать простую модель.

Для описания полимера мы выберем самую простую модель "бусинки на пружинках", которая пригодна для описания крупномасштабного поведения. Гармонический потенциал взаимодействия между достаточно далеко отстоящими друг от друга звеньями цепи имеет энтропийное происхождение и получается следующим образом.

Рассмотрим предельно гибкую цепь, состоящую из последовательности n шарнирно соединенных жестких сегментов длины l . Найдем вероятность $P_n(\mathbf{r})$ того, что расстояние между точками цепи, разделенными n звеньями, будет $\mathbf{r}$. Ввиду независимости ориентаций отдельных сегментов цепи вероятность найти концы сегментов цепи в точках $\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n$ есть

$$P_n(\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n) = g(\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1) g(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \dots g(\mathbf{x}_{n-1}, \mathbf{x}_n),$$

где для свободно сочлененной цепи

$$g(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \frac{1}{4\pi l^2} \delta(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'| - l)$$

есть вероятность найти один конец мономера (жесткого стержня) в точке $\mathbf{x}'$, если другой конец находится в точке $\mathbf{x}$, с нормировкой

$$\int g(\mathbf{x}, \mathbf{x}') d\mathbf{x}' = 1$$

Чтобы найти $P_n(\mathbf{r})$, нам нужно проинтегрировать по всем промежуточным положениям концов сегментов $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{n-1}$:

$$\begin{aligned} P_n(\mathbf{r}) &= \int P_n(\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n = \mathbf{x}_0 + \mathbf{r}) d\mathbf{x}_1 \dots d\mathbf{x}_{n-1} = \\ &= \int \delta \left[\sum_{i=0}^{n-1} \mathbf{y}_i - \mathbf{r} \right] \prod_{i=0}^{n-1} [g(\mathbf{y}_i) d\mathbf{y}_i], \end{aligned}$$

где $\mathbf{y}_i = \mathbf{x}_{i+1} - \mathbf{x}_i$. Используя интегральное представление δ -функции

$$\delta(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{x}) d\mathbf{k}$$

получаем

$$P_n(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{r}) g_k^n d\mathbf{k}$$

где

$$g_k = \int g(\mathbf{y}) \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{y}) d\mathbf{y}$$

Для $g(\mathbf{y}) = (4\pi l^2)^{-1} \delta(|\mathbf{y}| - l)$ имеем

$$g_k = \frac{1}{4\pi l^2} \int_0^\infty \delta(|\mathbf{y}| - l) 2\pi y^2 dy \int_{-1}^{+1} d(\cos \theta) \exp(iky \cos \theta) = \frac{\sin kl}{kl}.$$

Для $n \gg 1$ основной вклад дает область интегрирования $k \ll 1/l$, так что $(\sin(kl))/(kl) \approx 1 - k^2 l^2/6$ и g_k^n можно представить в виде

$$g_k^n \approx (1 - k^2 l^2/6)^n \approx e^{-k^2 l^2 n/6}.$$

Тогда

$$P_n(\mathbf{r}) = \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk_x}{2\pi} e^{-ik_x r_x - k_x^2 l^2 n/6} \right) \cdot \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk_y}{2\pi} e^{-ik_y r_y - k_y^2 l^2 n/6} \right) \cdot \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk_z}{2\pi} e^{-ik_z r_z - k_z^2 l^2 n/6} \right) = \left(\frac{3}{2\pi n l^2} \right)^{3/2} e^{-\frac{3r^2}{2nl^2}}$$

Мы получили так называемую Гауссову модель полимерной цепи. Видно, что можно выбирать другое число звеньев цепи n' и их длину l' , получая такое же распределение $P(r)$ при условии $n'l'^2 = nl^2$. Из определения $P(r)$ следует, что эта величина пропорциональна статсумме цепи с закрепленными концами $Z_n(r)$. Тогда свободная энергия цепи есть

$$F_n = -T \ln Z_n = \text{Const} + \frac{3Tr^2}{2nl^2}.$$

Теперь, если интересоваться крупномасштабным поведением, можно ввести эффективную длину звена цепи $a = l n^{1/2}$, и свободная энергия цепи равна

$$F = F(0) + \sum_{i=1}^N \frac{3T(\mathbf{x}_{i+1} - \mathbf{x}_i)^2}{2a^2}.$$

Это выражение позволяет найти силу $\mathbf{g}_i$, действующую на i -е звено (или бусинку) со стороны соседних звеньев цепи

$$\mathbf{g}_i = -\frac{\partial F}{\partial \mathbf{x}_i} = \frac{3T}{a^2} (\mathbf{x}_{i+1} + \mathbf{x}_{i-1} - 2\mathbf{x}_i).$$

Уравнение Ланжевена теперь принимает вид

$$\xi \frac{\partial \mathbf{x}_i}{\partial t} = \frac{3T}{a^2} (\mathbf{x}_{i+1} + \mathbf{x}_{i-1} - 2\mathbf{x}_i) + \mathbf{f}_i(t),$$

где ξ - коэффициент трения, $\mathbf{f}_i(t)$ - флуктуационная сила, действующая на i -е звено. Удобно считать величину i непрерывной переменной, так что это уравнение можно переписать как

$$\xi \frac{\partial \mathbf{x}_i}{\partial t} = k \frac{\partial^2 \mathbf{x}_i}{\partial i^2} + \mathbf{f}_i(t)$$

где введено обозначение $k = 3T/a^2$. В этом уравнении влияние среды, связанное с трением, мгновенно (нет запаздывания), поэтому естественно считать, что корреляционная функция случайной силы пропорциональна дельта-функции

$$\langle f_\alpha(t, i) f_\beta(t', j) \rangle = 2\xi T \delta(i - j) \delta_{\alpha\beta} \delta(t - t')$$

Поскольку на концах цепи упругая сила действует только с одной стороны, граничные условия имеют вид

$$\left. \frac{\partial \mathbf{x}_i}{\partial i} \right|_{i=0} = 0, \quad \left. \frac{\partial \mathbf{x}_i}{\partial i} \right|_{i=N} = 0.$$

Решение, согласующееся с этими граничными условиями, ищем в виде

$$\mathbf{x}(t, i) = \mathbf{y}_0(t) + \sum_{p=1}^{\infty} \mathbf{y}_p(t) \cos \frac{\pi p i}{N}$$

Величина $\mathbf{y}_0(t)$ определяет движение центра масс $\mathbf{X}$ цепи, поскольку

$$\mathbf{X}(t) = \frac{1}{N} \int_0^N \mathbf{x}(i, t) di = \mathbf{y}_0$$

Из уравнения Ланжевена получаем

$$\xi \frac{\partial \mathbf{y}_0}{\partial t} = \frac{1}{N} \int_0^N \xi \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial t} di = \frac{1}{N} \int_0^N \left[k \frac{\partial^2 \mathbf{x}}{\partial i^2} + \mathbf{f}(i, t) \right] di = \frac{1}{N} \int_0^N \mathbf{f}(i, t) di,$$

так как $\left. \frac{\partial \mathbf{x}_i}{\partial i} \right|_{i=0, N} = 0$. Тогда

$$\mathbf{y}_0(t) - \mathbf{y}_0(0) = \frac{1}{N\xi} \int_0^t dt' \int_0^N \mathbf{f}(i, t') di$$

Среднеквадратичное смещение центра масс за время t

$$\begin{aligned} \langle (\mathbf{y}_0(t) - \mathbf{y}_0(0))^2 \rangle &= \\ &= \frac{1}{N^2 \xi^2} \int_0^t dt' \int_0^t dt'' \int_0^N di \int_0^N dj \delta(i-j) \delta(t-t') 6\xi T = \frac{6T}{N\xi} t \end{aligned}$$

позволяет найти коэффициент диффузии D_c полимерной цепи

$$D_c = \frac{T}{N\xi}$$

который оказывается в N раз меньше коэффициента диффузии одного звена. Компоненты

$$\mathbf{y}_p(t) = \frac{2}{N} \int_0^N di \mathbf{x}(t, i) \cos \frac{\pi p i}{N} \quad p = 1, 2, \dots$$

с $p > 0$ описывают внутренние движения в цепи. Используя уравнение Ланжевена, получим

$$\frac{\partial \mathbf{y}_p}{\partial t} = \frac{2}{N\xi} \int_0^N di \left[k \frac{\partial^2 \mathbf{x}}{\partial i^2} + \mathbf{f}(i, t) \right] \cos \frac{\pi p i}{N} = \frac{2}{N\xi} \mathbf{f}_p(t) - \frac{1}{\tau_p} \mathbf{y}_p(t),$$

где

$$\mathbf{f}_p(t) = \int_0^N \mathbf{f}(i, t) \cos \frac{\pi p i}{N} di, \quad \tau_p = \frac{N^2 \xi}{k \pi^2 p^2}.$$

При интегрировании этого уравнения удобно начальное условие отнести к моменту времени $t' \rightarrow -\infty$ и выбрать его равным нулю, поскольку его влияние из-за трения пренебрежимо мало. Тогда решением уравнения Ланжевена является

$$\mathbf{y}_p(t) = \frac{2}{N\xi} \int_{-\infty}^t \exp\left(-\frac{t-t'}{\tau_p}\right) \mathbf{f}_p(t') dt'$$

Используя выражение для коррелятора случайной силы, находим

$$\langle f_p(t) \rangle = 0, \quad \langle f_{p\alpha}(t) f_{q\beta}(t') \rangle = TN\xi \delta_{pq} \delta_{\alpha\beta} \delta(t-t').$$

Теперь можно вычислить коррелятор

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{y}_p(t) \mathbf{y}_q(0) \rangle &= \frac{12T\delta_{pq}}{N\xi} \int_{-\infty}^t dt' \int_{-\infty}^0 dt'' e^{-(t-t'-t'')/\tau_p} \delta(t'-t'') = \\ &= \frac{6T\tau_p \delta_{pq}}{N\xi} e^{-t/\tau_p} \end{aligned}$$

Расстояние между концами цепи можно представить в виде

$$\mathbf{R}(t) = \mathbf{x}(t, N) - \mathbf{x}(t, 0) = \sum_{p=1,2,3,4,\dots} [(-1)^p - 1] \mathbf{y}_p(t) = -2 \sum_{p=1,3,5,\dots} \mathbf{y}_p(t).$$

Тогда при использовании выражения для $\langle \mathbf{y}_p(t) \mathbf{y}_q(0) \rangle$ зависимость от времени коррелятора расстояния между концами цепи имеет вид

$$\langle \mathbf{R}(t) \mathbf{R}(0) \rangle = \frac{8Na^2}{\pi^2} \sum_{p=1,3,5,\dots} \frac{1}{p^2} \exp\left(-\frac{tp^2}{\tau_1}\right).$$

Минимальное время релаксации, $\tau_1 = N^2 a^2 \xi / (3T\pi^2)$, определяет поведение коррелятора расстояния между концами цепи на больших временных масштабах.

При $t = 0$ воспроизводится хорошо известный результат $\langle \mathbf{R}^2 \rangle = Na^2$, поскольку

$$\sum_{p=1,3,5,\dots} \frac{1}{p^2} = \sum_{p=1,2,3,4,\dots} \frac{1}{p^2} - \sum_{p=2,4,6,\dots} \frac{1}{p^2} = \sum_{p=1,3,5,\dots} \frac{1}{p^2} \left(1 - \frac{1}{4}\right) = \frac{\pi^2}{8},$$

где использовано

$$\sum_{p=1,2,3,4,\dots} \frac{1}{p^2} = \zeta_2(1) = \int_0^\infty \frac{x dx}{e^x - 1} = \frac{\pi^2}{6}.$$

Белан-ВШЭ-л10.1. $\langle \vec{R}^4 \rangle$ в свободно сочлененной цепи

Свободно-сочлененная цепь это последовательность из N жестких сегментов одинаковой различные сегменты выбирают свою ориентацию в пространстве независимо друг от друга. Найдите точное выражение для статистического момента $\langle \vec{R}^4 \rangle$, где $\vec{R}$ - вектор, соединяющий концы цепи.

Solution (???)

(додумаю и впишу)

Solution через интеграл по траекториям

Суть в том, что (???? супер крутые формулы для корреляторов есть через него (????)) (там жсть про это, мб когда-то дойду, теория пока для него очень слабая.)

Колоколовл.-5.2. Полимер в случайном потоке

Найти функцию распределения по размерам полимера, помещенного в случайный поток. Указание (!?!?!?!)

Solution

(!?!?!?! тут метод через статсумму, такое еще новое!!!)

Гибкий полимер, состоящий из N звеньев длиной l , принимает в жидкости запутанную, клубковую конфигурацию с характерным размером $R_0 = \sqrt{N}l \ll Nl$ - длины цепи в растянутом состоянии. Помещенный в турбулентный поток, полимер принимает вытянутую конфигурацию, так что его можно приближенно описать, указывая лишь расстояние между концами цепи. Как правило, характерный размер полимера даже в растянутом состоянии гораздо меньше вязкого масштаба турбулентного потока, поэтому действующая со стороны потока жидкости растягивающая сила

пропорциональна расстоянию между концами цепи R . Уравнение Ланжевена принимает вид

$$\frac{dR}{dt} = \sigma(t)R + f(R),$$

где σ - градиент скоростей в турбулентном потоке. Его среднее значение и среднеквадратичное отклонение задаются соотношениями $\langle \sigma(t) \rangle = \lambda$, $\langle (\sigma(t) - \lambda)(\sigma(t') - \lambda) \rangle = D\delta(t - t')$, а $f(R)$ - упругая сила натяжения полимера, имеющая энтропийное происхождение. Найдём сначала вид функции $f(R)$ для модели свободно-сочлененной цепи из N звеньев длиной l . Действие внешней силы $\vec{F}$ на каждое звено полимерной цепи эквивалентно действию потенциала $U_i = -\vec{F} \cdot \vec{r}_i$, где r_i - радиус вектор i -го звена.

Расстояние между концами цепи R в этом случае находится из

$$R = \frac{1}{Z} \prod_{i=1}^N \int \left(\sum_i l \cos \theta_i \right) e^{\beta F l \cos \theta_i} 2\pi d(\cos \theta_i),$$

где статсумма Z равна

$$Z = \prod_{i=1}^N \int_{-1}^{+1} e^{\beta F l \cos \theta_i} 2\pi d(\cos \theta_i)$$

$\beta = 1/T$ - обратная температура, θ_i - угол между i -м звеном и направлением внешней силы $\vec{F}$. Размер полимера под действием внешней силы определяется выражением

$$R = N \frac{\int_{-1}^{+1} l \cos \theta_i e^{\beta F l \cos \theta_i} d(\cos \theta_i)}{\int_{-1}^{+1} e^{\beta F l \cos \theta_i} d(\cos \theta_i)} = \frac{N}{\beta F} \left[\frac{\beta F l (e^{\beta F l} + e^{-\beta F l})}{e^{\beta F l} - e^{-\beta F l}} - 1 \right].$$

Из 3-го закона Ньютона следует, что упругая сила в равновесии должна компенсировать внешнюю силу, т. е. $f(R) = -F(R)$. Для слабого растяжения, $\beta f l \ll 1$,

$$R \approx -\frac{1}{3} N l^2 \beta f, \text{ откуда } f \approx -\frac{3 T R}{N l^2},$$

тогда как для сильного растяжения, $\beta f l \gg 1$,

$$R \approx N l + \frac{N}{\beta f}, \text{ откуда } f(R) \approx -\frac{T}{l(1 - R/Nl)}.$$

Для последующего применения удобно описывать зависимость силы от растяжения во всем интервале $(\sqrt{N}l, Nl)$ с помощью интерполяционной формулы

$$f \approx -\frac{T}{l} \left(2x + \frac{x}{1-x} \right),$$

где $x = R/Nl$. Полученные формулы справедливы лишь при $R \gg \sqrt{N}l$, когда полимерная цепь растянута и ее поведение можно описывать в терминах силы $f(R)$ энтропийного происхождения. Найдём теперь функцию распределения $P(\rho, t)$ по размерам полимера ρ , используя уравнение Ланжевена (ρ ввели, чтобы не путать с $R(t)$). По определению

$$P(\rho, t) = \langle \delta(\rho - R(t)) \rangle.$$

Тогда

$$\frac{\partial P(\rho, t)}{\partial t} = \left\langle -\frac{dR}{dt} \frac{\partial}{\partial \rho} \delta(\rho - R(t)) \right\rangle = \frac{\partial j(\rho, t)}{\partial \rho}$$

где

$$j(\rho, t) = -\left\langle \frac{dR}{dt} \delta(\rho - R(t)) \right\rangle = -\rho \langle \sigma(t) \delta(\rho - R(t)) \rangle - f(\rho) P(\rho, t).$$

Величина $R(t)$ коррелирует с $\sigma(t)$. Поэтому для вычисления $\langle \sigma(t) \delta(\rho - R(t)) \rangle$ представим $R(t)$ в виде

$$R(t) \approx R(t - \varepsilon) + \int_{t-\varepsilon}^t \sigma(t') R(t') dt' + \varepsilon f(R),$$

где $\varepsilon \rightarrow 0$. Последние два члена малы, и можно разложить δ -функцию по малому параметру, что дает

$$\begin{aligned} \langle \sigma(t) \delta(\rho - R(t)) \rangle &= \lambda P(\rho) - \left\langle \left(\sigma(t) - \lambda \right) \int_{t-\varepsilon}^t \sigma(t') R(t') dt' \frac{\partial}{\partial \rho} \delta(\rho - R(t)) \right\rangle = \\ &= \lambda P(\rho) - \frac{\partial}{\partial \rho} \frac{D}{2} \rho P(\rho), \end{aligned}$$

где мы использовали $\int_0^\infty \delta(x) dx = 1/2$ и перешли к пределу $\varepsilon \rightarrow 0$. Окончательно для функции распределения $P(\rho, t)$ по размерам цепи получаем уравнение типа Фоккера - Планка:

$$\frac{\partial}{\partial t} P(\rho, t) = \frac{\partial}{\partial \rho} (-f(\rho) P - \lambda \rho P) + \frac{D}{2} \frac{\partial}{\partial \rho} \left[\rho \frac{\partial}{\partial \rho} (\rho P) \right] \equiv \frac{\partial j}{\partial \rho}$$

где

$$j = (-f(\rho) - \lambda \rho) P(\rho, t) + \frac{D \rho}{2} \frac{\partial}{\partial \rho} (\rho P(\rho, t)).$$

Найдем стационарное решение этого уравнения с $j = 0$ (полимеры не рождаются и не уничтожаются). Тогда, заменяя $\rho \rightarrow R$, получим из (651)

$$\frac{d(RP)}{RP} = \frac{2(f(R) + \lambda R)dR}{DR^2}$$

откуда

$$P(R) = A \frac{1}{R} \exp \left(\frac{2}{D} \int^R \frac{(f(r') + \lambda r') dr'}{r'^2} \right),$$

где A - нормировочная постоянная. Наиболее интересен случай сильного растяжения полимера (возможность разрыва цепи не рассматриваем). Используя интерполяционную формулу для силы (644), получаем

$$\begin{aligned} \frac{2}{D} \int^R \frac{(f(r') + \lambda r') dr'}{r'^2} &= \\ &= -\frac{2T}{DNl^2} \int^{R/Nl} \left(\frac{2}{x} + \frac{1}{x(1-x)} \right) dx + \frac{2\lambda}{D} \int^{R/Nl} \frac{dx}{x}. \end{aligned}$$

Вычисляя интегралы, находим

$$P(R) = \frac{A}{Nl} \left(\frac{R}{Nl} \right)^{a-1} \left(1 - \frac{R}{Nl} \right)^b$$

где

$$a = \frac{2}{D} \left(\lambda - \frac{3T}{Nl^2} \right), \quad b = \frac{2T}{DNl^2}.$$

Это распределение имеет смысл (нормируемо) только в достаточно сильном растягивающем потоке, $a > 0$ ($\lambda > 3T/Nl^2$), поскольку мы изначально предполагали, что цепь является сильно вытянутой и ее можно описать одномерной моделью. Естественно, что детали поведения функции распределения зависят от используемой модели полимера. Нормировочная постоянная A определяется из условия

$$\frac{A}{Nl} \int_0^1 x^{a-1} (1-x)^b dx = \frac{A}{Nl} \frac{\Gamma(a)\Gamma(b+1)}{\Gamma(a+b+1)} = 1.$$

Тогда моменты равны

$$\overline{R^n} = (Nl)^n \frac{\Gamma(a+n)\Gamma(a+b+1)}{\Gamma(a)\Gamma(a+b+1+n)}.$$

В частности,

$$\bar{R} = \frac{Nla}{a+b+1}, \quad \overline{R^2} = \frac{(Nl)^2 a(a+1)}{(a+b+1)(a+b+2)},$$

где использовано $\Gamma(z+1) = z\Gamma(z)$. Наибольший интерес представляет поведение цепи вблизи порога $a \ll 1$ ($D \gg \lambda - 3T/Nl^2$) (где оно слабо зависит от используемой модели полимера): $\bar{R} \approx \frac{Nla}{b+1}$, $\overline{R^2} \approx \frac{(Nl)^2 a}{(b+1)(b+2)}$, откуда $\frac{\overline{R^2} - \bar{R}^2}{\bar{R}^2} \approx \frac{b+1}{a(b+2)} \gg 1$, т. е. длина цепи сильно флуктуирует. Условие $a \ll 1$ следует уточнить. Поскольку мы считали цепь вытянутой по сравнению с равновесным значением, то из $\bar{R} > l\sqrt{N}$ следует, что $a > (1+b)/\sqrt{N}$.

19.2 Problems about mathematical preparation to typical kinetics

(?? transformations of equations, etc)
(??? I'll write it later)

19.3 Problems about mathematical preparation to special kinetics

(??? I'll write it later)

Part VIII

Other Topics and Special Methods

20 Special Kinetics by Kolokolov, Obrazovsky, Podvilov

20.1 1. Classical Waves in Continuous Media

20.1.1 1.1. The Hamiltonian Formalism for Nonlinear Waves

Theory

Гамильтонов формализм позволяет универсальным образом описывать волновые возбуждения в самых разнообразных по физической природе системах. Общего рецепта для перехода к гамильтонову описанию нет, но во многих интересных случаях это удается сделать.

Именно для многих конкретных систем можно указать обобщенный импульс P и обобщенную переменную Q , являющиеся комбинациями исходных переменных (полей, плотностей, скоростей и т. д.), такие, что точные уравнения движения примут вид

$$\dot{Q}(\mathbf{r}) = \frac{\delta H}{\delta P(\mathbf{r})}, \quad \dot{P}(\mathbf{r}) = -\frac{\delta H}{\delta Q(\mathbf{r})} \quad (1)$$

где H - гамильтониан системы, который в подавляющем большинстве случаев совпадает с энергией системы, а в правых частях стоят континуальные производные.

Удобно перейти к фурье-компонентам, поместив всю систему в ящик объемом V и накладывая периодические граничные условия

$$k_i L_i = 2\pi n_i \quad (2)$$

где k_i - компоненты волнового вектора, L_i - пространственные размеры ящика, $n_i = \pm 1, \pm 2, \dots$, так что

$$P(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} P_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \quad (3)$$

и аналогично для $Q(\mathbf{r})$. Тогда уравнения движения можно переписать в виде, содержащем обычные производные

$$\dot{Q}_{\mathbf{k}} = \frac{\partial H}{\partial P_{-\mathbf{k}}}, \quad \dot{P}_{\mathbf{k}} = -\frac{\partial H}{\partial Q_{-\mathbf{k}}}, \quad (4)$$

здесь гамильтониан выражен через фурье-компоненты.

Гамильтониан системы представим в виде полинома по каноническим переменным

$$H = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{s=0}^n \int d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_s d\mathbf{r}_{s+1} \dots d\mathbf{r}_n A(\mathbf{r}_1 \dots \mathbf{r}_n) Q(\mathbf{r}_1) \dots Q(\mathbf{r}_s) P(\mathbf{r}_{s+1}) \dots P(\mathbf{r}_n) \quad (5)$$

Тогда легко убедиться, что действие оператора $\partial/\partial Q_{-\mathbf{k}}$ на гамильтониан эквивалентно действию оператора $\frac{1}{\sqrt{V}} \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} (\delta/\delta Q(\mathbf{r}))$. Это достаточно проверить для $Q(\mathbf{r}')$. С одной стороны,

$$\frac{\partial}{\partial Q_{-\mathbf{k}}} Q(\mathbf{r}') = \frac{\partial}{\partial Q_{-\mathbf{k}}} \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}'} Q_{\mathbf{k}'} e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}'} = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}'}, \quad (6)$$

с другой стороны -

$$\frac{1}{\sqrt{V}} \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \frac{\delta Q(\mathbf{r}')}{\delta Q(\mathbf{r})} = \frac{1}{\sqrt{V}} \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'}.$$
 (7)

Отметим, что поскольку канонические переменные вещественны, $Q(\mathbf{r})^* = Q(\mathbf{r})$, то имеет место равенство $Q_{-\mathbf{k}} = Q_{\mathbf{k}}^*$ и аналогично $P_{-\mathbf{k}} = P_{\mathbf{k}}^*$.

В равновесии энергия минимальна, поэтому, исключая постоянный член, разложение гамильтониана начинается с квадратичных по каноническим переменным членов. Для трансляционноинвариантных сред

$$H_2 = \frac{1}{2} \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 [A(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) P(\mathbf{r}_1) P(\mathbf{r}_2) + B(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) Q(\mathbf{r}_1) Q(\mathbf{r}_2)] + \\ + \frac{1}{2} \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 C(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) Q(\mathbf{r}_1) P(\mathbf{r}_2)$$
 (8)

переходя к фурье-компонентам, получим

$$H_2 = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} [A_{\mathbf{k}} P_{\mathbf{k}} P_{-\mathbf{k}} + B_{\mathbf{k}} Q_{\mathbf{k}} Q_{-\mathbf{k}} + C_{\mathbf{k}} Q_{\mathbf{k}} P_{-\mathbf{k}}].$$
 (9)

Рассмотрим сначала более простой случай $C = 0$. В этом случае квадратичная часть гамильтониана с помощью перехода к другим каноническим переменным $a_{\mathbf{k}}, a_{\mathbf{k}}^*$, определяемых соотношениями

$$Q_{\mathbf{k}} = r_k \frac{a_{\mathbf{k}} + a_{-\mathbf{k}}^*}{\sqrt{2}}, \quad P_{\mathbf{k}} = \frac{1}{r_k} \frac{a_{\mathbf{k}} - a_{-\mathbf{k}}^*}{i\sqrt{2}}$$
 (10)

сводится к

$$H_2 = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \left[a_{\mathbf{k}}^* a_{\mathbf{k}} 2 \left(\frac{A_{\mathbf{k}}}{2r_k^2} + \frac{B_{\mathbf{k}} r_k^2}{2} \right) + (a_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}} + a_{\mathbf{k}}^* a_{-\mathbf{k}}^*) \left(\frac{B_{\mathbf{k}} r_k^2}{2} - \frac{A_{\mathbf{k}}}{2r_k^2} \right) \right]$$
 (11)

При выборе

$$r_k^2 = \sqrt{\frac{A_{\mathbf{k}}}{B_{\mathbf{k}}}}$$
 (12)

гамильтониан становится диагональным

$$H_2 = \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^* a_{\mathbf{k}}$$
 (13)

где $\omega_{\mathbf{k}} = \sqrt{A_{\mathbf{k}} B_{\mathbf{k}}}$.

Выразим новые канонические переменные $a_{\mathbf{k}}^*, a_{\mathbf{k}}$ через старые $Q_{\mathbf{k}}^*, P_{\mathbf{k}}$

$$a_{\mathbf{k}} = \frac{Q_{\mathbf{k}} + i r_k^2 P_{\mathbf{k}}}{\sqrt{2} r_k}, \quad a_{\mathbf{k}}^* = \frac{Q_{-\mathbf{k}} - i r_k^2 P_{-\mathbf{k}}}{\sqrt{2} r_k}$$
 (14)

и найдем

$$\dot{a}_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{1}{r_k} \frac{\partial H}{\partial P_{-\mathbf{k}}} - i r_k \frac{\partial H}{\partial Q_{-\mathbf{k}}} \right).$$
 (15)

Вычисляя

$$\frac{\partial H}{\partial P_{-\mathbf{k}}} = \frac{\partial H}{\partial a_{\mathbf{k}}} \frac{\partial a_{\mathbf{k}}}{\partial P_{-\mathbf{k}}} + \frac{\partial H}{\partial a_{\mathbf{k}}^*} \frac{\partial a_{\mathbf{k}}^*}{\partial P_{-\mathbf{k}}} = -\frac{ir_k}{\sqrt{2}} \frac{\partial H}{\partial a_{\mathbf{k}}^*} \quad (16)$$

$$\frac{\partial H}{\partial Q_{-\mathbf{k}}} = \frac{\partial H}{\partial a_{\mathbf{k}}} \frac{\partial a_{\mathbf{k}}}{\partial Q_{-\mathbf{k}}} + \frac{\partial H}{\partial a_{\mathbf{k}}^*} \frac{\partial a_{\mathbf{k}}^*}{\partial Q_{-\mathbf{k}}} = \frac{1}{\sqrt{2}r_k} \frac{\partial H}{\partial a_{\mathbf{k}}^*} \quad (17)$$

получаем уравнение движения в новых переменных:

$$\dot{a}_{\mathbf{k}} = -i \frac{\partial H}{\partial a_{\mathbf{k}}^*} \quad (18)$$

Ограничиваясь в гамильтониане квадратичным вкладом, получим

$$\dot{a}_{\mathbf{k}} = -i\omega_k a_{\mathbf{k}} \rightarrow a_{\mathbf{k}}(t) = a_{\mathbf{k}}(0)e^{-i\omega_k t} \quad (19)$$

Величину $n_{\mathbf{k}}(t) = a_{\mathbf{k}}^* a_{\mathbf{k}} = n_{\mathbf{k}}(0) = \text{Const}$, используя аналогию с бозе-газом, можно интерпретировать как число волн, а сами переменные по аналогии с квантовой физикой можно интерпретировать как классические аналоги операторов рождения и уничтожения.

Следующий кубический по каноническим переменным вклад в гамильтониан в общем случае можно записать в виде

$$H_3 = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} a_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}_1}^* a_{\mathbf{k}_2}^* \Delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) + c.c. + \\ + \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} U_{\mathbf{k} \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} a_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}_1} a_{\mathbf{k}_2} \Delta(\mathbf{k} + \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2) + c.c. \quad (20)$$

где $V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2}$ и $U_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2}$ - некоторые функции волновых векторов, а с.с. означает комплексно сопряженный. В этом случае число волн с заданным значением волнового вектора не сохраняется. Первый член в кубическом гамильтониане описывает процесс распада одной волны с волновым вектором $\mathbf{k}$ на две другие с волновыми векторами $\mathbf{k}_1$ и $\mathbf{k}_2$ и обратный процесс слияния (член с.с.). Вторая часть кубического гамильтониана описывает процесс аннигиляции трех волн и обратный ему процесс рождения. Для устойчивых сред эти процессы запрещены, поэтому в дальнейшем эту часть гамильтониана будем опускать.

20.1.2 1.2. Example: Sound

Theory

Рассмотрим в качестве примера нелинейные звуковые волны и найдем квадратичную и кубическую части гамильтониана, выраженные через канонические переменные.

Гамильтониан сжимаемой среды, движение которой будем считать потенциальным и изэнтропичным, запишем в виде

$$H = \int d^3r \left[\frac{\rho v^2}{2} + \rho \varepsilon(\rho) \right] \quad (21)$$

где ρ - плотность среды, $\mathbf{v} = \nabla \phi$ - скорость, ϕ - потенциал, ε - внутренняя энергия единицы массы. Из условия изэнтропичности $S = \text{Const}$ можно выразить давление через плотность и внутреннюю энергию: $P = -(dE/dV)_S = -(dE/d\rho)(d\rho/dV) = \rho^2 d\varepsilon/d\rho$. Каноническими переменными в данной задаче являются плотность и потенциал скорости.

Чтобы в этом убедиться, нужно показать, что уравнение непрерывности и уравнение Эйлера

$$\partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0, \quad \partial_t \mathbf{v} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} = -\frac{1}{\rho} \nabla P \quad (22)$$

можно записать в каноническом виде

$$\partial_t \rho = \frac{\delta H}{\delta \phi}, \quad \partial_t \phi = -\frac{\delta H}{\delta \rho} \quad (23)$$

Сначала находим вариацию гамильтониана при постоянной плотности ρ . Имеем

$$\begin{aligned} (\delta H)_\rho &= \int d^3r (\rho \nabla \phi \cdot \nabla \delta \phi) = \int d^3r [\nabla \cdot (\delta \phi \rho \nabla \phi) - \delta \phi \nabla \cdot (\rho \nabla \phi)] = \\ &= - \int d^3r \delta \phi \nabla \cdot (\rho \nabla \phi) \end{aligned} \quad (24)$$

где

$$\int d^3r [\nabla \cdot (\delta \phi \rho \nabla \phi)] = \int dS \delta \phi \mathbf{n} \cdot \rho \nabla \phi = 0 \quad (25)$$

Таким образом,

$$\frac{\delta H}{\delta \phi} = -\nabla \cdot (\rho \nabla \phi) = \partial_t \rho \quad (26)$$

Аналогично находим

$$\frac{\delta H}{\delta \rho} = \frac{1}{2} (\nabla \phi)^2 + \rho \frac{d\varepsilon}{d\rho} + \varepsilon \quad (27)$$

Учитывая потенциальность течения, $\text{rot } \mathbf{v} = 0 \rightarrow (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} = \nabla v^2/2$, получим из уравнения Эйлера

$$\nabla \frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \left[\frac{(\nabla \phi)^2}{2} \right] = -\frac{1}{\rho} \nabla \left(\rho^2 \frac{d\varepsilon}{d\rho} \right) = -\nabla \left(\rho \frac{d\varepsilon}{d\rho} + \varepsilon \right). \quad (28)$$

Интегрируя это равенство, получим

$$-\frac{\partial \phi}{\partial t} = \left[\frac{(\nabla \phi)^2}{2} \right] + \rho \frac{d\varepsilon}{d\rho} + \varepsilon = \frac{\delta H}{\delta \rho}. \quad (29)$$

Таким образом, плотность и потенциал скорости действительно являются каноническими переменными в данной задаче.

Рассмотрим звуковые волны небольшой амплитуды, так что возмущение плотности $\rho_1 \ll \rho_0$ и скорость движения среды $v \ll c_s$ - скорости звука. Найдём квадратичную и кубическую по малым параметрам части гамильтониана, используя

$$\rho \varepsilon(\rho) = (\rho_0 + \rho_1) \left[\varepsilon_0 + \rho_1 \varepsilon'_0 + \frac{\rho_1^2}{2} \varepsilon''_0 + \frac{\rho_1^3}{6} \varepsilon'''_0 \right]. \quad (30)$$

Кроме того, представим скорость звука в виде

$$c_s^2 = \left(\frac{dP}{d\rho} \right)_s = \frac{d}{d\rho} \left(\rho^2 \frac{d\varepsilon}{d\rho} \right)_0 = 2\rho_0 \varepsilon'_0 + \rho_0^2 \varepsilon''_0 \quad (31)$$

Тогда квадратичная часть есть

$$H_2 = \int d^3r \left[\frac{\rho_0}{2} (\nabla \phi)^2 + \frac{\rho_1^2}{2\rho_0} c_s^2 \right] \quad (32)$$

Переходя к фурье-компонентам, получим

$$H_2 = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \left[\rho_0 k^2 \phi_{\mathbf{k}} \phi_{-\mathbf{k}} + \frac{c_s^2}{\rho_0} \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} \right]. \quad (33)$$

Вводя новые канонические переменные через соотношения

$$\rho_{\mathbf{k}} = \sqrt{\frac{\rho_0 k}{2c_s}} (a_{\mathbf{k}} + a_{\mathbf{k}}^*), \quad \phi_{\mathbf{k}} = \sqrt{\frac{c_s}{2\rho_0 k}} \frac{(a_{\mathbf{k}} - a_{\mathbf{k}}^*)}{i} \quad (34)$$

приведем квадратичную часть гамильтониана к диагональному виду

$$H_2 = \sum_{\mathbf{k}} \omega_k a_{\mathbf{k}}^* a_{\mathbf{k}} \quad (35)$$

где $\omega_k = c_s k$.

Кубическая по каноническим переменным часть гамильтониана имеет вид

$$H_3 = \int d^3r \left[\frac{\rho_1}{2} (\nabla \phi)^2 + \frac{g c_s^2}{2\rho_0^2} \rho_1^3 \right] \quad (36)$$

где безразмерный коэффициент g для политропы с показателем γ (т. е. $P \sim \rho^\gamma$) равен $g = (\gamma - 2)/3$. После перехода к новым каноническим переменным $a_{\mathbf{k}}^*, a_{\mathbf{k}}$ получим вклад от первого члена в H_3 :

$$\begin{aligned} \int d^3r \frac{\rho_1}{2} (\nabla \phi)^2 &= \frac{1}{2\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \sqrt{\frac{c_s k}{8\rho_0 k_1 k_2}} (\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{k}_2) \times \\ &\times [(a_{\mathbf{k}} + a_{-\mathbf{k}}^*) (a_{\mathbf{k}_1} - a_{-\mathbf{k}_1}^*) (a_{\mathbf{k}_2} - a_{-\mathbf{k}_2}^*)] \Delta(\mathbf{k} + \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2) \end{aligned} \quad (37)$$

Напомним, что, рассматривая устойчивую систему, мы опускаем члены, содержащие произведения канонических переменных вида $a_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}_1} a_{\mathbf{k}_2}$ и $a_{\mathbf{k}}^* a_{\mathbf{k}_1}^* a_{\mathbf{k}_2}^*$.

Преобразуем выражение

$$\sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \sqrt{\frac{k}{k_1 k_2}} (\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{k}_2) a_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}_1}^* a_{-\mathbf{k}_2}^* \Delta(\mathbf{k} + \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2) \quad (38)$$

с помощью замены переменных $\mathbf{k}_1 \rightarrow -\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 \rightarrow -\mathbf{k}_2$, с учетом $\sum_{\mathbf{k}} \rightarrow \sum_{-\mathbf{k}}$ к виду

$$\sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \sqrt{\frac{k}{k_1 k_2}} (\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{k}_2) a_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}_1}^* a_{\mathbf{k}_2}^* \Delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \quad (39)$$

Выражение

$$\sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \sqrt{\frac{k}{k_1 k_2}} (\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{k}_2) (-a_{\mathbf{k}_1} a_{-\mathbf{k}}^* a_{-\mathbf{k}_2}^*) \Delta(\mathbf{k} + \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2) \quad (40)$$

с помощью переобозначения переменных суммирования $\mathbf{k}_1 \leftrightarrow \mathbf{k}$ с последующей заменой переменных $\mathbf{k}_1 \rightarrow -\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 \rightarrow -\mathbf{k}_2$ приводится к виду

$$\sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \sqrt{\frac{k_1}{k k_2}} (\mathbf{k} \cdot \mathbf{k}_2) a_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}_1}^* a_{\mathbf{k}_2}^* \Delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \quad (41)$$

И аналогично выражение с заменой $\mathbf{k}_1$ на $\mathbf{k}_2$. Добавляя в H_3 вклад от

$$\int d^3r \frac{g c_s^2}{2 \rho_0^2} \rho_1^3 \quad (42)$$

в итоге получим

$$H_3 = \frac{1}{2\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \sqrt{\frac{c_s}{8\rho_0}} \sqrt{k k_1 k_2} \Delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \times \\ \times (a_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}_1}^* a_{\mathbf{k}_2}^* + c.c) (\cos \theta_{12} + \cos \theta_{k_2} + \cos \theta_{k_1} + 3g) \quad (43)$$

где, например, θ_{12} - угол между волновыми векторами $\mathbf{k}_1$ и $\mathbf{k}_2$, т. е. $\cos \theta_{12} = \mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{k}_2 / (k_1 k_2)$ и т. д. Это выражение будет в дальнейшем часто использоваться для иллюстрации общих утверждений.

20.2 2. The Derivation of the Kinetic Equation by Kolokolov

20.2.1 2.1. The Quantum Kinetic Equation

Theory

В первой лекции мы видели, что гамильтонов формализм позволяет описывать волновые возбуждения в терминах числа волн (чисел заполнения гармонического осциллятора). Уравнение, описывающее изменение чисел заполнения, обусловленного слабой нелинейностью, удобнее получить (так же как в равновесной статистической механике), используя квантовый подход.

Основой квантовой кинетики является уравнение для матрицы плотности, применение которого мы рассмотрим в конце курса. В случае, когда эффекты квантовой интерференции разрушаются за счет взаимодействия с окружением (термостатом), мы получаем уравнение только для диагональных элементов матрицы плотности - вероятности системе находиться в том или ином состоянии. Это уравнение называется уравнением Паули, или основным кинетическим уравнением (master equation), и имеет вид

$$\frac{dp_n}{dt} = \sum_{m \neq n} w_{mn} p_m - p_n \sum_{m \neq n} w_{nm} \quad (44)$$

где p_n - вероятность найти систему в состоянии n , w_{nm} - вероятность перехода системы из состояния m в состояние n , которая определяется с помощью золотого правила Ферми:

$$w_{nm} = \frac{2\pi}{\hbar} |\mathcal{H}_{nm}|^2 \delta(E_n - E_m) \quad (45)$$

Здесь w_{nm} - вероятность перехода в единицу времени между состояниями $|n\rangle$ и $|m\rangle$ с энергиями E_n и E_m и $\mathcal{H}_{nm}$ - матричный элемент гамильтониана $\hat{\mathcal{H}}$ между этими состояниями: $\mathcal{H}_{nm} = \langle m | \hat{\mathcal{H}} | n \rangle$. В дальнейшем будем использовать систему единиц с постоянной Планка $\hbar = 1$. Формула (45) получена в предположении относительной малости взаимодействия: величина w_{nm} , имеющая размерность обратного времени, должна быть существенно меньше характерных энергий, входящих "в игру" (в каждой

конкретной ситуации это требование можно сформулировать точнее). Иными словами, состояния $|n\rangle$ и $|m\rangle$ близки к стационарным для гамильтониана $\hat{\mathcal{H}}$. δ -Функция в (45) является идеализацией нормированного распределения малой, но конечной ширины (как правило, порядка всё той же вероятности переходов w_{nm}). Структура этого распределения несущественна, если плотность уровней в системе настолько велика, что внутри ширины "размытия" δ -функции их число много больше единицы. Для макроскопических систем это требование выполняется, поэтому в дальнейшем, если не оговорено обратное, мы будем иметь в виду именно такую ситуацию.

Применим квантовый подход для описания кинетики волн. Классический гамильтониан, выраженный через канонические переменные $a_{\mathbf{k}}, a_{\mathbf{k}}^*$ и учитывающий кубическую нелинейность по каноническим переменным, для устойчивых сред имеет вид

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^* a_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} a_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}_1}^* a_{\mathbf{k}_2}^* \Delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) + c.c. \quad (46)$$

В квантовом подходе в качестве динамических переменных осцилляторов используем операторы рождения-уничтожения $\hat{a}_{\mathbf{k}}^+, \hat{a}_{\mathbf{k}}$ ($\mathbf{k}$ - волновой вектор (номер осциллятора для волн)) с коммутационными соотношениями:

$$[\hat{a}_{\mathbf{k}}, \hat{a}_{\mathbf{q}}^+] = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{q}} \quad (47)$$

Гамильтониан $\hat{\mathcal{H}}$ в этом случае является суммой свободного гамильтониана $\hat{\mathcal{H}}_0$ и возмущения $\hat{V}$:

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{V}, \quad \hat{\mathcal{H}}_0 = \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}} \quad (48)$$

$$\hat{V} = \frac{1}{2\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{l}, \mathbf{m}} (V_{\mathbf{q}; \mathbf{l}, \mathbf{m}} \hat{a}_{\mathbf{l}}^+ \hat{a}_{\mathbf{m}}^+ \hat{a}_{\mathbf{q}} + V_{\mathbf{q}; \mathbf{l}, \mathbf{m}}^* \hat{a}_{\mathbf{q}}^+ \hat{a}_{\mathbf{m}} \hat{a}_{\mathbf{l}}) \Delta(\mathbf{q} - \mathbf{l} - \mathbf{m}) \quad (49)$$

Гамильтониан по построению эрмитов; для простоты будем считать, что $V_{\mathbf{q}; \mathbf{l}, \mathbf{m}}$ отличны от нуля, когда все волновые вектора $\mathbf{l}, \mathbf{m}$ и $\mathbf{q}$ - разные. Выделим в операторе $\hat{V}$ члены, меняющие числа заполнения волн с волновым вектором $\mathbf{k}$:

$$\begin{aligned} \hat{V}_{\mathbf{k}} = & \frac{1}{2\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{1}, \mathbf{2}} (V_{\mathbf{k}; \mathbf{1}, \mathbf{2}} \hat{a}_{\mathbf{1}}^+ \hat{a}_{\mathbf{2}}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}} + V_{\mathbf{k}; \mathbf{1}, \mathbf{2}}^* \hat{a}_{\mathbf{k}}^+ \hat{a}_{\mathbf{1}} \hat{a}_{\mathbf{2}}) \Delta(\mathbf{k} - \mathbf{1} - \mathbf{2}) + \\ & + \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{1}, \mathbf{2}} (V_{\mathbf{2}; \mathbf{k}, \mathbf{1}} \hat{a}_{\mathbf{k}}^+ \hat{a}_{\mathbf{1}}^+ \hat{a}_{\mathbf{2}} + V_{\mathbf{2}; \mathbf{k}, \mathbf{1}}^* \hat{a}_{\mathbf{2}}^+ \hat{a}_{\mathbf{1}} \hat{a}_{\mathbf{k}}) \Delta(\mathbf{2} - \mathbf{1} - \mathbf{k}) \end{aligned} \quad (50)$$

В первой сумме в выражении для $\hat{V}_{\mathbf{k}}$ (50) по два слагаемых, с учетом симметрии перестановки $\mathbf{1} \longleftrightarrow \mathbf{2}$, соответствуют переходам,

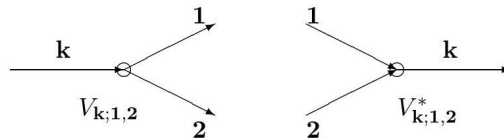


Рис. 1. Распад волны с волновым вектором $\mathbf{k}$, и обратный процесс слияния. Кружком обозначена вершина взаимодействия $V_{\mathbf{k}; \mathbf{1}, \mathbf{2}}$

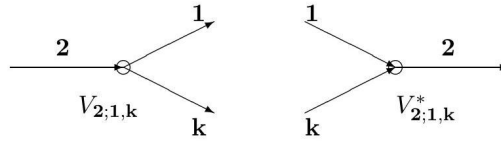


Рис. 2. Распад волны с волновым вектором 2, в результате которого появляется волна с волновым вектором $\mathbf{k}$, и обратный процесс слияния. Кругом обозначена вершина взаимодействия $V_{2;1,k}$

изображенным на рис. 1. Во второй сумме в выражении для $\hat{V}_{\mathbf{k}}$ (50) каждое слагаемое соответствуют переходам, показанным на рис. 2.

Если температура не слишком низкая, то тепловой шум разрушает все эффекты квантовой интерференции и состояние системы задается значениями чисел заполнения $n_{\mathbf{k}}$ ¹. Набор $\{n_{\mathbf{k}}\}$ мы будем также называть функцией распределения.

Взаимодействие $\hat{V}$ приводит к тому, что произвольно выбранное начальное состояние $\{n_{\mathbf{k}}\}$ будет медленно (в меру малости $\hat{V}$) изменяться со временем за счет переходов, показанных на рис. 1,2.

Вероятности таких переходов получаются подстановкой матричных элементов:

$$\langle n_1 + 1, n_2 + 1, n_k - 1, \dots | V_{\mathbf{k};1,2} \hat{a}_1^+ \hat{a}_2^+ \hat{a}_{\mathbf{k}} | n_1, n_2, n_k, \dots \rangle = (51)$$

$$= V_{\mathbf{k};1,2} \sqrt{(n_1 + 1)(n_2 + 1)n_k},$$

$$\langle n_1 - 1, n_2 - 1, n_k + 1, \dots | V_{\mathbf{k};1,2}^* \hat{a}_{\mathbf{k}}^+ \hat{a}_1 \hat{a}_2 | n_1, n_2, n_k, \dots \rangle =$$

$$= V_{\mathbf{k};1,2}^* \sqrt{(n_k + 1)n_1 n_2}, \quad (52)$$

$$\langle n_1 + 1, n_k + 1, n_2 - 1, \dots | V_{2;\mathbf{k},1} \hat{a}_{\mathbf{k}}^+ \hat{a}_1^+ \hat{a}_2 | n_1, n_2, n_k, \dots \rangle =$$

$$= V_{2;\mathbf{k},1} \sqrt{(n_k + 1)(n_1 + 1)n_2}, \quad (53)$$

$$\langle n_1 - 1, n_k - 1, n_2 + 1, \dots | V_{2;\mathbf{k},1}^* \hat{a}_2^+ \hat{a}_1 \hat{a}_{\mathbf{k}} | n_1, n_2, n_k, \dots \rangle =$$

$$= V_{2;\mathbf{k},1}^* \sqrt{(n_2 + 1)n_1 n_k}. \quad (54)$$

Многоточием обозначены неизменяющиеся числа заполнения остальных осцилляторов.

В элементарном акте число заполнения изменяется на единицу. Поэтому, используя золотое правило (45), кинетическое уравнение очевидным образом переходит в уравнение эволюции функции распределения $\{n_{\mathbf{k}}\}$. Производная по времени числа заполнения $n_{\mathbf{k}}$ для данного осциллятора определяется вероятностями всех переходов, в которых он участвует. При этом нужно учесть, что в части переходов $n_{\mathbf{k}}$ возрастает, в части - убывает (соответственно, эти переходы входят во временную производную $\dot{n}_{\mathbf{k}}$ с разными знаками):

¹¹ Количественное описание такой релаксации мы затронем в конце курса, а пока примем это утверждение как интуитивно приемлемое. Заметим, что тем самым мы оставляем вне рамок нашего рассмотрения квантовые когерентные эффекты, такие, как сверхтекучесть, сверхпроводимость, слабую локализацию и т. д. Более того, описание состояний набором $\{n_{\mathbf{k}}\}$, оказывается, может быть принципиально неполным и во вполне классических задачах. Для этого нужны весьма специальные условия, и мы пока ограничимся системами, "простыми" в вышеуказанном смысле.

$$\begin{aligned}
\dot{n}_{\mathbf{k}} = & \frac{2\pi}{V} \sum_{1,2} |V_{2;1,\mathbf{k}}|^2 [(n_{\mathbf{k}} + 1) (n_1 + 1) n_2 - (n_2 + 1) n_1 n_{\mathbf{k}}] \times \\
& \times \Delta(\mathbf{2} - \mathbf{1} - \mathbf{k}) \delta(\omega_1 + \omega_k - \omega_2) + \\
& + \frac{\pi}{V} \sum_{1,2} |V_{\mathbf{k};1,2}|^2 [(n_{\mathbf{k}} + 1) n_1 n_2 - (n_1 + 1) (n_2 + 1) n_{\mathbf{k}}] \times \\
& \times \Delta(\mathbf{k} - \mathbf{1} - \mathbf{2}) \delta(\omega_k - \omega_1 - \omega_2)
\end{aligned} \tag{55}$$

Мы считаем $V_{\mathbf{k};1,2}$ (называемую также вершиной взаимодействия) симметричной по аргументам 1 и 2. Вторая сумма в правой части (55) входит с коэффициентом 1/2, чтобы не учитывать одни и те же конечные состояния два раза.

Кубические по числам заполнения слагаемые в правой части (55) (её называют столкновительный член или интеграл столкновений) сокращаются, и квантовое кинетическое уравнение приобретает более простой вид:

$$\begin{aligned}
\dot{n}_{\mathbf{k}} = & \frac{2\pi}{V} \sum_{1,2} |V_{2;1,\mathbf{k}}|^2 [(n_{\mathbf{k}} + n_1 + 1) n_2 - n_1 n_{\mathbf{k}}] \Delta(\mathbf{2} - \mathbf{1} - \mathbf{k}) \\
& \cdot \delta(\omega_1 + \omega_k - \omega_2) + \frac{\pi}{V} \sum_{1,2} |V_{\mathbf{k};1,2}|^2 [n_1 n_2 - (n_1 + n_2 + 1) n_{\mathbf{k}}] \\
& \cdot \Delta(\mathbf{k} - \mathbf{1} - \mathbf{2}) \delta(\omega_k - \omega_1 - \omega_2)
\end{aligned} \tag{56}$$

Легко проверить, что равновесная функция распределения равна:

$$n_{\mathbf{k}} = \frac{1}{e^{\beta\omega_k} - 1} \tag{57}$$

где β - обратная температура, обращает в ноль интеграл столкновений. Так и должно быть, поскольку в тепловом равновесии никакой эволюции нет.

Если числа заполнения велики $n_{\mathbf{k}} \gg 1$, "квантовой единицей" можно пренебречь, и кинетическое уравнение приобретает вид

$$\begin{aligned}
\dot{n}_{\mathbf{k}} = & \frac{2\pi}{V} \sum_{1,2} |V_{2;1,\mathbf{k}}|^2 [(n_{\mathbf{k}} + n_1) n_2 - n_1 n_{\mathbf{k}}] \Delta(\mathbf{2} - \mathbf{1} - \mathbf{k}) \\
& \cdot \delta(\omega_1 + \omega_k - \omega_2) + \frac{\pi}{V} \sum_{1,2} |V_{\mathbf{k};1,2}|^2 [n_1 n_2 - (n_1 + n_2) n_{\mathbf{k}}] \\
& \cdot \Delta(\mathbf{k} - \mathbf{1} - \mathbf{2}) \delta(\omega_k - \omega_1 - \omega_2)
\end{aligned} \tag{58}$$

Однако если $n_{\mathbf{k}} \gg 1$, то система, по существу, классическая. При выводе кинетического уравнения мы использовали золотое правило Ферми (45), которое является следствием уравнений движения:

$$i\dot{\hat{a}}_{\mathbf{k}} = [\hat{a}_{\mathbf{k}}, \hat{\mathcal{H}}] \tag{59}$$

и понятием чисел заполнения: $n_{\mathbf{k}} = \langle \hat{a}_{\mathbf{k}}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}} \rangle$. В классическом пределе операторы $\hat{a}_{\mathbf{k}}^+, \hat{a}_{\mathbf{k}}$ становятся просто классическими амплитудами $a_{\mathbf{k}}^*, a_{\mathbf{k}}$, удовлетворяющими классическим же уравнениям движения:

$$i\dot{a}_{\mathbf{k}} = \{a_{\mathbf{k}}, \mathcal{H}\} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial a_{\mathbf{k}}^*} \quad (60)$$

Совокупность $\{n_{\mathbf{k}}\}$ сохраняет свой смысл функции распределения, задающей состояние системы.

Таким образом, уравнение (58) можно использовать для описания кинетики изначально классических систем (волны на воде, упругие колебания различных типов и т. д.), если эволюционные уравнения удастся записать в виде (60) или в каноническом виде.

В этой главе мы построим такой аппарат для классических возбуждений в сплошных средах. Хотя после этого ответ в виде (58) нам уже известен, мы его воспроизведем, оставаясь полностью в рамках классических уравнений. Наша конструкция, по существу, будет включать в себя и вывод золотого правила (45), только в классических терминах. При этом для конкретной физической ситуации - волновой кинетики - мы лучше поймем характер сделанных приближений и область применимости подхода в целом.

20.2.2 2.2. The Classic Approach

Theory

Мы получили гамильтониан, выраженный через канонические переменные $a_{\mathbf{k}}, a_{\mathbf{k}}^*$, учитывающий кубическую нелинейность. Для устойчивых сред он имеет вид

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^* a_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} a_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}_1}^* a_{\mathbf{k}_2}^* \Delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) + c.c. \quad (61)$$

В новых канонических переменных уравнения движения сохраняют свой вид

$$\partial_t a_{\mathbf{k}} = -i \frac{\partial H}{\partial a_{\mathbf{k}}^*}. \quad (62)$$

Если ограничиться квадратичной частью гамильтониана, то плоская монохроматическая волна сохраняет свою амплитуду, а

меняется лишь фаза. Реально измеримы только средние (по времени или по ансамблю) вида $\langle a_{\mathbf{k}}^* a_{\mathbf{k}'} \rangle$. При отсутствии взаимодействия из-за хаотизации фаз, вызванной неоднородностью среды, тепловыми флуктуациями, дисперсией волн, отличны от нуля только парные корреляторы

$$\langle a_{\mathbf{k}}^* a_{\mathbf{k}'} \rangle_0 = n_{\mathbf{k}} \Delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \quad (63)$$

Тогда корреляторы от четного числа канонических переменных разбиваются на произведения всевозможных парных корреляторов, например:

$$\begin{aligned} \langle a_{\mathbf{k}_1} a_{\mathbf{k}_2} a_{\mathbf{k}_3}^* a_{\mathbf{k}_4}^* \rangle_0 = n_{\mathbf{k}_1} n_{\mathbf{k}_2} [\Delta(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3) \Delta(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_4) + \\ + \Delta(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_4) \Delta(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3)] \end{aligned} \quad (64)$$

Среднее же от произведения нечетного числа канонических переменных или от четного, но с несовпадающим числом переменных a^* и a , равно нулю.

При учете нелинейности волны с различными волновыми векторами, взаимодействуя достаточно долго, в принципе, могут сфазироваться. Однако при слабой нелинейности этот эффект разрушается дисперсией волн, т. е. расплыванием узких волновых пакетов (которые только и могут длительное время взаимодействовать друг с другом), а также

всегда присутствующими в реальных системах неоднородностями и тепловыми флуктуациями.

Найдем изменение числа волн $n_{\mathbf{k}}$ со временем за счет слабого взаимодействия:

$$\partial_t n_{\mathbf{k}} = \langle a_{\mathbf{k}} \partial_t a_{\mathbf{k}}^* + a_{\mathbf{k}}^* \partial_t a_{\mathbf{k}} \rangle \quad (65)$$

Из уравнений движения следует

$$\begin{aligned} \partial_t a_{\mathbf{k}} + i\omega_k a_{\mathbf{k}} = \\ = -\frac{i}{\sqrt{V}} \sum_{12} \left[V_{1,2\mathbf{k}} a_1 a_2^* \Delta(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}) + \frac{1}{2} V_{\mathbf{k},12}^* a_1 a_2 \Delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \right]. \end{aligned} \quad (66)$$

Аналогично

$$\begin{aligned} \partial_t a_{\mathbf{k}}^* - i\omega_k a_{\mathbf{k}}^* = \\ = \frac{i}{\sqrt{V}} \sum_{12} \left[V_{1,2\mathbf{k}}^* a_1^* a_2 \Delta(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}) + \frac{1}{2} V_{\mathbf{k},12} a_1^* a_2^* \Delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \right]. \end{aligned} \quad (67)$$

Тогда получим

$$\begin{aligned} \partial_t n_{\mathbf{k}} = & \left\langle \frac{i}{\sqrt{V}} \sum_{12} [\Delta(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}) (V_{1,2\mathbf{k}}^* a_1^* a_2 a_{\mathbf{k}} - V_{1,2\mathbf{k}} a_1 a_2^* a_{\mathbf{k}}^*)] \right\rangle + \\ & + \left\langle \frac{i}{2\sqrt{V}} \sum_{12} [\Delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) (V_{\mathbf{k},12} a_1^* a_2^* a_{\mathbf{k}} - V_{\mathbf{k},12}^* a_1 a_2 a_{\mathbf{k}}^*)] \right\rangle. \end{aligned} \quad (68)$$

Замечая, что в круглых скобках стоят комплексно сопряженные величины, последнее уравнение можно переписать так:

$$\begin{aligned} \partial_t n_{\mathbf{k}} = \text{Im} \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{12} \Delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) V_{\mathbf{k},12}^* \langle a_1 a_2 a_{\mathbf{k}}^* \rangle - \\ - \text{Im} \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{12} 2\Delta(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}) V_{1,2\mathbf{k}}^* \langle a_1^* a_2 a_{\mathbf{k}} \rangle. \end{aligned} \quad (69)$$

Если вычислять корреляторы для волнового поля без учета нелинейности, то получим ноль. Поэтому надо найти $\langle a_1^* a_2 a_{\mathbf{k}} \rangle$ в следующем порядке теории возмущений.

20.2.3 2.3. Algebraic Approach

Theory

Для этого вычислим

$$\partial_t \langle a_1 a_2 a_{\mathbf{k}}^* \rangle = \langle \partial_t a_1 a_2 a_{\mathbf{k}}^* \rangle + \langle a_1 \partial_t a_2 a_{\mathbf{k}}^* \rangle + \langle a_1 a_2 \partial_t a_{\mathbf{k}}^* \rangle, \quad (70)$$

сохраняя в возникающих 4-корреляторах только члены с одинаковым числом a и a^* . Имеем:

$$\langle a_1 a_2 \partial_t a_{\mathbf{k}}^* \rangle = i\omega_k \langle a_1 a_2 a_{\mathbf{k}}^* \rangle + \frac{i}{2\sqrt{V}} \sum_{34} \Delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_4) V_{\mathbf{k},34} \langle a_1 a_2 a_3^* a_4^* \rangle_0 \quad (71)$$

$$\begin{aligned}
\langle \partial_t a_1 a_2 a_{\mathbf{k}}^* \rangle &= -i\omega_1 \langle a_1 a_2 a_{\mathbf{k}}^* \rangle - \frac{i}{\sqrt{V}} \sum_{34} \Delta(\mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_4 - \mathbf{k}_1) V_{3,41} \langle a_{\mathbf{k}}^* a_2 a_3 a_4^* \rangle_0 \\
\langle a_1 \partial_t a_2 a_{\mathbf{k}}^* \rangle &= -i\omega_2 \langle a_1 a_2 a_{\mathbf{k}}^* \rangle - \frac{i}{\sqrt{V}} \sum_{34} \Delta(\mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_4 - \mathbf{k}_2) V_{3,42} \langle a_{\mathbf{k}}^* a_1 a_3 a_4^* \rangle_0
\end{aligned} \quad (72)$$

Вычисляя 4-корреляторы, получим:

$$\begin{aligned}
\sum_{34} \Delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_4) V_{\mathbf{k},34} \langle a_1 a_2 a_3^* a_4^* \rangle_0 &= \sum_{34} \Delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_4) V_{\mathbf{k},34} n_1 n_2 \\
&\cdot [\Delta(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3) \Delta(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_4) + \Delta(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_4) \Delta(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3)] = \\
&= 2V_{\mathbf{k},12} n_1 n_2 \Delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)
\end{aligned} \quad (74)$$

$$\begin{aligned}
\sum_{34} \Delta(\mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_4 - \mathbf{k}_1) V_{3,41} \langle a_{\mathbf{k}}^* a_2 a_3 a_4^* \rangle_0 &= \\
&= \sum_{34} \Delta(\mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_4 - \mathbf{k}_1) V_{3,41} n_k n_2 \Delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}_3) \Delta(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_4) = \\
&= 2V_{\mathbf{k},12} n_k n_2 \Delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)
\end{aligned} \quad (75)$$

В последнем случае мы пренебрегли $\Delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}_2) \Delta(\mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_4)$, поскольку это приводит к равенству $\mathbf{k} = \mathbf{k}_2$, $\mathbf{k}_1 = 0$, и таким вкладом можно пренебречь. Аналогично

$$\sum_{34} \Delta(\mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_4 - \mathbf{k}_2) V_{3,42} \langle a_{\mathbf{k}}^* a_1 a_3 a_4^* \rangle_0 = 2V_{\mathbf{k},12} n_k n_1 \Delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2). \quad (76)$$

Собирая все вместе, получим уравнение

$$\begin{aligned}
[\partial_t - i(\omega_k - \omega_1 - \omega_2)] \langle a_1 a_2 a_{\mathbf{k}}^* \rangle &= \\
&= \frac{i}{\sqrt{V}} V_{\mathbf{k},12} \Delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) [n_1 n_2 - n_k (n_1 + n_2)].
\end{aligned} \quad (77)$$

В первом приближении можно считать правую часть этого уравнения постоянной. С учетом небольшого затухания, всегда имеющегося в реальных системах, решением уравнения

$$[\partial_t - i(\Delta\omega + i\delta)] \langle a a a^* \rangle = \text{Const} \quad (78)$$

будет

$$\langle a a a^* \rangle = A e^{i\Delta\omega t - \delta t} + \frac{i(\text{Const})}{\Delta\omega + i\delta} \Rightarrow_{t \rightarrow \infty} (\text{Const}) \pi \delta(\Delta\omega) \quad (79)$$

Тогда скорость изменения числа волн с волновым вектором $\mathbf{k}$ есть

$$\begin{aligned}
\dot{n}_{\mathbf{k}} &= \frac{\pi}{V} \sum_{12} |V_{\mathbf{k},12}|^2 \Delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \delta(\omega_k - \omega_{k_1} - \omega_{k_2}) [n_1 n_2 - n_k (n_1 + n_2)] - \\
&- \frac{2\pi}{V} \sum_{12} |V_{1,2\mathbf{k}}|^2 \Delta(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k} - \mathbf{k}_2) \delta(\omega_{k_1} - \omega_k - \omega_{k_2}) [n_k n_2 - n_1 (n_k + n_2)].
\end{aligned} \quad (80)$$

20.2.4 2.4. The Diagrammatic Approach

Theory

Более наглядным является представление членов ряда теории возмущений и вычисление корреляторов с помощью диаграмм. Представим парные корреляторы

$$\begin{aligned}\langle a_{\mathbf{k}}^* a_{\mathbf{k}'} \rangle_0 &= \mathbf{k} \longleftarrow \mathbf{k}' = \mathbf{k}' \longrightarrow \longrightarrow \mathbf{k} = n_{\mathbf{k}} \Delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}'), \\ \langle a_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}'} \rangle_0 &= \mathbf{k} \longrightarrow \longleftarrow \mathbf{k}' = \langle a_{\mathbf{k}}^* a_{\mathbf{k}'}^* \rangle_0 = \mathbf{k} \longleftarrow \longrightarrow \mathbf{k}' = 0,\end{aligned}\quad (81)$$

где амплитуда $a_{\mathbf{k}}^*$ представлена в виде $\mathbf{k} \longleftarrow$, тогда как $a_{\mathbf{k}}$ в виде $\mathbf{k} \longrightarrow$. Корреляторы отличны от нуля лишь в том случае, когда направления стрелок совпадают.

Решение уравнения для $a_{\mathbf{k}_1}$

$$\begin{aligned}\tilde{a}_{\mathbf{k}_1}(t) &= a_{\mathbf{k}_1}(0)e^{-i\omega_{\mathbf{k}_1}t} - \\ &- i \int_0^t d\tau e^{-i\omega_{\mathbf{k}_1}(t-\tau)} \frac{1}{2\sqrt{V}} \sum_{34} V_{\mathbf{k}_1,34}^* a_3(\tau) a_4(\tau) \Delta(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_4) - \\ &- i \int_0^t d\tau e^{-i\omega_{\mathbf{k}_1}(t-\tau)} \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{34} V_{\mathbf{k}_3, \mathbf{k}_1 4} a_3(\tau) a_4^*(\tau) \Delta(\mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_4)\end{aligned}\quad (82)$$

и комплексно сопряженной величины $a_{\mathbf{k}_2}^*$ можно изобразить в виде диаграмм, представленных на рис. 3.

$$\begin{aligned}\tilde{a}_1 \Rightarrow \Rightarrow a_1 \longrightarrow &- \frac{i}{2} \begin{array}{c} a_4 \\ V_{134}^* a_3 \\ a_3 \end{array} \longleftrightarrow \begin{array}{c} -i \\ V_{314} \\ a_3 \end{array} \longleftrightarrow \\ \tilde{a}_2^* \Leftarrow \Leftarrow a_2^* \longleftarrow &+ \frac{i}{2} \begin{array}{c} a_4^* \\ V_{234}^* \\ a_3^* \end{array} - i \begin{array}{c} a_4^* \\ V_{324}^* \\ a_3 \end{array} \longleftrightarrow\end{aligned}$$

Рис. 3. Диаграммное представление решения уравнений для a_1 и a_2^* в первом порядке теории возмущений по трехволновому взаимодействию

$$\begin{aligned}\langle \tilde{a}_1 a_2^* a_{\mathbf{k}}^* \rangle &= -\frac{i}{2} \Sigma_{34} \begin{array}{c} a_3 \\ V_{134}^* a_4 \longrightarrow \longrightarrow a_2^* \\ a_4 \longrightarrow a_k^* \end{array} = -i V_{12k}^* n_2 n_k \\ \langle a_1 \tilde{a}_2^* a_{\mathbf{k}}^* \rangle &= i \Sigma_{34} \begin{array}{c} a_3^* \\ V_{324}^* \\ a_4 \end{array} \longrightarrow a_1 = i V_{12k}^* n_1 n_k \\ \langle a_1 a_2^* \tilde{a}_{\mathbf{k}}^* \rangle &= i \Sigma_{34} \begin{array}{c} a_3^* \\ V_{3k4}^* a_4 \longrightarrow \longrightarrow a_1 \\ a_4 \longrightarrow a_2^* \end{array} = -i V_{12k}^* n_1 n_2\end{aligned}$$

Рис. 4. Диаграммное представление тройных корреляторов $\langle a_1 a_2^* a_{\mathbf{k}}^* \rangle$ в первом порядке теории возмущений по трехволновому взаимодействию. Результат на верхней диаграмме удваивается, поскольку есть два способа спаривания a и a^*

Тогда тройные корреляторы в первом порядке теории возмущений можно представить в виде следующих диаграмм, изображенных на рис. 4. Аналитически результат, например для верхнего коррелятора, выглядит так:

$$\begin{aligned}
\langle \tilde{a}_1 a_2^* a_{\mathbf{k}}^* \rangle(t) &= \frac{(-i)}{2\sqrt{V}} \sum_{34} V_{134}^* \int_0^t d\tau e^{i(t-\tau)(\omega_2+\omega_k-\omega_1+i\delta)} \langle a_3 a_4 a_2^* a_{\mathbf{k}}^* \rangle_0(\tau) = \\
&= \frac{i}{\sqrt{V}} V_{12k}^* n_2 n_k \pi \delta(\omega_2 + \omega_k - \omega_1).
\end{aligned} \tag{83}$$

Собирая приведенные результаты, получаем:

$$V_{1k2} \langle a_1 a_2^* a_{\mathbf{k}}^* \rangle = -i\pi |V_{1k2}|^2 [n_2 n_k - n_1 (n_2 + n_k)] \delta(\omega_2 + \omega_k - \omega_1).$$

Величина $V_{k12} \langle a_1^* a_2^* a_{\mathbf{k}} \rangle$ получается просто перестановкой индексов. В итоге мы получаем приведенное выше кинетическое уравнение.

Первая часть этого уравнения описывает процесс распада волны с волновым вектором $\mathbf{k}$ на две волны с волновыми векторами $\mathbf{k}_1$ и $\mathbf{k}_2$, вместе с обратным процессом объединения двух волн с волновыми векторами $\mathbf{k}_1$ и $\mathbf{k}_2$ в волну с волновым вектором $\mathbf{k}$, тогда как вторая часть описывает процессы слияния волны с волновым вектором $\mathbf{k}$ с другой волной с волновым вектором $\mathbf{k}_2$ и обратный процесс.

Можно было бы подумать, что поскольку изменение числа волн возникает во втором порядке теории возмущения по H_3 , то сравнимый вклад мог бы дать член первого порядка по H_4 . Покажем, что этот вклад равен нулю.

Рассматривая устойчивую среду, мы опустим в гамильтониане члены вида $(a_1 a_2 a_3 a_4 + \text{с.с.})$. Также нет вклада в первом порядке теории возмущений от $(a_1 a_2^* a_3^* a_4^* + \text{с.с.})$, так как, например, $\langle a_{\mathbf{k}}^* \dot{a}_{\mathbf{k}} \rangle \sim \langle a_{\mathbf{k}}^* a_1 a_2^* a_3^* \rangle_0 = 0$. Остается только вклад от

$$H_4 = \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4} T_{12,34} a_1 a_2 a_3^* a_4^* \Delta(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_4). \tag{84}$$

Величина $T_{12,34}$ обладает симметрией относительно перестановки индексов, разделенных запятой. Кроме того, из вещественности

H_4 можно найти, как меняется T при комплексном сопряжении. Для этого переобозначим индексы суммирования $1 \leftrightarrow 3, 2 \leftrightarrow 4$ и выполним комплексное сопряжение, получая

$$H_4 = \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4} T_{34,12}^* a_3^* a_4^* a_1 a_2 \Delta(\mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4 - \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \tag{85}$$

Сравнивая с исходным выражением, имеем $T_{34,12}^* = T_{12,34}$. Из уравнений движения следует

$$\partial_t a_{\mathbf{k}} = -i \frac{\partial H_4}{\partial a_{\mathbf{k}}^*} = -i \sum_{12,3} 2T_{12,3k} a_1 a_2 a_3^* \Delta(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3 - \mathbf{k}) \tag{86}$$

Тогда

$$\partial_t n_{\mathbf{k}} = -i \sum_{12,3} 2T_{12,3k} \langle a_{\mathbf{k}}^* a_1 a_2 a_3^* \rangle_0 \Delta(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3 - \mathbf{k}) + \text{с.с.} \tag{87}$$

Вычисляем коррелятор

$$\langle a_{\mathbf{k}}^* a_1 a_2 a_3^* \rangle_0 = n_{\mathbf{k}} n_2 \Delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1) \Delta(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3) + n_{\mathbf{k}} n_1 \Delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}_2) \Delta(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3). \tag{88}$$

Подставляя полученное выражение в верхнее уравнение и суммируя, получим

$$\partial_t n_{\mathbf{k}} = -i \sum_2 2T_{k2,2k} n_{\mathbf{k}} n_2 - i \sum_1 2T_{1k,1k} n_{\mathbf{k}} n_1 + \text{с.с.} = 0 \tag{89}$$

так как числа волн n_i вещественны и, используя свойства симметрии T при комплексном сопряжении, мы получим ноль.

Поэтому при выводе кинетического уравнения для трехволнового взаимодействия о вкладе H_4 можно не беспокоиться.

20.3 3. A Small Deviation from Thermal Equilibrium by Kolokolov

20.3.1 3.1. The H-Theorem and Thermal Equilibrium

Theory

Мы получили кинетическое уравнение, которое описывает, в частности, необратимое приближение системы к равновесию. Покажем, что энтропия волнового возбуждения среды не убывает.

Введем огрубленное описание волнового поля, разбив дискретное k -пространство на узкие интервалы с одинаковым числом уровней, которое обозначим g . Огрубленное описание соответствует реальной ситуации, когда за счет слабого взаимодействия между различными волнами, взаимодействия с неоднородностями среды, с внешними возмущениями и т. д. мы в состоянии описывать волновое возбуждение системы только в терминах узких волновых пакетов. Пусть в i -м интервале находится n_i волн. Тогда статистический вес Γ такого распределения равен

$$Z = \prod_i \frac{(n_i + g - 1)!}{(g - 1)! (n_i)!} \approx \prod_i \frac{(n_i + g)!}{(g)! (n_i)!} \quad (90)$$

где последнее равенство записано с учетом $n_i \gg 1, g \gg 1$. Изменение энтропии $S = \ln Z$ со временем тогда равно

$$\frac{dS}{dt} = \sum_i \ln \frac{(n_i + g)}{n_i} \frac{dn_i}{dt} = \sum_{\mathbf{k}} \ln \frac{(n_{\mathbf{k}} + 1)}{n_{\mathbf{k}}} \frac{dn_{\mathbf{k}}}{dt} \quad (91)$$

где мы учли, что $n_i = g n_{\mathbf{k}}$ и $\sum_i g(\dots) = \sum_{\mathbf{k}}(\dots)$. В случае $n_{\mathbf{k}} \gg 1$ мы получим

$$\frac{dS}{dt} \approx \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{n_{\mathbf{k}}} \frac{dn_{\mathbf{k}}}{dt} \quad (92)$$

и энтропию волн можно записать в виде

$$S \approx \sum_{\mathbf{k}} \ln n_{\mathbf{k}} \quad (93)$$

Покажем теперь, используя кинетическое уравнение, что энтропия не убывает.

$$\begin{aligned} \frac{dS}{dt} &= \frac{\pi}{V} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} |V_{\mathbf{k}; \mathbf{k}-\mathbf{q}, \mathbf{q}}|^2 \delta(\omega_{\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{q}} - \omega_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}) \frac{1}{n_{\mathbf{k}}} [n_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} n_{\mathbf{q}} - n_{\mathbf{k}} (n_{\mathbf{q}} + n_{\mathbf{k}-\mathbf{q}})] - \\ &- \frac{2\pi}{V} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} |V_{\mathbf{k}+\mathbf{q}; \mathbf{k}, \mathbf{q}}|^2 \delta(\omega_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \omega_{\mathbf{q}} - \omega_{\mathbf{k}}) \frac{1}{n_{\mathbf{k}}} [n_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{q}} - n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} (n_{\mathbf{q}} + n_{\mathbf{k}})] \end{aligned} \quad (94)$$

Для этого во втором члене проведем замену переменных суммирования $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k} - \mathbf{q}$, что позволит сделать одинаковыми V и $\delta(\Delta\omega)$ и $[n_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} n_{\mathbf{q}} - n_{\mathbf{k}} (n_{\mathbf{q}} + n_{\mathbf{k}-\mathbf{q}})]$, и подставим в выражение для dS/dt . Вводя обозначение

$$A \equiv |V_{\mathbf{k}; \mathbf{q}, \mathbf{k}-\mathbf{q}}|^2 \delta(\omega_{\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{q}} - \omega_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}) \quad (95)$$

получим

$$\frac{dS}{dt} = \frac{\pi}{V} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} A [n_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} n_{\mathbf{q}} - n_{\mathbf{k}} (n_{\mathbf{q}} + n_{\mathbf{k}-\mathbf{q}})] \left(\frac{1}{n_{\mathbf{k}}} - \frac{2}{n_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}} \right) \quad (96)$$

Поскольку это выражение симметрично относительно замены $\mathbf{q} \leftrightarrow \mathbf{k} - \mathbf{q}$, то

$$\left(\frac{1}{n_{\mathbf{k}}} - \frac{2}{n_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}} \right) \rightarrow \left(\frac{1}{n_{\mathbf{k}}} - \frac{1}{n_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}} - \frac{1}{n_{\mathbf{q}}} \right) = \frac{n_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} n_{\mathbf{q}} - n_{\mathbf{k}} (n_{\mathbf{q}} + n_{\mathbf{k}-\mathbf{q}})}{n_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} n_{\mathbf{q}}} \quad (97)$$

Таким образом,

$$\frac{dS}{dt} = \frac{\pi}{V} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} |V_{\mathbf{k}, \mathbf{q}, \mathbf{k}-\mathbf{q}}|^2 \delta(\omega_{\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{q}} - \omega_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}) \frac{[n_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} n_{\mathbf{q}} - n_{\mathbf{k}} (n_{\mathbf{q}} + n_{\mathbf{k}-\mathbf{q}})]^2}{n_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} n_{\mathbf{q}}} \geq 0 \quad (98)$$

Найдем равновесное число волн при температуре T из условия максимальности энтропии S . При трехволновом взаимодействии полная энергия $E = \sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} = \text{Const}$, поскольку она сохраняется

в каждом элементарном акте взаимодействия. Условие максимальности энтропии при постоянном значении энергии имеет вид

$$\frac{\delta(S - \lambda E)}{\delta n_{\mathbf{k}}} = \frac{\delta}{\delta n_{\mathbf{k}}} \sum_{\mathbf{k}} \left(\ln \frac{(n_{\mathbf{k}} + 1)}{n_{\mathbf{k}}} - \lambda \omega_{\mathbf{k}} \right) \delta n_{\mathbf{k}} = 0, \quad (99)$$

откуда

$$n_{\mathbf{k}}^0 = \frac{1}{e^{\omega_{\mathbf{k}}/T} - 1}, \quad (100)$$

где мы положили $\lambda = T$, чтобы совпадало с равновесным бозераспределением при температуре T . В пределе $T \gg \omega_{\mathbf{k}}$ получаем

$$n_{\mathbf{k}}^0 = \frac{T}{\omega_{\mathbf{k}}} \quad (101)$$

- распределение Джинса.

20.3.2 3.2. Sound Attenuation

Theory

В качестве примера использования кинетического уравнения рассмотрим задачу вычисления декремента затухания звуковой волны.

Для звуковой волны с частотой $\omega_{\mathbf{k}} \ll T$ основной вклад в затухание дадут процессы слияния, поскольку для них больше фазовый объем, т. е. кинетическое уравнение записываем в виде

$$\frac{dn_{\mathbf{k}}}{dt} = -\frac{2\pi}{V} \sum_{\mathbf{q}} |V_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \mathbf{k}, \mathbf{q}}|^2 \delta(\omega_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \omega_{\mathbf{q}} - \omega_{\mathbf{k}}) [n_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{q}} - n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} (n_{\mathbf{q}} + n_{\mathbf{k}})] \quad (102)$$

Для $n_{\mathbf{k}} \gg n_{\mathbf{q}}^0 = T/\omega_{\mathbf{q}}$, $n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^0 = T/\omega_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}$ кинетическое уравнение имеет решение вида $n_{\mathbf{k}}(t) = n_{\mathbf{k}}(0) \exp[-2\gamma_{\mathbf{k}} t]$. Переходя от суммирования к интегрированию, получим выражение для декремента затухания:

$$\gamma_{\mathbf{k}} = \pi \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} |V_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \mathbf{k}, \mathbf{q}}|^2 \frac{T \omega_{\mathbf{k}}}{\omega_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \omega_{\mathbf{q}}} \delta(\omega_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \omega_{\mathbf{q}} - \omega_{\mathbf{k}}) \quad (103)$$

где матричный элемент для звуковой волны имеет вид

$$V_{\mathbf{k}+\mathbf{q};\mathbf{k},\mathbf{q}} = \sqrt{\frac{c_s}{8\rho_0}} |\mathbf{k} + \mathbf{q}| k q (3g + \cos \theta_{\mathbf{k},\mathbf{q}} + \cos \theta_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{q}} + \cos \theta_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{k}}) \quad (104)$$

Из закона дисперсии $\omega_{\mathbf{k}} = c_s k$ и закона сохранения $\omega_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} = \omega_{\mathbf{q}} + \omega_{\mathbf{k}}$ получаем $|\mathbf{k} + \mathbf{q}| = k + q$. Возводя в квадрат это выражение, имеем $k^2 + 2kq \cos \theta_{\mathbf{k},\mathbf{q}} + q^2 = k^2 + 2kq + q^2$, откуда $\theta_{\mathbf{k},\mathbf{q}} = 0$. Таким образом, квадрат матричного элемента равен

$$|V_{\mathbf{k}+\mathbf{q};\mathbf{k},\mathbf{q}}|^2 = \frac{c_s}{8\rho_0} 9(g+1)^2 k q (k+q) \quad (105)$$

Дельта-функцию перепишем как

$$\delta(\omega_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \omega_{\mathbf{q}} - \omega_{\mathbf{k}}) = \frac{(k+q)}{c_s k q} \delta(1 - \cos \theta) \quad (106)$$

Получаем

$$\gamma_{\mathbf{k}} = 2\pi^2 \int d\mu \delta(1 - \mu) \int \frac{q^2 dq}{(2\pi)^3} \frac{(k+q)}{c_s k q} \frac{c_s}{8\rho_0} 9(g+1)^2 k q (k+q) \frac{T c_s k}{c_s (k+q) c_s q} \quad (107)$$

где $\mu = \cos \theta$. Интегрирование по модулю вектора $\mathbf{q}$ следует ограничить значением $q_{\max} = T/c_s$, поскольку при $q > q_{\max}$ число волн $n_{\mathbf{q}}$ убывает экспоненциально. Тогда получим

$$\gamma_{\mathbf{k}} = \frac{9(g+1)^2 T k}{32\pi \rho_0 c_s} \int_0^{T/c_s} q(k+q) dq = \frac{3(g+1)^2 T^4 k}{32\pi \rho_0 c_s^4} \quad (108)$$

20.4 4. Fluxes and Kolmogorov Spectra by Kolokolov

20.4.1 4.1. Stationary Solution of the Kinetic Equation

Theory

Запишем кинетическое уравнение для трехволнового взаимодействия в симметричном виде:

$$\frac{\partial}{\partial t} n_{\mathbf{k}} = I[n_{\mathbf{k}}] \equiv \pi \int \frac{d\mathbf{k}_1 d\mathbf{k}_2}{(2\pi)^d} (R_{\mathbf{k},\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2} - R_{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}\mathbf{k}_2} - R_{\mathbf{k}_2,\mathbf{k}\mathbf{k}_1}) \quad (109)$$

где

$$R_{\mathbf{k},\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2} = |V_{\mathbf{k},\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2}|^2 [n_1 n_2 - n_{\mathbf{k}} (n_1 + n_2)] \delta(\omega_{\mathbf{k}} - \omega_1 - \omega_2) \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2),$$

а $V_{\mathbf{k},\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2}$ - матричный элемент трехволнового взаимодействия.

Для теплового равновесного спектра $n_{\mathbf{k}}^0 = T/\omega_{\mathbf{k}}$ в интеграле столкновений $I[n_{\mathbf{k}}]$ зануляется каждый R -член, поскольку

$$\begin{aligned} R_{\mathbf{k},\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2} &\sim \left[\frac{1}{\omega_1 \omega_2} - \frac{\omega_1 + \omega_2}{\omega_{\mathbf{k}} \omega_1 \omega_2} \right] \delta(\omega_{\mathbf{k}} - \omega_1 - \omega_2) \sim \\ &\sim (\omega_{\mathbf{k}} - \omega_1 - \omega_2) \delta(\omega_{\mathbf{k}} - \omega_1 - \omega_2) \end{aligned} \quad (111)$$

Оказывается возможным существование сильно неравновесных стационарных решений кинетического уравнения с потоком энергии по спектру. Такая ситуация реализуется, если в систему накачивается энергия в области малых волновых чисел, а диссипация происходит в области больших волновых чисел. Тогда в промежуточной области k происходит передача энергии по спектру и кинетическое уравнение имеет

решение вида $n_{\mathbf{k}} \sim k^{-b}$, где b — некоторое число. Такие стационарные решения называются колмогоровскими спектрами, по аналогии со спектром сильно развитой гидродинамической турбулентности. Этому стационарному решению соответствует обращение в ноль всей скобки $(R_{\mathbf{k},\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2} - R_{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}\mathbf{k}_2} - R_{\mathbf{k}_2,\mathbf{k}\mathbf{k}_1})$, а не каждого отдельного R -члена.

Чтобы найти это решение, удобно представить выражение $R_{\mathbf{k}_2,\mathbf{k}\mathbf{k}_1}$ в максимально близком виде к $R_{\mathbf{k},\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2}$, что можно сделать с помощью преобразования, показанном на рис. 5.

Переобозначим вектора $\mathbf{k}_2 \rightarrow \mathbf{q}_2, \mathbf{k}_1 \rightarrow \mathbf{q}_1$. Повернем треугольник, образованный векторами $\mathbf{k}, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_1$, так, чтобы вектор $\mathbf{q}_2$ стал параллелен вектору $\mathbf{k}$, т. е. $\mathbf{q}_2 = \hat{g}\mathbf{q}'_2$, где через $\hat{g}$ мы обозначили операцию поворота. Далее сожмем весь треугольник в λ_1 раз, так, чтобы вектор $\mathbf{q}'_2$ совпал с вектором $\mathbf{k}$, т. е. $\mathbf{q}_2 = (\lambda_1\hat{g})\mathbf{k}$. При этом другие вектора преобразуются следующим образом: $\mathbf{q}_1 = (\lambda_1\hat{g})\mathbf{k}_2, \mathbf{k} = (\lambda_1\hat{g})\mathbf{k}_1$. Откуда мы получим, что $\mathbf{q}_2 = (\lambda_1\hat{g})^2\mathbf{k}_1$, т. е. $\lambda_1 = k/k_1$.

Интеграл столкновений $I[n_{\mathbf{k}}]$ инвариантен относительно общего поворота системы координат, так что осталось выяснить, как

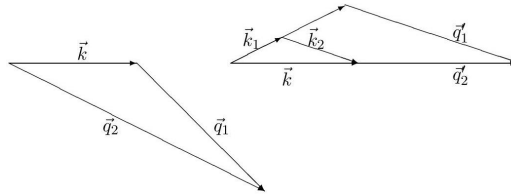


Рис. 5. Построение Каца - Конторовича. Треугольник, образованный векторами $\mathbf{k}, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_1$, поворачивается так, чтобы вектор $\mathbf{q}_2$ стал параллелен вектору $\mathbf{k}$. Полученный треугольник сжимается в λ_1 раз, так, чтобы вектор $\mathbf{q}'_2$ совпал с вектором $\mathbf{k}$

меняются входящие в интеграл столкновений величины при сжатии. Для однородной изотропной среды во многих случаях закон дисперсии имеет вид $\omega_{\mathbf{k}} \sim k^a$, а матричный элемент при масштабном преобразовании ведет себя как

$$V_{\lambda\mathbf{k},\lambda\mathbf{k}_1,\lambda\mathbf{k}_2} = \lambda^m V_{\mathbf{k},\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2}. \quad (112)$$

Тогда

$$V_{\mathbf{q}_2;\mathbf{k},\mathbf{q}_1} = V_{\lambda_1\hat{g}\mathbf{k};\lambda_1\hat{g}\mathbf{k}_1,\lambda_1\hat{g}\mathbf{k}_2} = \lambda_1^m V_{\mathbf{k};\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2} \quad (113)$$

$$d\mathbf{q}_2 = \lambda_1^{2d} d\mathbf{k}_1, d\mathbf{q}_1 = \lambda_1^d d\mathbf{k}_2, \quad \delta(\mathbf{q}_2 - \mathbf{k} - \mathbf{q}_1) = \lambda_1^{-d} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \quad (114)$$

$$\delta(\omega_{\mathbf{q}_2} - \omega_{\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{q}_1}) = \lambda_1^{-a} \delta(\omega_{\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{k}_1} - \omega_{\mathbf{k}_2}) \quad (114)$$

$$[n_{\mathbf{q}_1} n_{\mathbf{k}} - n_{\mathbf{q}_2} (n_{\mathbf{q}_1} + n_{\mathbf{k}})] = \lambda_1^{-2b} [n_{\mathbf{k}_1} n_{\mathbf{k}_2} - n_{\mathbf{k}} (n_{\mathbf{k}_1} + n_{\mathbf{k}_2})] \quad (116)$$

В итоге получаем

$$\int \frac{d\mathbf{q}_1 d\mathbf{q}_2}{(2\pi)^d} R_{\mathbf{q}_2;\mathbf{k},\mathbf{q}_1} = \lambda_1^{3d+2m-2b-d-a} \int \frac{d\mathbf{k}_1 d\mathbf{k}_2}{(2\pi)^d} R_{\mathbf{k};\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2}. \quad (117)$$

Записывая аналогично последний R -член, интеграл столкновений можно теперь переписать в виде

$$I[n_{\mathbf{k}}] = \int \frac{d\mathbf{k}_1 d\mathbf{k}_2}{(2\pi)^d} R_{\mathbf{k};\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2} (1 - \lambda_1^\gamma - \lambda_2^\gamma) \quad (118)$$

где $\gamma = 2d + 2m - 2b - a$, $\lambda_2 = k/k_2$. Видно, что стационарное решение кинетического уравнения возможно, если

$$(1 - \lambda_1^\gamma - \lambda_2^\gamma) = 1 - \left(\frac{\omega}{\omega_1}\right)^\nu - \left(\frac{\omega}{\omega_2}\right)^\nu = 0, \quad (119)$$

где

$$\lambda_1 = \frac{k}{k_1} = \left(\frac{\omega}{\omega_1}\right)^{1/a}, \quad \lambda_2 = \frac{k}{k_2} = \left(\frac{\omega}{\omega_2}\right)^{1/a}, \quad \nu = \frac{2(d + m - b) - a}{a}. \quad (120)$$

Равенство (119) выполняется, если $\nu = -1$, откуда следует, что $b = d + m$.

Кинетическое уравнение сохраняет полную энергию E :

$$\frac{dE}{dt} = \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^d} \omega_{\mathbf{k}} \dot{n}_{\mathbf{k}} = \pi \int \frac{d\mathbf{k} d\mathbf{k}_1 d\mathbf{k}_2}{(2\pi)^{2d}} \omega_{\mathbf{k}} (R_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} - R_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k} \mathbf{k}_2} - R_{\mathbf{k}_2, \mathbf{k} \mathbf{k}_1}). \quad (121)$$

После переобозначения переменных интегрирования во втором ($\mathbf{k} \leftrightarrow \mathbf{k}_1$) и третьем ($\mathbf{k} \leftrightarrow \mathbf{k}_2$) R -членах, получим, что

$$\frac{dE}{dt} = \pi \int \frac{d\mathbf{k} d\mathbf{k}_1 d\mathbf{k}_2}{(2\pi)^{2d}} (\omega_k - \omega_1 - \omega_2) R_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} = 0, \quad (122)$$

поскольку R -член содержит $\delta(\omega_k - \omega_1 - \omega_2)$.

Локальное условие сохранения энергии запишем в виде

$$\frac{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}}{\partial t} = -\text{div}_{\mathbf{k}} \mathbf{p}_{\mathbf{k}}, \quad (123)$$

где $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ - плотность энергии, а $\mathbf{p}_{\mathbf{k}}$ - плотность потока энергии. Для изотропной системы $\mathbf{p}_{\mathbf{k}} \parallel \mathbf{k}$, так что для двумерной системы $d = 2$ получим

$$\text{div}_{\mathbf{k}} \mathbf{p}_{\mathbf{k}} = \frac{1}{k} \frac{\partial}{\partial k} (k p_{\mathbf{k}}) \rightarrow p_{\mathbf{k}} = -\frac{1}{k} \int_0^k \omega_{\mathbf{q}} \dot{n}_{\mathbf{q}} q dq, \quad (124)$$

а полный поток энергии в пространстве волновых векторов $P = S_d p_{\mathbf{k}}$ равен

$$P_{d=2} = -2\pi \int_0^k \omega_{\mathbf{q}} I_{\mathbf{q}} q dq \quad (125)$$

где $S_2 = 2\pi k$ - периметр. Для трехмерной системы аналогично находим ($S_3 = 4\pi k^2$):

$$P_{d=3} = -4\pi \int_0^k \omega_{\mathbf{q}} I_{\mathbf{q}} q^2 dq \quad (126)$$

Поскольку колмогоровский спектр обращает в ноль интеграл столкновений, то можно было бы подумать, что и поток энергии $P = 0$. Рассмотрим простой пример, показывающий, что это не так.

Пусть в начале координат есть точечный источник, испускающий $4\pi q$ частиц в единицу времени. Частицы, сталкиваясь с атомами среды, диффундируют. Интеграл столкновений, как мы увидим позже, сводится к $D\Delta n(\mathbf{r})$, где $n(\mathbf{r})$ - плотность числа частиц, т. е. изменение плотности числа частиц описывается уравнением диффузии с источником

$$\frac{\partial n(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = D\Delta n(\mathbf{r}, t) + 4\pi q \delta(\mathbf{r}) \quad (127)$$

Это уравнение имеет стационарное решение $n(\mathbf{r}) = q/(Dr)$. Плотность потока частиц $\mathbf{j} = -D\nabla n$, тогда $\text{div } \mathbf{j} = -D\Delta n$, и для сферически симметричного источника

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 j_r) = -D \Delta n(\mathbf{r}, t) \quad (128)$$

Интегрируя это уравнение и умножая на площадь, найдем поток числа частиц

$$J_r = -4\pi \int_0^r r'^2 D \Delta n(\mathbf{r}') dr' \quad (129)$$

Если в это выражение подставить известное стационарное решение $n(\mathbf{r}) = q/(Dr)$, то получим интеграл от функции, сосредоточенной

в нуле. Как именно ведет себя вблизи нуля функция, описывающая источник, неважно. Основной характеристикой источника является поток частиц - главное отличие нестационарного решения от равновесного. Поток на удаленных от источника расстояниях r определяется функцией $n(\mathbf{r})$ на этих же расстояниях. Чтобы его вычислить, используем регуляризацию $n(\mathbf{r}) = q/(Dr^{1-s})$, где $s \rightarrow +0$. Тогда получим

$$\begin{aligned} J_r &= -4\pi \int_0^r r'^2 D \frac{1}{r'^2} \frac{\partial}{\partial r'} \left(r'^2 \frac{\partial}{\partial r'} \frac{q r'^{s-1}}{D} \right) dr' = \\ &= -4\pi q (s-1) (r^s)_{s \rightarrow +0} = 4\pi q \end{aligned} \quad (130)$$

Этот же прием можно использовать и для вычисления плотности потока энергии по спектру для колмогоровских стационарных решений кинетического уравнения.

В качестве примера рассмотрим звуковые волны в трехмерном пространстве. В этом случае $d = 3, \omega = c_s k, V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} \sim (k k_1 k_2 c_s / \rho_0)^{1/2}$, так что имеется стационарное решение $n = a k^b$, где $b = d + m = 3 + 3/2 = 9/2$. Найдем поток энергии, слегка "испортив" решение $n = A k^{s-9/2}$, с последующим взятием предела $s \rightarrow 0$. Теперь интеграл столкновений не обращается в ноль, поскольку

$$\begin{aligned} 1 - \left(\frac{\omega}{\omega_1} \right)^\nu - \left(\frac{\omega}{\omega_2} \right)^\nu &= 1 - \left(\frac{\omega}{\omega_1} \right)^{1-2s/a} - \left(\frac{\omega}{\omega_2} \right)^{1-2s/a} \approx \\ &\approx 1 - \frac{\omega_1}{\omega} - \frac{\omega_2}{\omega} + s \frac{2}{a} \left(\frac{\omega_1}{\omega} \ln \frac{\omega_1}{\omega} + \frac{\omega_2}{\omega} \ln \frac{\omega_2}{\omega} \right). \end{aligned} \quad (131)$$

Оцениваем интеграл столкновений с точностью до численных множителей:

$$\begin{aligned} \int d\mathbf{k}_2 \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) &= 1, \quad \int d\mathbf{k}_1 \sim k^3, \quad |V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2}|^2 \sim \frac{k^3 c_s}{\rho_0} \\ [n_1 n_2 - n_k (n_1 + n_2)] &\sim \frac{A^2}{k^{9-2s}}, \quad \delta(\omega_k - \omega_1 - \omega_2) \sim \frac{1}{c_s k} \end{aligned} \quad (132)$$

$$(133)$$

Таким образом,

$$I[n_{\mathbf{k}}] \sim k^3 \frac{c_s}{\rho_0} k^3 \frac{A^2}{k^{9-2s}} \frac{1}{c_s k} s = s \frac{A^2}{\rho_0} k^{-4+2s}. \quad (134)$$

Поток энергии равен

$$P(q) \sim \int_0^q k^2 c_s k s \frac{A^2}{\rho_0} k^{-4+2s} dk \Big|_{s \rightarrow 0} \sim \frac{c_s A^2}{\rho_0} = \text{Const.} \quad (135)$$

Значит, константу A в стационарном колмогоровском решении кинетического уравнения можно представить в виде

$$A = \alpha \left(\frac{P\rho_0}{c_s} \right)^{1/2} \quad (136)$$

где α - численный множитель порядка единицы.

20.4.2 4.2. Crosslinking with Pumping

Theory

Если учесть, что в области малых значений k_0 волновых векторов имеется источник энергии, приводящий к экспоненциальному росту волн с инкрементом $\Gamma(k) = \Gamma$ при $k = k_0$ и $\Gamma(k) = 0$ для $k > k_0$, то кинетическое уравнение следует записать в виде

$$\frac{\partial n_{\mathbf{k}}}{\partial t} = n_{\mathbf{k}}\Gamma(k) + I[n_{\mathbf{k}}] \quad (137)$$

В области $(0, k_0)$ интеграл столкновений $I[n_{\mathbf{k}}]$ балансируется накачкой $n_{\mathbf{k}}\Gamma(k)$. Тогда поток энергии, поставляемый накачкой, есть

$$P(q) \sim \int_0^{k_0} dq q^2 \omega_q \Gamma(q) n_q \sim c_s k_0 \Gamma(k_0) n_{k_0} k_0^3 \sim c_s \Gamma(k_0) A k_0^{-1/2} \quad (138)$$

Подставляя $A \sim (P\rho_0/c_s)^{1/2}$, получим

$$P(q) \sim \frac{c_s \rho_0 \Gamma^2(k_0)}{k_0} \sim \frac{c_s^2 \rho_0 \Gamma^2(k_0)}{\omega_0}. \quad (139)$$

20.4.3 4.3. Convergence of the Collision Integral

Theory

Важным пунктом для всей качественной картины каскадной перекачки энергии по спектру от маленьких значений волновых векторов, где происходит накачка, к большим значениям волновых векторов, где имеется диссипация, является сходимость интеграла столкновений. Иначе говоря, если интеграл столкновений набирает свое значение в промежуточной области волновых векторов, то действительно выполняется условие локальности передачи энергии по спектру, если же значение интеграла набирается на границах интервала, то каскадной перекачки энергии по спектру нет. В этом смысле степенное стационарное решение является подозрительным и сходимость интеграла столкновений требует проверки.

Запишем кинетическое уравнение для трехволнового взаимодействия в виде

$$\frac{\partial}{\partial t} n_{\mathbf{k}} = I[n_{\mathbf{k}}] \equiv \pi \int \frac{d\mathbf{k}_1 d\mathbf{k}_2}{(2\pi)^3} (R_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} - 2R_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k} \mathbf{k}_2}) \quad (140)$$

где

$$R_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} = |V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2}|^2 [n_1 n_2 - n_{\mathbf{k}} (n_1 + n_2)] \delta(\omega_{\mathbf{k}} - \omega_1 - \omega_2) \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2),$$

а $V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2}$ - матричный элемент трехволнового взаимодействия, и проинтегрируем по $\mathbf{k}_2$.

Исследуем сходимость интеграла столкновений для звуковых волн для стационарного решения вида $n_{\mathbf{k}} = A k^{s-9/2}$.

1. Рассмотрим сначала область малых значений волновых векторов, $k_1 \rightarrow 0$ (такой же вклад дает область $k_2 \rightarrow 0$). Для $R_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2}$ при $k_1 \rightarrow 0$

$$[n_1 n_2 - n_k (n_1 + n_2)] \approx n_1 (n_{\mathbf{k}-\mathbf{k}_1} - n_{\mathbf{k}}) \quad (142)$$

поскольку $n_1 \sim 1/k_1^{9/2} \gg n_2 \sim 1/k_2^{9/2}$ при $k_1 \rightarrow 0$.

Для $R_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}\mathbf{k}_2}$ расходимость возможна при $k_2 \rightarrow 0$, так что

$$[n_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}_2} - n_{\mathbf{k}_1} (n_{\mathbf{k}} + n_{\mathbf{k}_2})] \approx n_2 (n_{\mathbf{k}} - n_{\mathbf{k}+\mathbf{k}_2}) \quad (143)$$

Таким образом, получаем:

$$\begin{aligned} I[n_{\mathbf{k}}] &= 2\pi \int \frac{d\mathbf{k}_1}{(2\pi)^3} |V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2}|^2 n_1 (n_{\mathbf{k}-\mathbf{k}_1} - n_{\mathbf{k}}) \delta(\omega_k - \omega_1 - \omega_2) - \\ &- 2\pi \int \frac{d\mathbf{k}_1}{(2\pi)^3} |V_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}\mathbf{k}_2}|^2 n_2 (n_{\mathbf{k}} - n_{\mathbf{k}+\mathbf{k}_2}) \delta(\omega_1 - \omega_k - \omega_2) \end{aligned} \quad (144)$$

Для малых значений k_1

$$|\mathbf{k} - \mathbf{k}_1| \approx k - k_1 \cos \theta \rightarrow \delta(\omega_1 - \omega_k - \omega_2) = \frac{1}{c_s k_1} \delta(1 - \cos \theta) \quad (145)$$

Учитывая $|V|^2 \sim k_1 k_2 k$, получаем, что при $k_1 \rightarrow 0$ в интеграле столкновений члены нулевого и первого порядка по k_1 сокращаются. Тогда для интеграла столкновений $I[n_{\mathbf{k}}]$ имеем оценку

$$\begin{aligned} 2\pi \int \frac{d\mathbf{k}_1}{(2\pi)^3} n_1 k_1^2 \frac{d^2 (|V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2}|^2 n_{\mathbf{k}})}{dk^2} \frac{1}{c_s k_1} \delta(1 - \cos \theta) &\sim \\ \sim k_{\min}^3 |V|^2 n_1 k_{\min}^2 \frac{1}{k_{\min}} &\sim n_1 k_{\min}^4 |V|^2 \end{aligned} \quad (146)$$

Подставляя $|V|^2 \sim k_{\min}$, $n_1 \sim k_{\min}^{s-9/2}$, получим $I[n_{\mathbf{k}}] \sim k_{\min}^{s+1/2}$, т. е. интеграл столкновений сходится для $s > -1/2$.

2. Большие значения, $k_1 \rightarrow \infty$.

Поскольку значение k фиксировано, то член $R_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2}$ вкладывает в возможную расходимость не дает. Рассмотрим член $R_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}\mathbf{k}_2}$. При $k_1 \rightarrow \infty$ и фиксированном k получаем, что $k_2 \approx k_1$ и, следовательно, $n_{\mathbf{k}} \gg n_{\mathbf{k}_1}, n_{\mathbf{k}_2}$. Тогда

$$[n_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}_2} - n_{\mathbf{k}_1} (n_{\mathbf{k}} + n_{\mathbf{k}_2})] \approx n_{\mathbf{k}} (n_{\mathbf{k}_1-\mathbf{k}} - n_{\mathbf{k}_1}) \approx -n_{\mathbf{k}} \mathbf{k} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}_1} n_{\mathbf{k}_1} \approx n_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}_1} \frac{k}{k_1}.$$

Кроме того, $|V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2}|^2 \sim k k_1 k_2 \approx k k_1^2$. Отметим также, что $\delta(\omega_1 - \omega_k - \omega_2)$ не зависит от k_1 , так как $k_1 - k - |\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}| \approx k_1 - k - k_1 + k \cos \theta$. Тогда мы получаем оценку для интеграла столкновений при значениях $k_1 \rightarrow \infty$:

$$I[n_{\mathbf{k}}] \sim k_1^3 |V|^2 n_1 \frac{k}{k_1} \sim k_1^{s-1/2} \quad (148)$$

Таким образом, исследование интеграла столкновений показало, что область сходимости заключена в интервале $-1/2 < s < 1/2$, и, следовательно, имеет место локальная передача энергии по спектру.

20.5 5. The Kolmogorov Spectrum in Hydrodynamic Turbulence by Kolokolov

Рассмотрим стационарное решение в гидродинамической сильно развитой турбулентности при наличии накачки энергии в области малых значений волновых

векторов $k < 1/L$ и диссипации энергии в области больших значений волновых векторов $k > k_{dis}$. Нас будет интересовать область $1/L \ll k \ll k_{dis}$, так называемый инерционный интервал, где по гипотезам Колмогорова корреляторы скорости не зависят от k_{dis} (гипотеза № 1) и L (гипотеза № 2).

Большая часть теории сильно развитой турбулентности носит качественный характер, мы же рассмотрим один строгий результат, полученный Колмогоровым.

Параметры L и k_{dis} определяют детали пространственной структуры поля скорости и накачки на больших и малых расстояниях. Если от них ничего не зависит в инерционном интервале, то турбулентное состояние задается некой интегральной характеристикой. Этой характеристикой является энергия, диссипируемая в единице объема в единицу времени. Чтобы определить характеристики турбулентного движения в инерционном интервале, рассмотрим уравнение Навье - Стокса с накачкой. Какими-то хаотическими внешними силами возбуждаем движение жидкости и изучаем эти движения на масштабах, меньших, чем масштаб этих внешних сил. Тогда последние можно включить в уравнение движения

$$\partial_t \mathbf{v} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} = \nu \Delta \mathbf{v} - \nabla P + \mathbf{f}(\mathbf{x}, t) \quad (149)$$

где мы рассматриваем несжимаемую жидкость, $\text{div } \mathbf{v} = 0$, и положили $\rho = 1$, а $\mathbf{f}(\mathbf{x}, t)$ - случайное бездивергентное поле с гауссовой статистикой. На самом деле для наших целей детальная форма

накачки $\mathbf{f}(\mathbf{x}, t)$ неважна, а существенно лишь то, что ее фурьекомпоненты отличны от нуля лишь в области $k < 1/L$.

Турбулентное стационарное состояние возникает как баланс накачиваемой и диссипируемой энергии. Полная энергия жидкости $E = \frac{1}{2} \int v^2 d\mathbf{x}$. Тогда, используя уравнение Навье - Стокса, получим

$$\partial_t E = - \int \mathbf{v}(\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} d\mathbf{x} - \int \mathbf{v} \cdot \nabla P d\mathbf{x} + \nu \int \mathbf{v} \Delta \mathbf{v} d\mathbf{x} + \int \mathbf{v} \cdot \mathbf{f}(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x}.$$

Рассмотрим по отдельности каждый из вкладов в скорость изменения энергии. Первый член

$$\begin{aligned} \int \mathbf{v}(\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} d\mathbf{x} &= \int v_i v_j \partial_j v_i d\mathbf{x} = \\ &= \frac{1}{2} \int v_j \partial_j v^2 d\mathbf{x} = \frac{1}{2} \int \partial_j (v_j v^2) d\mathbf{x} - \frac{1}{2} \int v^2 \partial_j v_j d\mathbf{x} = 0 \end{aligned} \quad (151)$$

где первый интеграл преобразуется в поверхностный и равен нулю, а второй равен нулю из условия несжимаемости.

Второй член есть

$$\int \mathbf{v} \cdot \nabla P d\mathbf{x} = \int \nabla \cdot (\mathbf{v} P) d\mathbf{x} - \int P \nabla \cdot \mathbf{v} d\mathbf{x} = 0 \quad (152)$$

Третий член

$$\begin{aligned} \nu \int \mathbf{v} \Delta \mathbf{v} d\mathbf{x} &= \nu \int v_i \partial_j \partial_j v_i d\mathbf{x} = \nu \int v_i \partial_j (\partial_j v_i + \partial_i v_j) d\mathbf{x} = \\ &= \nu \int \partial_j \left[v_i (\partial_j v_i + \partial_i v_j) \right] d\mathbf{x} - \nu \int (\partial_j v_i) (\partial_j v_i + \partial_i v_j) d\mathbf{x} = \\ &= -\frac{\nu}{2} \int (\partial_j v_i + \partial_i v_j)^2 d\mathbf{x} \end{aligned} \quad (153)$$

Член с накачкой дает, после перехода к фурье-компонентам,

$$\int \mathbf{v} \cdot \mathbf{f}(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x} \equiv V \langle \mathbf{f} \cdot \mathbf{v} \rangle = \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{f}_{-\mathbf{k}} \cdot \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \quad (154)$$

Здесь важно, что фурье-компоненты $\mathbf{f}_{\mathbf{k}}$ отличны от нуля только для $k < 1/L$.

Таким образом, уравнение баланса накачиваемой и диссипируемой энергии имеет вид

$$\varepsilon \equiv \frac{\nu}{2} (\partial_j v_i + \partial_i v_j)^2 = \langle \mathbf{f} \cdot \mathbf{v} \rangle. \quad (155)$$

По гипотезе Колмогорова ε является единственной величиной, определяющей корреляции в инерционном интервале. Переходя к фурье-компонентам скорости

$$\mathbf{v}_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{V}} \int d\mathbf{r}(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}, \quad \mathbf{v}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{v}_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \quad (156)$$

где V - объем системы, получим выражение для энергии

$$E = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} |\mathbf{v}_{\mathbf{k}}|^2 = V \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} |\mathbf{v}_{\mathbf{k}}|^2. \quad (157)$$

Зависимость $\langle |\mathbf{v}_{\mathbf{k}}|^2 \rangle$ от k можно написать по размерности. Обозначая T - время, l - длину, d - размерность пространства, имеем

$$[v] = \frac{l}{T}, \quad [\nu] = \frac{l^2}{T}, \quad [v_k] = l^{d/2} [v] = \frac{l^{1+d/2}}{T}, \quad [\varepsilon] = \frac{l^2}{T^3}. \quad (158)$$

Приравнявая размерности в соотношении

$$\langle |\mathbf{v}_{\mathbf{k}}|^2 \rangle = C \varepsilon^\alpha k^{-\beta}, \quad (159)$$

из совпадения размерности времени получаем $\alpha = 2/3$, а длины $\beta = d + 2/3$. Таким образом, для трехмерного пространства получаем спектр Колмогорова - Обухова:

$$\langle |\mathbf{v}_{\mathbf{k}}|^2 \rangle = C \varepsilon^{2/3} k^{-11/3}, \quad (160)$$

где C - безразмерная константа. Этот спектр заканчивается там, где начинает играть роль диссипация. Предельное значение k_{dis} можно оценить из условия

$$\begin{aligned} \varepsilon &= \frac{\nu}{2} \langle (\partial_i \mathbf{v})^2 \rangle = \frac{\nu}{2} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} k^2 |\mathbf{v}_{\mathbf{k}}|^2 \sim \\ &\sim \nu k_{dis}^5 |\mathbf{v}_{\mathbf{k}}|^2 \sim \nu k_{dis}^5 \varepsilon^{2/3} k_{dis}^{-11/3} \rightarrow k_{dis} \sim \varepsilon^{1/4} \nu^{-3/4} \end{aligned} \quad (161)$$

Значения $k < k_{dis}$ не дают вклада в ε . Какие же пространственные средние определяются $v_{\mathbf{k}}$ с k из инерционного интервала? Если взять средний квадрат скорости, то при подстановке спектра Колмогорова - Обухова в

$$\langle \mathbf{v}^2(\mathbf{r}) \rangle = \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} |\mathbf{v}_{\mathbf{k}}|^2 \quad (162)$$

интеграл расходится на нижнем пределе, т. е. среднеквадратичная скорость определяется свойствами накачки - самыми большими масштабами. С другой стороны, для структурной функции

$$\begin{aligned}
S_2(\mathbf{r}) &= \langle (v_i(\mathbf{0}) - v_i(\mathbf{r}))^2 \rangle = \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} |1 - e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}|^2 \langle |\mathbf{v}_{\mathbf{k}}|^2 \rangle = \\
&= 4 \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \sin^2 \frac{\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}{2} \langle |\mathbf{v}_{\mathbf{k}}|^2 \rangle
\end{aligned} \tag{163}$$

область $k < 1/L$ дает малый вклад, и при $r \ll L$ в качестве $\langle |\mathbf{v}_{\mathbf{k}}|^2 \rangle$ можно подставить спектр Колмогорова - Обухова. Получается соотношение

$$S_2(\mathbf{r}) \sim (\varepsilon r)^{2/3} \tag{164}$$

- закон Колмогорова - Обухова - Ричардсона.

20.5.1 5.1. The Kolmogorov Ratio "4/5"

Theory

Приступим к выводу соотношения Колмогорова "4/5". Роль нелинейного члена заключается в переносе по спектру потока энергии. Введем сглаженную скорость

$$\mathbf{u}_{k_0}(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{|\mathbf{k}| < k_0} \mathbf{v}_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \tag{165}$$

с некоторым фиксированным значением k_0 из инерционного интервала $1/L < k_0 < k_{dis}$. Вычисляя

$$\int \mathbf{u}_{k_0}(\mathbf{x}) \partial_t \mathbf{v}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \tag{166}$$

получим для стационарного течения:

$$\begin{aligned}
\int \mathbf{u}_{k_0} \cdot \nabla P d\mathbf{x} &= \sum_{|\mathbf{k}| < k_0} \sum_{\mathbf{k}_1} \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot i\mathbf{k}_1 P_{\mathbf{k}_1} \frac{1}{V} \int e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{k}_1)\cdot\mathbf{x}} d\mathbf{x} = \\
&= \sum_{|\mathbf{k}| < k_0} \sum_{\mathbf{k}_1} \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot i\mathbf{k}_1 P_{\mathbf{k}_1} \Delta(\mathbf{k} + \mathbf{k}_1) = 0
\end{aligned} \tag{167}$$

поскольку из условия несжимаемости $\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$ следует $\mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot i\mathbf{k} = 0$. Вклад от накачки остается таким же, как выше, для $k_0 \gg 1/L$; диссипативный член тоже не меняется, поскольку мы выбрали $k_0 \ll k_{dis}$.

Нелинейный член получим прямым вычислением. Для этого перепишем сглаженную скорость в виде

$$\begin{aligned}
\mathbf{u}_{k_0}(\mathbf{x}) &= \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{|\mathbf{k}| < k_0} \mathbf{v}_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = \frac{1}{V} \sum_{|\mathbf{k}| < k_0} \int d\mathbf{y} \mathbf{v}(\mathbf{y}) e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{y})} = \\
&= \int d\mathbf{r} \int_{k < k_0} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \mathbf{v}(\mathbf{x} + \mathbf{r}) = -\frac{1}{2\pi^2} \int \left(\frac{1}{r} \partial_r \left(\frac{\sin k_0 r}{r} \right) \right) \mathbf{v}(\mathbf{x} + \mathbf{r}) d\mathbf{r}
\end{aligned} \tag{168}$$

Далее преобразуем, используя уравнение непрерывности $\nabla_i v_i = 0$, обращение в ноль поверхностного интеграла и трансляционную инвариантность:

$$\begin{aligned}
\left\langle \int v_i(\mathbf{x} + \mathbf{r}) v_j(\mathbf{x}) \nabla_j v_i(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \right\rangle &= \left\langle \int \nabla_j (\mathbf{v}_i(\mathbf{x} + \mathbf{r}) \mathbf{v}_j(\mathbf{x}) \mathbf{v}_i(\mathbf{x})) d\mathbf{x} \right\rangle - \\
&- \left\langle \int v_j(\mathbf{x}) v_i(\mathbf{x}) \nabla_j v_i(\mathbf{x} + \mathbf{r}) d\mathbf{x} \right\rangle = - \int \langle v_j(\mathbf{0}) v_i(\mathbf{0}) \nabla_j v_i(\mathbf{r}) \rangle d\mathbf{x} \equiv \\
&\equiv V \nabla_j B_{i,ji}
\end{aligned} \tag{169}$$

Таким образом, уравнение баланса принимает вид

$$\frac{1}{2\pi^2} \int d\mathbf{r} \left(\frac{1}{r} \partial_r \left(\frac{\sin k_0 r}{r} \right) \right) \nabla_j B_{i,ji} = \varepsilon \tag{170}$$

Рассмотрим

$$B_{i,jk} \equiv \langle v_i(\mathbf{r}) v_j(\mathbf{0}) v_k(\mathbf{0}) \rangle. \tag{171}$$

Общий вид этого тензора можно представить в виде

$$B_{i,jk} = C(r) n_i \delta_{jk} + D(r) (\delta_{ij} n_k + \delta_{ik} n_j) + F(r) n_i n_j n_k, \tag{172}$$

поскольку он, как истинный тензор, может быть построен только из символов Кронекера и компонент единичного вектора $\mathbf{n} = \mathbf{r}/r$. Нам понадобятся следующие соотношения:

$$\partial_i r = \frac{r_i}{r} = n_i, \quad \partial_i r_j = \partial_j \frac{r_i}{r} = \frac{\delta_{ij}}{r} - \frac{r_i r_j}{r^3} = \frac{1}{r} (\delta_{ij} - n_i n_j). \tag{173}$$

Из условия несжимаемости $\operatorname{div} \mathbf{v} = 0$ следует $\partial_i B_{i,jk} = 0$, т. е.

$$\delta_{ij} \left(C' + \frac{2C}{r} + \frac{2D}{r} \right) + n_i n_j \left(2D' - \frac{2D}{r} + F' + \frac{2F}{r} \right) = 0. \tag{174}$$

Следовательно,

$$C' + \frac{2C}{r} + \frac{2D}{r} = 0, \quad 2D' - \frac{2D}{r} + F' + \frac{2F}{r} = 0. \tag{175}$$

Из первого равенства следует

$$\frac{2D}{r} = - \left(C' + \frac{2C}{r} \right) = - \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 C). \tag{176}$$

Из второго равенства получаем

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 F) + \frac{2}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 D) - \frac{6D}{r} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 F + 2r^2 D + 3r^2 C) = 0, \tag{177}$$

откуда, используя полученную связь функций $D(r)$ и $C(r)$, имеем

$$F = -2D - 3C = C' r - C. \tag{178}$$

В результате мы можем записать

$$B_{i,ji} = C(r) n_j + 4D(r) n_j + F(r) n_j = -n_j [4C(r) + C'(r)],$$

$$\partial_j B_{i,ji} = - \left(r C'' + 7C' + \frac{8C}{r} \right). \tag{179}$$

Подставляя это выражение в уравнение баланса и учитывая независимость ε от k_0 , получим:

$$rC''' + 7C' + \frac{8C}{r} = \text{Const} \rightarrow C = \text{ar.} \quad (180)$$

Тогда

$$rC''' + 7C' + \frac{8C}{r} = 15a, \quad (181)$$

и мы получаем

$$\frac{2}{\pi} \int_0^\infty r dr \partial_r \left(\frac{\sin k_0 r}{r} \right) = 15a = \varepsilon \quad (182)$$

Вычислим:

$$\begin{aligned} S_3(\mathbf{r}) &= \langle (\mathbf{n} \cdot (\mathbf{v}(\mathbf{0}) - \mathbf{v}(\mathbf{r})))^3 \rangle = 6n_i n_j n_k \langle v_i(\mathbf{r}) v_j(\mathbf{0}) v_l(\mathbf{0}) \rangle = \\ &= 6[C(r) + 2D(r) + F(r)] = -\frac{4}{5}\varepsilon r. \end{aligned} \quad (183)$$

Это и есть известное точное выражение для тройного коррелятора скорости, полученное Колмогоровым. При выводе этого соотношения использовалась только несингулярность функции $C(r)$ при $r \rightarrow 0$, и, следовательно, это соотношение не зависит от предположения независимости от масштабов накачки.

20.5.2 5.2. Reverse Cascade of Energy in Two-Dimensional Turbulence

Рассмотрим турбулентность несжимаемой ($\partial_\alpha v_\alpha = 0$) жидкости в двух измерениях. Очевидными физическими приложениями такой модели являются турбулентные состояния мыльных пленок и тонких слоев различных жидкостей. Однако самой важной ситуацией, где двумерная картина служит хорошим приближением, является крупномасштабная атмосферная турбулентность. Действительно, размеры циклонов и антициклонов, как правило, много

больше толщины атмосферы, и скорость ветра существенно меньше скорости звука, что оправдывает несжимаемость. Детальный анализ требует также учета вращения Земли, чем мы заниматься не будем, а рассмотрим идеальную ситуацию.

Оказывается, что свойства двумерной турбулентности качественно отличаются от трехмерного случая. Связано это с тем, что в отсутствие накачки и при пренебрежении диссипацией в двумерном уравнении Навье - Стокса (точнее, при описанных условиях в уравнении Эйлера) возникает дополнительный интеграл движения - интегральный квадрат завихренности, называемый также энстрофией. Завихренность Ω определяется как ротор скорости, в двух измерениях являющийся скалярной величиной:

$$\Omega = \epsilon_{\alpha\beta} \partial_\alpha v_\beta \quad (184)$$

Здесь $\epsilon_{\alpha\beta}$ - абсолютно антисимметричный двумерный тензор, и, как всегда, подразумевается суммирование по повторяющимся индексам.

Выпишем полное уравнение Навье - Стокса (с диссипацией и накачкой) покомпонентно:

$$\partial_t v_\alpha + (\mathbf{v} \cdot \nabla) v_\alpha = \nu \Delta v_\alpha - \partial_\alpha P + f_\alpha(\mathbf{x}, t) \quad (185)$$

и подействуем на обе части оператором $\epsilon_{\beta\alpha}\partial_\beta$. Из двумерного тождества

$$\partial_\alpha v_\beta - \partial_\beta v_\alpha = \epsilon_{\alpha\beta}\Omega$$

и несжимаемости следует соотношение:

$$\epsilon_{\mu\lambda}(\partial_\mu v_\alpha)(\partial_\alpha v_\lambda) = 0$$

Действие оператора $\epsilon_{\beta\alpha}\partial_\beta$, таким образом, приводит к соотношению

$$\partial_t \Omega + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \Omega = \nu \Delta \Omega + \varphi \quad (186)$$

где $\varphi = \epsilon_{\beta\alpha}\partial_\beta f_\alpha(\mathbf{x}, t)$ - эффективная накачка для завихренности Ω .

Рассмотрим сначала масштабы r , меньшие, чем масштаб накачки L , но большие, чем вязкий масштаб $r_\nu \ll L$ (он не совпадает

с колмогоровским масштабом r_d из предыдущего раздела; сейчас важно, что он убывает вместе с вязкостью - точное определение получим ниже). Тогда накачкой и вязкостью в уравнении эволюции завихренности (186) можно пренебречь, и оно вырождается в уравнение переноса:

$$\partial_t \Omega + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \Omega = 0 \quad (187)$$

Это уравнение сохраняет интегралы по пространству от степеней завихренности, в частности, энтрофию H :

$$H = \frac{1}{2} \int d^2 \mathbf{x} \Omega^2 \quad (188)$$

Физически это означает, что флуктуация с характерной (среднеквадратичной) завихренностью $\bar{\omega}$, созданная накачкой, изменяет свою форму, но не амплитуду. Если размер уменьшился до масштаба r (сохранение площади означает, что начальное пятно вытянулось в одном направлении и сжалось в другом до размера r), то сохранение завихренности приводит к тому, что на этом масштабе среднеквадратичная амплитуда флуктуации скорости $\delta \bar{v}(r) \sim r \bar{\omega}$. Но это означает, что энергия флуктуаций уменьшается с их масштабом. Вязкий масштаб r_ν определяется балансом переносного и вязкого членов в уравнении эволюции для завихренности (186): $(\mathbf{v}_\nu \cdot \nabla) \Omega \sim \nu \Delta \Omega$, где $v_\nu \sim r_\nu \bar{\omega}$ - характерная флуктуация скорости на масштабе r_ν , а $\bar{\omega} \sim (\epsilon/L^2)^{1/3}$ - среднеквадратичная завихренность, создаваемая накачкой (ϵ здесь - это энергия, вкачиваемая в систему в единицу времени на единицу массы). В итоге получаем оценку для вязкого масштаба r_ν :

$$r_\nu \sim \sqrt{\nu/\bar{\omega}} \quad (189)$$

Диссипация происходит на вязком масштабе. Энергия, диссипируемая в единицу времени на единицу массы, оценивается, как обычно: $\epsilon_d \sim \nu v_\nu^2/r_\nu^2 \sim \nu \bar{\omega}^2 \ll \epsilon \sim \bar{\omega}^3 L^2$. Последнее неравенство является прямым следствием предположения $r_\nu \ll L$; в противном случае вся вкачиваемая на масштабе L энергия на нем бы и диссипировала и никакой развитой турбулентности не возбуждалось бы.

Таким образом, естественное предположение о прямом (с больших масштабов на малые) каскаде завихренности (более формально, энтрофии) приводит к утверждению, что диссипируется ничтожная часть вкачиваемой в систему энергии. Прямой же каскад энергии, очевидно, противоречит сохранению энтрофии в области применимости уравнения (187). Возникает вопрос - что происходит с энергией? В 1968 году Р. Крайчнан предположил, что для энергии имеет место обратный каскад, а именно в пределе бесконечного размера системы энергия переходит к флуктуациям все больших и

больших масштабов. Если нет дополнительных каналов диссипации, то система будет пребывать в существенно нестационарном состоянии. Стационар наступит, если имеется, например, трение о дно. Уравнение эволюции в этом случае нужно дополнить обычным затуханием:

$$\partial_t v_\alpha + (\mathbf{v} \cdot \nabla) v_\alpha = -\Gamma v_\alpha + \nu \Delta v_\alpha - \partial_\alpha P + f_\alpha(\mathbf{x}, t) \quad (190)$$

Ничтожность вязкой диссипации означает, что в стационарном состоянии, определяемом таким уравнением, среднеквадратичная амплитуда флуктуации скорости дается простым соотношением:

$$\langle v^2 \rangle = \epsilon / \Gamma. \quad (191)$$

Если трение достаточно мало: $\Gamma \ll \bar{\omega}$ (что тоже является условием возбуждения развитой турбулентности), то можно сказать, что система накапливает энергию на временах $1/\Gamma$. Характерный масштаб L_{inv} получившихся стационарных флуктуаций равен произведению характерной скорости из (191) на это время:

$$L_{inv} = \sqrt{\epsilon / \Gamma^3} \gg L \quad (192)$$

Роль инерционного интервала для обратного каскада играют масштабы $L \ll r \ll L_{inv}$. Для таких расстояний также существует точное соотношение между тройным коррелятором поля скорости и потоком энергии в систему ϵ , если выполнено условие пространственной однородности всех средних. Действительно, выбросим сначала в уравнении (190) вязкое слагаемое, поскольку для

наших масштабов оно не играет никакой роли. Далее используем это уравнение эволюции для вычисления $\partial_t (v_\alpha(\mathbf{x} + \mathbf{r}, t) v_\alpha(\mathbf{x}, t))$ и выполним усреднение по статистике накачки. Независимость средних от положения точки $\mathbf{x}$ вместе с несжимаемостью позволяет исключить слагаемые с давлением. Наконец, условие $L \ll r$ означает, что одновременной коррелятор $\langle v_\alpha(\mathbf{x} + \mathbf{r}, t) f_\alpha(\mathbf{x}, t) \rangle = 0$. Далее, энергосодержащие флуктуации поля скорости существенно изменяются на масштабах $\sim L_{inv}$. Поэтому при $r \ll L_{inv}$ корреляции от r не зависят:

$$\langle v_\alpha(\mathbf{x} + \mathbf{r}, t) v_\alpha(\mathbf{x}, t) \rangle = \langle v^2 \rangle = \epsilon / \Gamma.$$

В стационарном состоянии производные по времени от корреляторов равны нулю, и мы приходим к соотношению:

$$\frac{\partial}{\partial r_\mu} \langle v_\alpha(\mathbf{r}, t) v_\alpha(0, t) v_\mu(0, t) \rangle = -\epsilon. \quad (193)$$

Учет изотропии и несжимаемости для тензора

$$B_{\alpha\beta\gamma}(\mathbf{r}) = \langle v_\alpha(\mathbf{r}, t) v_\beta(0, t) v_\gamma(0, t) \rangle$$

выполняется совершенно аналогично тому, как это было сделано в предыдущем параграфе, и вместе с (193) мы приходим к выражению:

$$B_{\alpha\beta\gamma}(\mathbf{r}) = \frac{\epsilon}{4} (r_\alpha \delta_{\beta\gamma} - r_\gamma \delta_{\alpha\beta} - r_\beta \delta_{\alpha\gamma}) \quad (194)$$

Отсюда легко получить значение так называемой структурной функции:

$$\left\langle \left[\frac{r_\alpha}{r} (v_\alpha(\mathbf{0}, t) - v_\alpha(\mathbf{r}, t)) \right]^3 \right\rangle = \frac{3}{2} \epsilon r. \quad (195)$$

Проверка этого соотношения подтвердила справедливость гипотезы обратного каскада энергии.

Теперь предположим, что размер системы R меньше, чем масштаб обратного каскада $L_{inv} : L \ll R \ll L_{inv}$. В этом случае флуктуации достигнут предельного размера раньше, чем остановится перекачка энергии. Недавние численные и натурные эксперименты

показали, что в конце концов из хаотических флуктуаций возникают когерентные вихри, причем средний профиль скорости подчиняется универсальному закону, который, по существу, является обобщением (195) на ситуацию, когда пространственная однородность статистики нарушена границами [17, 19].

20.6 6. Langevin and Fokker-Planck Equations by Kolokolov

20.6.1 6.1. Derivation of the Fokker-Planck Equation

Theory

Во многих задачах характерное время изменения функции распределения существенно превышает характерные времена элементарных процессов. При этом влияние внешней среды (термостата) можно разделить на медленную релаксацию к равновесию и быстрые случайные воздействия - "столкновения" с частицами термостата.

В качестве примера рассмотрим движение относительно большой броуновской частицы в среде, на которую воздействует внешняя сила, описываемая гладким потенциалом (например, поле тяжести) $U(\vec{r})$. Традиционно для описания такой системы используют уравнение Ланжевена:

$$\dot{\vec{p}} = -\gamma\vec{p} - \vec{\nabla}U + \vec{\xi}(t), \quad \dot{\vec{r}} = \frac{\vec{p}}{m}, \quad (196)$$

где γ - постоянная затухания импульса броуновской частицы; для сферической формы $\gamma = 6\pi R\eta/m$ (R - радиус частицы, η - вязкость среды); $\vec{\xi}(t)$ - случайная сила, моделирующая столкновения броуновской частицы с молекулами среды с корреляторами $\langle \vec{\xi}(t) \rangle = 0$, $\langle \vec{\xi}_i(t) \vec{\xi}_j(t') \rangle = D\delta_{ij}\delta(t-t')$. Усреднение ведется по всем возможным реализациям случайной силы.

Выведем теперь уравнение для функции распределения броуновских частиц $f(\vec{r}, \vec{p}, t)$. По определению

$$f(\vec{r}, \vec{p}, t) = \langle \delta(\vec{p} - \vec{p}(t)) \delta(\vec{r} - \vec{r}(t)) \rangle \quad (197)$$

где $\vec{r}(t), \vec{p}(t)$ являются решениями уравнения Ланжевена для некоторой конкретной реализации случайной силы $\vec{\xi}(t)$, а усреднение проводится по всем реализациям $\vec{\xi}(t)$.

Используя интегральное представление дельта-функции

$$\delta(\vec{r} - \vec{r}(t)) = \int \frac{d\vec{\mu}}{(2\pi)^d} e^{i(\vec{r} - \vec{r}(t)) \cdot \vec{\mu}} \quad (198)$$

с учетом уравнений движения получим:

$$\begin{aligned} \partial_t \delta(\vec{r} - \vec{r}(t)) &= - \int \frac{d\vec{\mu}}{(2\pi)^d} i\vec{\mu} \cdot \dot{\vec{r}}(t) e^{i(\vec{r} - \vec{r}(t)) \cdot \vec{\mu}} = \\ &= - \frac{\vec{p}}{m} \int \frac{d\vec{\mu}}{(2\pi)^d} \partial_{\vec{r}} e^{i(\vec{r} - \vec{r}(t)) \cdot \vec{\mu}} = - \frac{\vec{p}}{m} \partial_{\vec{r}} \delta(\vec{r} - \vec{r}(t)) \end{aligned} \quad (199)$$

Аналогично

$$\partial_t \delta(\vec{p} - \vec{p}(t)) = -\partial_{\vec{p}}(\dot{\vec{p}}(t) \delta(\vec{p} - \vec{p}(t))) \quad (200)$$

Тогда, усредняя по шуму, получим:

$$\begin{aligned} \partial_t f(\vec{r}, \vec{p}, t) &= -\frac{\vec{p}}{m} \partial_{\vec{r}} f + \partial_{\vec{p}}(\dot{\vec{p}}(t) \delta(\vec{p} - \vec{p}(t)) \delta(\vec{r} - \vec{r}(t))) = \\ &= -\frac{\vec{p}}{m} \partial_{\vec{r}} f + \partial_{\vec{p}}(\gamma \vec{p} + \vec{\nabla} U) f - \langle \vec{\xi}(t) \delta(\vec{p} - \vec{p}(t)) \delta(\vec{r} - \vec{r}(t)) \rangle \end{aligned} \quad (201)$$

Вклад в среднее в последнем члене дадут только времена, мало отличающиеся от t , поэтому можно решить уравнение Ланжевена в явном виде:

$$\vec{p}(t) = \vec{p}(t - \delta t) + \int_{t-\delta t}^t \vec{\xi}(t') dt' - \delta t(\gamma \vec{p} - \vec{\nabla} U) \quad (202)$$

Отметим, что поскольку

$$\vec{r}(t) = \vec{r}(t - \delta t) + \delta t \frac{\vec{p}(t - \delta t)}{m} + O(\delta t^2) \quad (203)$$

вклад от $\delta(\vec{r} - \vec{r}(t))$ можно не учитывать. Тогда

$$\begin{aligned} \langle \xi_\beta(t) \delta(\vec{p} - \vec{p}(t)) \delta(\vec{r} - \vec{r}(t)) \rangle &= \langle \xi_\beta(t) \delta(\vec{p} - \vec{p}(t - \delta t)) \delta(\vec{r} - \vec{r}(t)) \rangle - \\ &- \left\langle \xi_\beta(t) \int_{t-\delta t}^t \vec{\xi}_\alpha(t') dt' \partial_{p_\alpha} \delta(\vec{p} - \vec{p}(t - \delta t)) \delta(\vec{r} - \vec{r}(t)) \right\rangle = -\frac{D}{2} \frac{\partial f}{\partial p_\beta} \end{aligned} \quad (204)$$

где первое среднее зануляется, поскольку импульс в момент времени $t - \delta t$ и случайная сила в момент времени t некоррелированы. При вычислении второго среднего использовано

$$\left\langle \vec{\xi}_\beta(t) \int_{t-\delta t}^t \vec{\xi}_\alpha(t') dt' \right\rangle = \frac{D}{2} \delta_{\alpha\beta} \quad (205)$$

на основе физического представления дельта-функции как функции с резким максимумом и очень узкой шириной.

Таким образом, мы получили уравнение Фоккера - Планка:

$$\partial_t f(\vec{r}, \vec{p}, t) + \frac{\vec{p}}{m} \partial_{\vec{r}} f - \partial_{\vec{p}}(\gamma \vec{p} + \vec{\nabla} U) f - \frac{1}{2} \partial_{\vec{p}}(D \partial_{\vec{p}} f) = 0. \quad (206)$$

Термодинамически равновесная функция распределения

$$f_0 \sim \exp \left[-\frac{p^2}{2mT} - \frac{U(\vec{r})}{T} \right] \quad (207)$$

должна быть стационарным решением уравнения Фоккера - Планка

$$\left(-\frac{\vec{p} \cdot \vec{\nabla} U}{mT} - 3\gamma + \frac{\gamma p^2}{mT} + \frac{\vec{p} \cdot \vec{\nabla} U}{mT} + \frac{3D}{2mT} - \frac{Dp^2}{2m^2T^2} \right) f_0 = 0. \quad (208)$$

Отсюда следует соотношение $D = 2\gamma mT$ - частный случай флуктуационно-диссипационной теоремы (ФДТ).

Уравнение Фоккера - Планка можно представить в дивергентной форме:

$$\partial_t f = -\partial_{\vec{r}} \vec{j}_r - \partial_{\vec{p}} \vec{j}_p \quad (209)$$

где

$$\vec{j}_r = \frac{\vec{p}f}{m}, \quad \vec{j}_p = -\gamma\vec{p}f - (\vec{\nabla}U)f - \frac{D}{2}\partial_{\vec{p}}f. \quad (210)$$

Если потоки $\vec{j}_r, \vec{j}_p$ достаточно быстро убывают на бесконечности, то полное число частиц сохраняется, что записывается в виде

$$\partial_t \int f d\vec{r} d\vec{p} = 0 \quad (211)$$

Вывод уравнения Фоккера - Планка из уравнения Ланжевена является достаточно общим и может применяться в различных физических задачах, где есть шум.

20.6.2 6.2. The Hydrodynamic Limit of the Fokker Planck Equation

Theory

Предположим, что начальное неравновесное распределение является слабо неоднородным в пространстве (характерная длина L , на которой меняется f , много больше длины свободного пробега λ) и характерное время T изменения f много больше времени затухания $1/\gamma$.

Плотность числа частиц в окрестности точки $\vec{r}$ находится как

$$n(\vec{r}, t) = \int f(\vec{r}, \vec{p}, t) d\vec{p} \quad (212)$$

В уравнении Фоккера - Планка

$$\partial_t f = -\frac{\vec{p}}{m} \partial_{\vec{r}} f + \partial_{\vec{p}}(\gamma\vec{p} + \vec{\nabla}U) + \frac{1}{2} \partial_{\vec{p}}(D\partial_{\vec{p}}f) \quad (213)$$

проинтегрируем по импульсам и получим

$$\partial_t n(\vec{r}, t) = -\frac{\partial}{\partial r_\beta} \int \frac{p_\beta}{m} f d^3p - \int \partial_{\vec{p}} \vec{j}_p d^3p = -\frac{\partial}{\partial r_\beta} J_\beta \quad (214)$$

поскольку последний интеграл равен нулю, в чем легко убедиться интегрированием по частям, и мы ввели обозначение

$$J_\beta = \int \frac{p_\beta}{m} f d^3p \quad (215)$$

Найдем уравнение для J_α , умножая уравнение Фоккера - Планка на p_α/m и интегрируя по импульсам:

$$\partial_t J_\alpha = -\frac{\partial}{\partial r_\beta} \int \frac{p_\alpha p_\beta}{m^2} f d^3p + \int \frac{p_\alpha}{m} \partial_{\vec{p}}[(\gamma\vec{p} + \vec{\nabla}U)f] d^3p + \int \frac{p_\alpha}{m} \frac{D}{2} \partial_{\vec{p}}^2 f d^3p.$$

Последний интеграл в этом выражении равен нулю после двух интегрирований по частям. Находим первый интеграл, используя равновесную функцию $f \sim e^{-p^2/2mT}$:

$$\int \frac{p_\alpha p_\beta}{m^2} f d^3p = \frac{1}{3} \delta_{\alpha\beta} \int \frac{p^2}{m^2} f d^3p = \delta_{\alpha\beta} \frac{T}{m} n(\vec{r}, t). \quad (217)$$

Второй интеграл равен

$$\int \frac{p_\alpha}{m} \frac{\partial}{\partial p_\beta} [\gamma p_\beta f] d^3p = -\frac{\gamma}{m} \int p_\beta f \delta_{\alpha\beta} d^3p = -\gamma J_\alpha \quad (218)$$

Третий интеграл

$$\int \frac{p_\alpha}{m} \frac{\partial}{\partial p_\beta} [\nabla_\beta U f] d^3p = -\nabla_\beta U \int \frac{1}{m} f \delta_{\alpha\beta} d^3p = -\frac{n(\vec{r})}{m} \nabla_\alpha U. \quad (219)$$

Таким образом, мы получили уравнение

$$\partial_t J_\alpha = -\frac{\partial}{\partial r_\alpha} \left(\frac{T}{m} n(\vec{r}) \right) - \gamma J_\alpha - \frac{n(\vec{r})}{m} \nabla_\alpha U \equiv -\gamma J_\alpha(t) + B_\alpha(t), \quad (220)$$

где $B_\alpha(t)$ меняется очень медленно на временах $\sim 1/\gamma$, поскольку зависит от медленно меняющейся плотности числа частиц.

Получаем

$$\begin{aligned} J_\alpha(t) &= J_\alpha(0)e^{-\gamma t} + \int_0^t B_\alpha(t') e^{-\gamma(t-t')} dt' \approx \\ &\approx J_\alpha(0)e^{-\gamma t} + B_\alpha(t) \frac{1 - e^{-\gamma t}}{\gamma} \rightarrow \frac{B_\alpha(t)}{\gamma} \end{aligned} \quad (221)$$

для $t \gg 1/\gamma$. Подставляя это выражение в уравнение для плотности числа частиц, имеем:

$$\partial_t n(\vec{r}, t) = \frac{T}{m\gamma} \Delta n(\vec{r}, t) + \frac{1}{m\gamma} \vec{\nabla}(n(\vec{r}, t) \vec{\nabla} U) \quad (222)$$

Вводя обозначение $\kappa \equiv T/(m\gamma)$ для коэффициента диффузии в координатном пространстве, получим уравнение Смолуховского:

$$\partial_t n(\vec{r}, t) = \kappa \vec{\nabla} \left(\vec{\nabla} n(\vec{r}, t) + n(\vec{r}, t) \frac{\vec{\nabla} U}{T} \right). \quad (223)$$

Другой вывод этого уравнения основан на исключении быстро меняющейся импульсной переменной $\vec{p}(t)$ непосредственно с помощью уравнения Ланжевена

$$\dot{\vec{p}} = -\gamma \vec{p} - \vec{\nabla} U + \vec{\xi}(t), \quad \dot{\vec{r}} = \frac{\vec{p}}{m} \quad (224)$$

с корреляторами случайной силы $\langle \vec{\xi}(t) \rangle = 0$, $\langle \vec{\xi}_i(t) \vec{\xi}_j(t') \rangle = D \delta_{ij} \delta(t - t')$.

Решение уравнения для $t \gg 1/\gamma$ есть

$$\vec{p}(t) = -\frac{1}{\gamma} \vec{\nabla} U + \frac{1}{\gamma} \vec{\xi}(t), \quad (225)$$

так что

$$\dot{\vec{r}} = -\frac{1}{m\gamma} \vec{\nabla} U + \frac{1}{m\gamma} \vec{\xi}(t). \quad (226)$$

Тогда для плотности числа частиц $n(\vec{r}, t) = \langle \delta(\vec{r} - \vec{r}(t)) \rangle$ получим уравнение

$$\begin{aligned} \partial_t n(\vec{r}, t) &= \left\langle -\int \frac{d\vec{\mu}}{(2\pi)^d} i\vec{\mu} \cdot \dot{\vec{r}}(t) e^{i(\vec{r} - \vec{r}(t)) \cdot \vec{\mu}} \right\rangle = \\ &= \left\langle \int \frac{d\vec{\mu}}{(2\pi)^d} \frac{i\vec{\mu} \cdot \vec{\nabla} U}{m\gamma} e^{i(\vec{r} - \vec{r}(t)) \cdot \vec{\mu}} \right\rangle - \left\langle \int \frac{d\vec{\mu}}{(2\pi)^d} \frac{i\vec{\mu} \cdot \vec{\xi}(t)}{m\gamma} e^{i(\vec{r} - \vec{r}(t)) \cdot \vec{\mu}} \right\rangle = \\ &= \frac{1}{m\gamma} \vec{\nabla}(n(\vec{r}, t) \vec{\nabla} U) + \frac{T}{m\gamma} \vec{\nabla}^2 n(\vec{r}, t) \end{aligned} \quad (227)$$

где было использовано

$$\vec{r}(t) = \vec{r}(t - \delta t) + \frac{1}{m\gamma} \int_{t-\delta t}^t \vec{\xi}(t') dt' - \delta t \frac{1}{m\gamma} \vec{\nabla} U \quad (228)$$

$$e^{i(\vec{r}-\vec{r}(t)) \cdot \vec{\mu}} \approx e^{i(\vec{r}-\vec{r}(t-\delta t)) \cdot \vec{\mu}} \left(1 - \int_{t-\delta t}^t \frac{i\vec{\mu} \cdot \vec{\xi}(t')}{m\gamma} dt' \right) \quad (229)$$

$$\begin{aligned} & \left\langle \int \frac{d\vec{\mu}}{(2\pi)^d} \frac{i\mu_\alpha \xi_\alpha(t)}{m\gamma} e^{i(\vec{r}-\vec{r}(t-\delta t)) \cdot \vec{\mu}} \int_{t-\delta t}^t \frac{i\mu_\beta \xi_\beta(t')}{m\gamma} dt' \right\rangle_{\delta t \rightarrow 0} = \\ & = \frac{\partial}{\partial r_\alpha} \frac{\partial}{\partial r_\beta} \frac{(m\gamma T) \delta_{\alpha\beta} n(\vec{r})}{m^2 \gamma^2} = \frac{T}{m\gamma} \Delta n(\vec{r}) \end{aligned} \quad (230)$$

20.7 Seminars by Kolokolov 1

20.7.1 1. Nonlinear Waves on the Water Surface

Задача

Найти гамильтониан трехволнового взаимодействия для волн на поверхности воды глубиной h , считая движение жидкости потенциальным.

Решение

Рассмотрим слой жидкости глубиной h . Амплитуду волны как функцию двумерного вектора $\vec{r}$ и времени t обозначим $\eta(\vec{r}, t)$. При условии $\eta \ll \lambda$, где λ - длина волны, течение жидкости можно рассматривать как потенциальное, т. е. скорость $\vec{v}(\vec{r}, z, t)$ можно представить в виде $\vec{v} = \vec{\nabla} \phi$. Для несжимаемой жидкости, $\rho = \text{Const}$, потенциал ϕ удовлетворяет уравнению $\Delta \phi = 0$. Энергия волн есть

$$H = \frac{1}{2} \rho \int d^2 r \int_{-h}^{\eta} (\vec{\nabla} \phi)^2 dz + \frac{1}{2} \rho g \int d^2 r \eta^2 + \frac{1}{2} \sigma \int d^2 r (\vec{\nabla} \eta)^2 \quad (509)$$

Каноническими переменными, как мы проверим ниже, являются $\eta(\vec{r}, t)$ и $\phi(z = \eta(\vec{r}, t), \vec{r}, t) \equiv \psi(\vec{r}, t)$.

Сначала найдем вариацию гамильтониана по $\delta \phi$ при $\eta = \text{Const}$:

$$\delta(H/\rho)_{\eta=\text{Const}} = \int d^2 r \int [\vec{\nabla} \cdot (\delta \phi \vec{\nabla} \phi) - \delta \phi \Delta \phi] dz = \int dS (\vec{n} \cdot \vec{\nabla} \phi)_{z=\eta} \delta \psi. \quad (510)$$

Вклад в последнем интеграле дает только поверхность $z = \eta$ (вода в дно не утекает!), причем $\vec{n} \approx (-\vec{\nabla} \eta, 1)$ (рис. 12).

Таким образом,

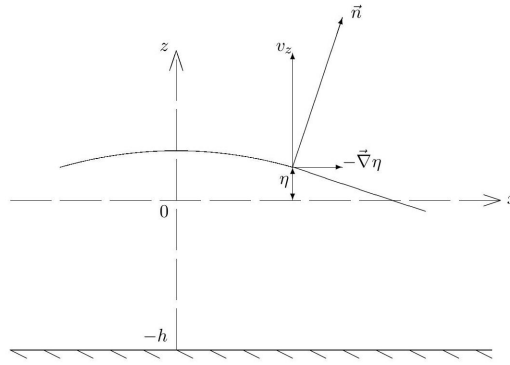
$$\frac{\delta(H/\rho)}{\delta \psi} = (\vec{v} \cdot \vec{n})_{z=\eta} = -\vec{\nabla} \eta \cdot \vec{v} + v_z|_{z=\eta} = \frac{\partial \eta}{\partial t}, \quad (511)$$

поскольку

$$v_z|_{z=\eta} \equiv \frac{d\eta}{dt} = \frac{\partial \eta}{\partial t} + \frac{\partial \eta}{\partial \vec{r}} \cdot \vec{v} \quad (512)$$

Аналогично

$$\frac{\delta(H/\rho)}{\delta \eta} = \frac{v^2|_{z=\eta}}{2} + g\eta - \frac{\sigma}{\rho} \Delta \eta = -\frac{\partial \psi}{\partial t}. \quad (513)$$

Рис. 12. Поверхностная волна на воде глубиной h

Последнее равенство получено интегрированием z компоненты уравнения Эйлера по переменной z от $-h$ до η :

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{v^2}{2} = -\frac{\delta P}{\rho} - g\eta \quad (514)$$

и из граничных условий $\delta P = -\sigma \Delta \eta$ на поверхности воды.

Выделим из гамильтониана квадратичную часть H_2 . Для этого разложим потенциал скорости в ряд Фурье, ограничиваясь конечной площадью S и накладывая периодические граничные условия:

$$\phi(z, \vec{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{S}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \phi_{\mathbf{k}}(z, t) \quad (515)$$

Решением уравнения Лапласа $\Delta \phi = 0$ для фурье-компонент будет

$$\phi_{\mathbf{k}}(z, t) = C_{\mathbf{k}} e^{kz} + D_{\mathbf{k}} e^{-kz} \quad (516)$$

Тогда, с учетом граничного условия $v_z = d\phi/dz = 0$ при $z = -h$, получим $D_{\mathbf{k}} = C_{\mathbf{k}} e^{-2kh}$. Следовательно,

$$\phi(z, \vec{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{S}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} C_{\mathbf{k}} e^{-kh} 2 \cosh[k(z+h)] \quad (517)$$

$$\vec{\nabla} \phi(z, \vec{r}, t) = \frac{2}{\sqrt{S}} \sum_{\mathbf{q}} e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} C_{\mathbf{q}} e^{-qh} [i\vec{q} \cosh(q(z+h)) + \vec{e}_z q \sinh(q(z+h))]. \quad (518)$$

Теперь выразим квадратичную часть гамильтониана

$$\frac{H_2}{\rho} = \frac{1}{2} \int d^2 r \int_{-h}^0 (\vec{\nabla} \phi)^2 dz + \frac{1}{2} g \int d^2 r \eta^2 + \frac{\sigma}{2\rho} \int d^2 r (\vec{\nabla} \eta)^2 \quad (519)$$

через фурье-компоненты $\psi_{\mathbf{k}} \equiv \phi_{\mathbf{k}}(z = \eta)$, ограничившись приближением

$$\psi_{\mathbf{k}} \equiv \phi_{\mathbf{k}}(z = \eta) \approx \psi_{\mathbf{k}}^{(0)} + \delta \psi_{\mathbf{k}} \quad (520)$$

где мы подставляем в (517) $z = \eta$, раскладываем полученное выражение по малому параметру ηk (т. е. по малому углу наклона поверхности жидкости) и получаем:

$$\begin{aligned}\psi_{\mathbf{k}}^{(0)} &\equiv \phi_{\mathbf{k}}(z=0) = C_{\mathbf{k}} e^{-kh} 2 \cosh(kh) \\ \delta\psi_{\mathbf{k}} &= \frac{1}{\sqrt{S}} \sum_{\mathbf{k}_1} C_{\mathbf{k}_1} \eta_{\mathbf{k}-\mathbf{k}_1} 2k_1 e^{-k_1 h} \sinh(k_1 h)\end{aligned}\quad (521)$$

Имеем:

$$\begin{aligned}\frac{1}{2} \int d^2 r \int_{-h}^0 (\vec{\nabla} \phi)^2 dz &= \frac{1}{2} \int d^2 r (\phi n_z \nabla_z \phi)_{z=0} = \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} C_{\mathbf{k}} C_{-\mathbf{k}} e^{-2kh} k \cosh(kh) \sinh(kh) = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}}^{(0)} \psi_{-\mathbf{k}}^{(0)} k \tanh(kh) \approx \\ &\approx \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}} \psi_{-\mathbf{k}} k \tanh(kh) - \sum_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}} \delta\psi_{-\mathbf{k}} k \tanh(kh)\end{aligned}\quad (522)$$

Последний член будет давать вклад только в кубическую часть гамильтониана. Раскладывая $\eta(\vec{r}, t)$ в ряд Фурье, получим для H_2 выражение

$$\frac{H_2}{\rho} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \left[k \tanh(kh) \psi_{\mathbf{k}} \psi_{-\mathbf{k}} + \left(g + \frac{\sigma}{\rho} k^2 \right) \eta_{\mathbf{k}} \eta_{-\mathbf{k}} \right] \quad (523)$$

Как известно, любой квадратичный гамильтониан

$$\frac{H_2}{\rho} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} [A_k \psi_{\mathbf{k}} \psi_{-\mathbf{k}} + B_k \eta_{\mathbf{k}} \eta_{-\mathbf{k}}] \quad (524)$$

приводится к каноническому виду

$$\frac{H_2}{\rho} = \sum_{\mathbf{k}} \omega_k a_{\mathbf{k}}^* a_{\mathbf{k}} \quad (525)$$

где

$$\omega_k = \sqrt{A_k B_k} = \sqrt{k \tanh(kh) \left(g + \frac{\sigma k^2}{\rho} \right)} \quad (526)$$

с помощью перехода к новым каноническим переменным $a_{\mathbf{k}}, a_{\mathbf{k}}^*$ (уничтожения и рождения), определяемым соотношениями

$$\eta_{\mathbf{k}} = r_k \frac{a_{\mathbf{k}} + a_{-\mathbf{k}}^*}{\sqrt{2}}, \quad \psi_{\mathbf{k}} = \frac{1}{r_k} \frac{a_{\mathbf{k}} - a_{-\mathbf{k}}^*}{i\sqrt{2}} \quad (527)$$

при выборе

$$r_k^2 = \sqrt{\frac{A_k}{B_k}} = \sqrt{\frac{k \tanh(kh)}{g + \sigma k^2 / \rho}} \quad (528)$$

Гамильтоновы уравнения (511, 513) в переменных $a_{\mathbf{k}}, a_{\mathbf{k}}^*$ имеют вид

$$\frac{da_{\mathbf{k}}}{dt} = -i \frac{\partial (H_2 / \rho)}{\partial a_{\mathbf{k}}^*} \quad (529)$$

Рассмотрим сначала случай капиллярных волн, $k \gg k_* = \sqrt{\rho g / \sigma}$, на "мелкой" воде, $kh \ll 1$, так что $\tanh(kh) \ll 1$. Тогда

$$\omega_k \approx \sqrt{\frac{h\sigma}{\rho}} k^2, \quad r_k^2 \approx \sqrt{\frac{\rho h}{\sigma}} \quad (530)$$

В этом предельном случае при вычислении кубической части гамильтониана, ответственной за трехволновое взаимодействие, можно пренебречь всеми членами, содержащими малую величину $\tanh(kh) \ll 1$ (что соответствует пренебрежению z -компонентой скорости жидкости). В частности, не будет вклада от поправок к $\psi_{\mathbf{k}}$. В этом приближении для кубической части гамильтониана получим из (518):

$$\begin{aligned} \frac{H_3}{\rho} &= \frac{1}{2} \int d^2r \int_0^\eta (\vec{\nabla} \phi)^2 dz \approx \frac{1}{2} \int d^2r \eta(\vec{r}, t) (\vec{\nabla} \phi)^2 = \\ &= \frac{1}{2\sqrt{S}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \eta_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}_1} \psi_{\mathbf{k}_2} [-\vec{k}_1 \cdot \vec{k}_2] \Delta(\vec{k} + \vec{k}_1 + \vec{k}_2) \end{aligned} \quad (531)$$

После перехода к новым каноническим переменным $a_{\mathbf{k}}^*, a_{\mathbf{k}}$ появятся члены вида

$$(a_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}_1}^* a_{-\mathbf{k}_2}^* - a_{\mathbf{k}_1} a_{-\mathbf{k}}^* a_{-\mathbf{k}_2}^* - a_{\mathbf{k}_2} a_{-\mathbf{k}}^* a_{-\mathbf{k}_1}^*) \Delta(\vec{k} + \vec{k}_1 + \vec{k}_2) + c.c. \quad (532)$$

В выражении

$$\sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} a_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}_1}^* a_{-\mathbf{k}_2}^* \Delta(\vec{k} + \vec{k}_1 + \vec{k}_2) (\vec{k}_1 \cdot \vec{k}_2) \quad (533)$$

проводим замену переменных $\vec{k}_1 \rightarrow -\vec{k}_1, \vec{k}_2 \rightarrow -\vec{k}_2$. В выражении

$$\sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} (-a_{\mathbf{k}_1} a_{-\mathbf{k}}^* a_{-\mathbf{k}_2}^*) \Delta(\vec{k} + \vec{k}_1 + \vec{k}_2) (\vec{k}_1 \cdot \vec{k}_2) \quad (534)$$

сначала переобозначим переменные $\vec{k}_1 \rightarrow \vec{k}, \vec{k}_2 \rightarrow \vec{k}_1$, а затем проводим замену переменных $\vec{k}_1 \rightarrow -\vec{k}_1, \vec{k}_2 \rightarrow -\vec{k}_2$, и аналогично в третьем члене в (532). В результате получим:

$$\frac{H_3}{\rho} = \frac{1}{2\sqrt{S_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2}}} \left(\frac{\sigma}{64\rho h} \right)^{1/4} (\vec{k}_1 \cdot \vec{k}_2 + \vec{k} \cdot \vec{k}_1 + \vec{k} \cdot \vec{k}_2) (a_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}_1}^* a_{\mathbf{k}_2}^* + c.c.) \Delta(\vec{k} - \vec{k}_1 - \vec{k}_2). \quad (535)$$

Для капиллярных волн на "глубокой" воде, $kh \gg 1$, получаем

$$\omega_k \approx \sqrt{\frac{\sigma k^3}{\rho}}, \quad r_k^2 \approx \sqrt{\frac{\rho}{\sigma k}}, \quad (536)$$

Теперь, при вычислении кубической части гамильтониана, мы должны учесть два вклада.

Первый равен

$$\begin{aligned} \frac{H_3^{(1)}}{\rho} &= \frac{1}{2} \int d^2r \int_0^\eta (\vec{\nabla} \phi)^2 dz \approx \frac{1}{2} \int d^2r \eta(\vec{r}, t) (\vec{\nabla} \phi)^2 = \\ &= \frac{1}{2\sqrt{S}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \eta_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}_1} \psi_{\mathbf{k}_2} [k_1 k_2 \tanh(k_1 h) \tanh(k_2 h) - \vec{k}_1 \cdot \vec{k}_2] \Delta(\vec{k} + \vec{k}_1 + \vec{k}_2) \\ &\approx \frac{1}{2\sqrt{S}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \eta_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}_1} \psi_{\mathbf{k}_2} [k_1 k_2 - \vec{k}_1 \cdot \vec{k}_2] \Delta(\vec{k} + \vec{k}_1 + \vec{k}_2) \end{aligned} \quad (537)$$

Второй вклад возникает из объемного интеграла (522) с учетом поправки к канонической переменной $\psi_{\mathbf{k}}$, для вычисления которой мы использовали приближение (520). В случае $kh \gg 1$ получается $\psi_{\mathbf{k}}^{(0)} \approx C_{\mathbf{k}}$ и

$$\psi_{\mathbf{k}} \equiv \phi_{\mathbf{k}}(z = \eta) \approx C_{\mathbf{k}} + \frac{1}{\sqrt{S}} \sum_{\mathbf{k}_1} k_1 \eta_{\mathbf{k}-\mathbf{k}_1} C_{\mathbf{k}_1}. \quad (538)$$

Теперь для вычисления второго вклада мы в последний член формулы (522) подставляем $\psi_{\mathbf{k}}^{(0)}$ и $\delta\psi_{\mathbf{k}}$ и в результате имеем:

$$\frac{H_3^{(2)}}{\rho} = \frac{1}{\sqrt{S}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \eta_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}_1} \psi_{\mathbf{k}_2} [-k_1 k_2] \Delta(\vec{k} + \vec{k}_1 + \vec{k}_2) \quad (539)$$

Суммируя оба вклада, получим:

$$\begin{aligned} \frac{H_3}{\rho} &= \frac{1}{2} \int d^2 r \int_0^\eta (\vec{\nabla} \phi)^2 dz \approx \frac{1}{2} \int d^2 r \eta(\vec{r}, t) (\vec{\nabla} \phi)^2 = \\ &= \frac{1}{2\sqrt{S}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \eta_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}_1} \psi_{\mathbf{k}_2} [-k_1 k_2 - \vec{k}_1 \cdot \vec{k}_2] \Delta(\vec{k} + \vec{k}_1 + \vec{k}_2) \end{aligned} \quad (540)$$

После перехода к каноническим переменным кубическая часть гамильтониана для капиллярных волн на глубокой воде принимает вид

$$\begin{aligned} \frac{H_3}{\rho} &= \frac{1}{2\sqrt{S}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \left(\frac{\sigma}{64\rho} \right)^{1/4} (a_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}_1}^* a_{\mathbf{k}_2}^* + c.c.) \Delta(\vec{k} - \vec{k}_1 - \vec{k}_2) \times \\ &\left[\sqrt[4]{\frac{k_1 k_2}{k}} (\vec{k}_1 \cdot \vec{k}_2 + k_1 k_2) + \sqrt[4]{\frac{k k_2}{k_1}} (\vec{k} \cdot \vec{k}_2 - k k_2) + \sqrt[4]{\frac{k k_1}{k_2}} (\vec{k} \cdot \vec{k}_1 - k k_1) \right]. \end{aligned} \quad (541)$$

20.7.2 2. Nonlinear Spin Waves

Задача

Найти гамильтониан трехволнового дипольного взаимодействия для спиновых волн.

Решение

В узлах кристаллической решетки расположены магнитные моменты $\mathbf{S}$, которые взаимодействуют друг с другом и внешним магнитным полем.

Микроскопический модельный гамильтониан имеет вид

$$H = - \sum_i \mathbf{B}_0(\mathbf{r}_i) \cdot \mathbf{S}(\mathbf{r}_i) - \sum_{ij} J_{ij} \mathbf{S}(\mathbf{r}_i) \cdot \mathbf{S}(\mathbf{r}_j) - \frac{1}{2} \sum_{ij} \mathbf{h}_j(\mathbf{r}_i) \cdot \mathbf{S}(\mathbf{r}_i). \quad (542)$$

Первый член описывает взаимодействие спина в i -м узле решетки с координатой $\mathbf{r}_i$ с внешним магнитным полем, второй член - так называемое обменное взаимодействие, приводящее при положительном знаке J к ферромагнитному упорядочиванию при температуре ниже критической, третий член описывает слабое диполь-дипольное взаимодействие между спинами, где $\mathbf{h}_j(\mathbf{r}_i)$ - магнитное поле, создаваемое j -м спином в i -м узле решетки.

Нас будут интересовать длинноволновые возбуждения намагниченности, поэтому перейдем к непрерывному описанию, вводя

плотность намагниченности $\mathbf{M}(\mathbf{r})$, так, чтобы полные магнитные моменты совпадали:

$$\int \mathbf{M}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \sum_i \mathbf{S}(\mathbf{r}_i) \quad (543)$$

Тогда первый член в гамильтониане записывается как

$$H_0 = - \int \mathbf{B}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{M}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (544)$$

второй член -

$$H_{ex} = J \int (\nabla \mathbf{M}(\mathbf{r}))^2 d\mathbf{r} \quad (545)$$

В третьем члене магнитное поле диполя $\mathbf{h}$ представим как $\mathbf{h} = -\nabla\phi$, где

$$\phi(\mathbf{r}_1) = \frac{\mathbf{M}(\mathbf{r}_2) \cdot \mathbf{r}}{r^3} = -\mathbf{M}(\mathbf{r}_2) \cdot \nabla \frac{1}{r} = -4\pi i \int \frac{\mathbf{M}(\mathbf{r}_2) \cdot \mathbf{q}}{q^2} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \quad (546)$$

и введено обозначение $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$. Тогда третий член равен

$$H_{dd} = 2\pi \int d\mathbf{r}_1 \int d\mathbf{r}_2 \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \cdot \frac{(\mathbf{M}(\mathbf{r}_1) \cdot \mathbf{q})(\mathbf{M}(\mathbf{r}_2) \cdot \mathbf{q})}{q^2} e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)} \quad (547)$$

Интеграл по q дает вклад, пропорциональный $\delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$, однако для длинноволновых спиновых волн это несущественно, поскольку для учета диполь-дипольного взаимодействия мы должны ограничить область интегрирования условием $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| > a$ - размера решетки, чтобы исключить самовоздействие. Разлагая $\mathbf{M}(\mathbf{r})$ в ряд Фурье,

$$\mathbf{M}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{M}_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \quad (548)$$

получим

$$H_{dd} = 2\pi \sum_{\mathbf{k}} (\mathbf{M}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{n})(\mathbf{M}_{-\mathbf{k}} \cdot \mathbf{n}), \quad \mathbf{n} = \frac{\mathbf{k}}{|\mathbf{k}|}, \quad |\mathbf{k}| < \frac{1}{a} \quad (549)$$

Теперь следует выбрать канонические переменные и записать в гамильтоновой форме феноменологические уравнения движения Ландау - Лифшица:

$$\partial_t \mathbf{M}(\mathbf{r}, t) = g \left[\frac{\delta H}{\delta \mathbf{M}} \times \mathbf{M}(\mathbf{r}, t) \right] \quad (550)$$

которые описывают прецессию вектора намагниченности $\mathbf{M}$ вокруг эффективного магнитного поля $\delta H / \delta \mathbf{M}$.

Отметим, что квадрат намагниченности есть сохраняющаяся величина, поскольку

$$\partial_t M^2 = 2\mathbf{M} \cdot \partial_t \mathbf{M} = 2g\mathbf{M} \cdot \left[\frac{\delta H}{\delta \mathbf{M}} \times \mathbf{M} \right] = 0 \quad (551)$$

В достаточно сильном внешнем магнитном поле (или при низких температурах), направление которого выберем вдоль оси z , вектор намагниченности $\mathbf{M}$ под действием внешних возмущений или теплового движения лишь слабо отклоняется от оси z , т. е. $M_x \sim M_y \ll M_z$, так что уравнения движения принимают вид

$$\partial_t \mathbf{M}_x = g \mathbf{M}_z \frac{\delta H}{\delta \mathbf{M}_y}, \quad \partial_t \mathbf{M}_y = -g \mathbf{M}_z \frac{\delta H}{\delta \mathbf{M}_x} \quad (552)$$

Удобно перейти к циркулярным переменным $M_{\pm} = M_x \pm i M_y$, тогда

$$\partial_t \mathbf{M}_+ = -2ig \mathbf{M}_z \frac{\delta H}{\delta \mathbf{M}_-}, \quad \partial_t \mathbf{M}_- = 2ig \mathbf{M}_z \frac{\delta H}{\delta \mathbf{M}_+} \quad (553)$$

В линейном приближении, когда $M_z \approx M_0 = \text{Const}$, определим новые канонические переменные из соотношений $M_+(\mathbf{r}, t) = \sqrt{2gM_0}a(\mathbf{r}, t)$, $M_-(\mathbf{r}, t) = \sqrt{2gM_0}a^*(\mathbf{r}, t)$ и получим канонические уравнения:

$$\partial_t a = -i \frac{\delta H}{\delta a^*}, \quad \partial_t a^* = i \frac{\delta H}{\delta a}. \quad (554)$$

Поскольку $M_z = \sqrt{M_0^2 - M_+ M_-}$ зависит только от произведения aa^* , будем искать точные преобразования к новым каноническим переменным в виде $M_+ = \sqrt{2gM_0}af(aa^*)$, $M_- = \sqrt{2gM_0}a^*f(aa^*)$.

Находя неизвестную функцию f из условия сохранения канонического вида уравнений движения, получим $f = \sqrt{1 - gaa^*/2M_0}$. Для наших целей достаточно знать, что поправка к $M_{\pm}$ имеет третий порядок по переменным a . Из равенства $\mathbf{M}^2 = M_0^2 = M_z^2 + M_+ M_-$ находим $M_z \approx M_0 - gaa^*$ с точностью до членов 4-го порядка.

Если пренебречь H_{dd} , то после перехода к фурье-компонентам получим

$$H = \int g B_0 a(\mathbf{r}) a^*(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + 2g M_0 J \int (\nabla a(\mathbf{r})) (\nabla a^*(\mathbf{r})) d\mathbf{r} = \sum_{\mathbf{k}} \omega_k a_{\mathbf{k}}^* a_{\mathbf{k}} \quad (555)$$

где $\omega_k = g B_0 + 2g M_0 J k^2 \equiv \omega_H + \omega_{ex}(kb)^2$, здесь b — расстояние между узлами решетки, а B_0 — внешнее магнитное поле, направленное вдоль оси z .

Теперь извлечем из H_{dd} члены второго H_2 и третьего H_3 порядка по новым каноническим переменным a, a^* . Запишем члены $\mathbf{M}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{n}$ через циркулярные переменные:

$$\mathbf{M}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{n} = M_z(\mathbf{k}) n_z + \frac{1}{2} [M_+(\mathbf{k}) n_- + M_-(\mathbf{k}) n_+] \quad (556)$$

M_z содержит члены второго порядка по a, a^* , $M_{\pm}$ — члены первого и третьего порядка. Поэтому вклад в H_2 дадут произведения $M_{\pm} \cdot M_{\mp}$, а в H_3 — произведения $M_z \cdot M_{\pm}$:

$$\begin{aligned} H_{dd}^{(2)} &= \frac{\pi}{2} \sum_{\mathbf{k}} [M_+(\mathbf{k}) n_- + M_-(\mathbf{k}) n_+] [M_+(-\mathbf{k}) n_- + M_-(-\mathbf{k}) n_+] = \\ &= \frac{\pi}{2} \sum_{\mathbf{k}} [n_-^2 M_+(\mathbf{k}) M_+(-\mathbf{k}) + n_+^2 M_-(\mathbf{k}) M_-(-\mathbf{k})] + \\ &+ \frac{\pi}{2} \sum_{\mathbf{k}} n_- n_+ (M_+(\mathbf{k}) M_-(-\mathbf{k}) + M_-(\mathbf{k}) M_+(-\mathbf{k})) \end{aligned} \quad (557)$$

Подставляя $M_+(\mathbf{k}) = \sqrt{2gM_0}a(\mathbf{k})$, $M_-(\mathbf{k}) = \sqrt{2gM_0}a^*(\mathbf{k})$, получаем:

$$\begin{aligned} H_{dd}^{(2)} &= \pi g M_0 \sum_{\mathbf{k}} [n_-^2 a(\mathbf{k}) a(-\mathbf{k}) + n_+^2 a^*(\mathbf{k}) a^*(-\mathbf{k})] + \\ &+ \pi g M_0 \sum_{\mathbf{k}} n_- n_+ (a(\mathbf{k}) a^*(-\mathbf{k}) + a^*(\mathbf{k}) a(-\mathbf{k})) \end{aligned} \quad (558)$$

Из вещественности

$$M_{x,y}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} M_{x,y}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \quad (559)$$

следует $M_{x,y}^*(\mathbf{k}) = M_{x,y}(-\mathbf{k})$, откуда $M_+(-\mathbf{k}) = M_-^*(\mathbf{k})$, т. е. $a(-\mathbf{k}) = a(\mathbf{k})$. Таким образом,

$$H_{dd}^{(2)} = \pi g M_0 \sum_{\mathbf{k}} [n_-^2 a(\mathbf{k}) a(\mathbf{k}) + n_+^2 a^*(\mathbf{k}) a^*(\mathbf{k}) + 2n_- n_+ a(\mathbf{k}) a^*(\mathbf{k})] \quad (560)$$

Собирая все квадратичные вклады, получим:

$$\begin{aligned} H^{(2)} &= \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^* a_{\mathbf{k}} (\omega_H + \omega_{ex} k^2 b^2 + 2\pi g M_0 n_- n_+) + \\ &+ \sum_{\mathbf{k}} \pi g M_0 (a_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} n_-^2 + a_{\mathbf{k}}^* a_{\mathbf{k}}^* n_+^2) \equiv \\ &\equiv \sum_{\mathbf{k}} [A_k a_{\mathbf{k}}^* a_{\mathbf{k}} + B_k a_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} n_-^2 + B_k^* a_{\mathbf{k}}^* a_{\mathbf{k}}^* n_+^2] \end{aligned} \quad (561)$$

Обычно $\omega_H + \omega_{ex} k^2 b^2 \gg \pi g M_0 \equiv \omega_m/4$, т. е. $A_k \gg |B_k|$. Осталось диагонализировать $H^{(2)}$, используя $(u - v)$ -преобразования Боголюбова, вводя новые канонические переменные b_k, b_k^* :

$$a_{\mathbf{k}} = u_k b_{\mathbf{k}} + v_k b_{\mathbf{k}}^*, \quad a_{\mathbf{k}}^* = u_k b_{\mathbf{k}}^* + v_k^* b_{\mathbf{k}} \quad (562)$$

Чтобы уравнения сохранили свой канонический вид

$$\partial_t a_{\mathbf{k}} = -i \frac{\delta H}{\delta a_{\mathbf{k}}^*} \rightarrow \partial_t b_{\mathbf{k}} = -i \frac{\delta H}{\delta b_{\mathbf{k}}^*} \quad (563)$$

следует выбрать $u_k^2 - |v_k|^2 = 1$, а чтобы недиагональные члены занулились - надо выбрать

$$u_k^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{A_k}{\omega_k} \right), \quad |v_k|^2 = \frac{1}{2} \left(\frac{A_k}{\omega_k} - 1 \right) \quad (564)$$

В результате получим:

$$H^{(2)} = \sum_{\mathbf{k}} \omega_k b_{\mathbf{k}}^* b_{\mathbf{k}}, \quad \text{где} \quad \omega_k = \sqrt{A_k^2 + B_k^2} \quad (565)$$

Таким образом, вклад от членов B_k в ω_k имеет второй порядок малости, и в пределе $A_k \gg |B_k|$ их можно просто отбросить.

Для нахождения $H^{(3)}$ следует подставить

$$\begin{aligned} M_z(\mathbf{k}) &= \frac{1}{\sqrt{V}} \int (M_z(\mathbf{r}) - M_0) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{r} = \frac{1}{\sqrt{V}} \int (-g) a^*(\mathbf{r}) a(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{r} = \\ &= \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} (-g) a_{\mathbf{k}_1} a_{\mathbf{k}_2}^* \Delta(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}) \end{aligned} \quad (566)$$

Получим

$$H_{dd}^{(3)} = \pi \sum_{\mathbf{k}} [n_z n_+ (M_z(\mathbf{k}) M_-(-\mathbf{k}) + M_z(-\mathbf{k}) M_-(\mathbf{k})) + c.c.] \quad (567)$$

Переходя к каноническим переменным a, a^* , имеем:

$$H_{dd}^{(3)} = \frac{\pi(-g)\sqrt{8gM_0}}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \sin \theta_k \cos \theta_k e^{i\phi_k} a_{\mathbf{k}_1} a_{\mathbf{k}_2}^* a_{\mathbf{k}}^* \Delta(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}) + c.c. \quad (568)$$

После симметризации по $\mathbf{k}, \mathbf{k}_2$ получаем:

$$\begin{aligned} H_{dd}^{(3)} = & -\sqrt{\frac{g\omega_m^2}{32M_0V}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} (\sin 2\theta_k e^{i\phi_k} + \sin 2\theta_{k_2} e^{i\phi_{k_2}}) a_{\mathbf{k}_1} a_{\mathbf{k}_2}^* a_{\mathbf{k}}^* \Delta(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}) \\ & + c.c. \equiv \frac{1}{2\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} V_{\mathbf{k}_1; \mathbf{k}_2, \mathbf{k}} a_{\mathbf{k}_1} a_{\mathbf{k}_2}^* a_{\mathbf{k}}^* \Delta(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}) + c.c. \end{aligned} \quad (569)$$

20.7.3 3. Attenuation of Spin Waves

Задача

Найти декремент затухания спиновых волн за счет трехволнового взаимодействия для:
1) длинных волн ($\omega_{ex} k^2 a^2 \ll \omega_H$); 2) вблизи порога распада.

Решение

Рассмотрим затухание спиновых волн за счет взаимодействия с тепловыми магнонами. Закон дисперсии спиновых волн имеет вид $\omega_{\mathbf{k}} = \omega_H + \omega_{ex} a^2 k^2$.

1. Затухание длинных волн ($\omega_{ex} k^2 a^2 \ll \omega_H$)

В этом случае возможно только слияние волны с тепловыми магнонами, поскольку процесс распада запрещен (см. ниже). Рассмотрим спиновую волну с волновым вектором $\mathbf{k}$, распространяющуюся перпендикулярно внешнему магнитному полю. Выберем систему координат с осью z вдоль внешнего магнитного поля и осью x вдоль волнового вектора $\mathbf{k}$ спиновой волны, считая ее начальную амплитуду много большей теплового фона (рис. 13).

В выбранной системе координат $\theta_k = \pi/2$, так что $\sin 2\theta_k = 0$ и квадрат матричного элемента трехволнового взаимодействия для процесса слияния имеет вид

$$|V_{\mathbf{k}+\mathbf{q}; \mathbf{k}, \mathbf{q}}|^2 = \frac{\omega_m^2 g}{8M_0} \sin^2 2\theta_q \quad (570)$$

Кинетическое уравнение для процесса слияния

$$\dot{n}_{\mathbf{k}} = 2\pi \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} |V_{\mathbf{k}+\mathbf{q}; \mathbf{k}, \mathbf{q}}|^2 [-n_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{q}} + n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} (n_{\mathbf{k}} + n_{\mathbf{q}})] \delta(\omega_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \omega_{\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{q}}) \quad (571)$$

в случае $n_{\mathbf{k}} \gg n_{\mathbf{q}}, n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}$ имеет решение вида $n_{\mathbf{k}}(t) \sim \exp(-2\gamma_{\mathbf{k}} t)$, где декремент затухания спиновой волны равен

$$\gamma_{\mathbf{k}} = \frac{g\omega_m^2 T \omega_{\mathbf{k}}}{64\pi^2 M_0} \int \frac{d\mathbf{q} \sin^2 2\theta_q}{\omega_{\mathbf{q}} \omega_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}} \delta(\omega_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \omega_{\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{q}}) \quad (572)$$

Здесь было использовано, что $n_{\mathbf{q}} \approx n_{\mathbf{q}}^0 = T/\omega_{\mathbf{q}}$, $n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \approx n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^0 = T/\omega_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}$.

Из сохранения энергии $\omega_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} = \omega_{\mathbf{k}} + \omega_{\mathbf{q}}$ следует

$$\omega_H + \omega_{ex} a^2 (\mathbf{k} + \mathbf{q})^2 = 2\omega_H + \omega_{ex} a^2 (\mathbf{k}^2 + \mathbf{q}^2), \quad (573)$$

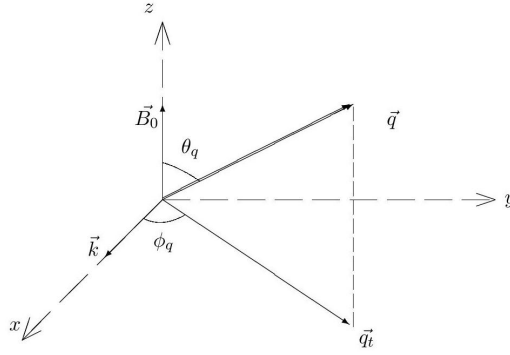


Рис. 13. Спиновая волны с волновым вектором $\mathbf{k}$ и тепловой магнон с волновым вектором $\mathbf{q}$

откуда

$$q = \frac{\omega_H}{2k\omega_{ex}a^2 \sin \theta_{\mathbf{q}} \cos \phi_{\mathbf{q}}}, \quad (574)$$

где $\theta_{\mathbf{q}}, \phi_{\mathbf{q}}$ - полярный и азимутальный углы в выбранной системе координат. Это равенство означает, в частности, что $\cos \phi_{\mathbf{q}} > 0$. Поскольку $\sin \theta_{\mathbf{q}} \cos \phi_{\mathbf{q}} \leq 1$, то

$$\omega_{ex}q^2a^2 \geq \frac{\omega_{ex}a^2\omega_H^2}{4k^2\omega_{ex}^2a^4} \gg \omega_H, \quad (575)$$

т. е. $q \gg k$ и, следовательно, $\omega_{\mathbf{q}} \approx \omega_{ex}q^2a^2 \approx \omega_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}$. Удобно дельтафункцию $\delta(\omega_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \omega_{\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{q}})$ переписать в виде

$$\delta(\omega_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \omega_{\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{q}}) = \delta(\omega_H - \alpha q) = \frac{1}{\alpha} \delta(q - \omega_H/\alpha), \quad (576)$$

где $\alpha = 2k\omega_{ex}a^2 \sin \theta_{\mathbf{q}} \cos \phi_{\mathbf{q}}$. Тогда

$$\begin{aligned} \gamma_{\mathbf{k}} &= \frac{g\omega_m^2 T \omega_{\mathbf{k}}}{64\pi^2 M_0} \int d\Omega_{\mathbf{q}} \int \frac{q^2 dq \sin^2 2\theta_q}{\omega_{ex}^2 a^4 q^4} \delta(\omega_H - \alpha q) = \\ &= \frac{g\omega_m^2 T \omega_{\mathbf{k}} k}{32\pi^2 M_0 \omega_H^2 \omega_{ex} a^2} \int d\Omega_{\mathbf{q}} \sin^2 2\theta_q \sin \theta_q \cos \phi_q \end{aligned} \quad (577)$$

Угловой интеграл $I_q = \int d\Omega_{\mathbf{q}} \sin^2 2\theta_q \sin \theta_q \cos \phi_q$ равен

$$\begin{aligned} I_q &= \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \cos \phi_q d\phi_{\mathbf{q}} \int_0^{\pi} \sin^2 2\theta_q \sin^2 \theta_q d\theta_q = \\ &= \int_0^{\pi} \sin^2 2\theta_q (1 - \cos 2\theta_q) d\theta_q = \frac{\pi}{2} \end{aligned} \quad (578)$$

Окончательно

$$\gamma_{\mathbf{k}} = \frac{g\omega_m^2 T \omega_{\mathbf{k}} k}{64\pi M_0 \omega_H^2 \omega_{ex} a^2} \quad (579)$$

20.7.4 2. Attenuation of Spin Waves near the Decay Threshold

Найдем вклад в декремент затухания спиновых волн от процесса распада вблизи его порога. Минимальная частота спиновой волны с законом дисперсии $\omega_{\mathbf{k}} = \omega_H + \alpha k^2$ ($\alpha \equiv \omega_{ex} a^2$), при которой возможен ее распад на две другие, находится из сохранения частоты и волнового вектора

$$\omega_{\mathbf{k}} = \omega_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} + \omega_{\mathbf{q}} \quad (580)$$

Удобно представить

$$\mathbf{q} = \frac{\mathbf{k}}{2} + \delta\mathbf{q}, \quad \mathbf{k} - \mathbf{q} = \frac{\mathbf{k}}{2} - \delta\mathbf{q} \quad (581)$$

Тогда, подставляя в уравнение сохранения частоты, получим:

$$2\alpha\delta q^2 = \frac{\alpha k^2}{2} - \omega_H \quad (582)$$

следовательно, $\alpha k^2 > 2\omega_H$ и $(\omega_{\mathbf{k}})_{\min} = 3\omega_H$.

Пусть $\omega_{\mathbf{k}} = 3\omega_H + \varepsilon$. Тогда

$$\delta(\omega_{\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \omega_{\mathbf{q}}) = \delta(2\alpha\delta q^2 - \varepsilon/2) \quad (583)$$

Таким образом, вблизи порога распада $\delta q \sim \sqrt{\varepsilon} \ll k$, следовательно, $\mathbf{k} - \mathbf{q} \approx \mathbf{q} \approx \mathbf{k}/2$. Значит, все вектора направлены в одну сторону и поэтому

$$|V_{\mathbf{k};\mathbf{k}-\mathbf{q},\mathbf{q}}|^2 \approx \frac{\omega_m^2 g}{2M_0} \sin^2 2\theta_k \quad (584)$$

Кинетическое уравнение для распада:

$$\dot{n}_{\mathbf{k}} = \pi \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} |V_{\mathbf{k};\mathbf{k}-\mathbf{q},\mathbf{q}}|^2 [n_{\mathbf{q}} n_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - n_{\mathbf{k}} (n_{\mathbf{q}} + n_{\mathbf{k}-\mathbf{q}})] \delta(\omega_{\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \omega_{\mathbf{q}}).$$

Поэтому вклад в декремент затухания от распада равен

$$\gamma_{\mathbf{k}} = \frac{\pi}{2} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} |V_{\mathbf{k};\mathbf{k}-\mathbf{q},\mathbf{q}}|^2 [n_{\mathbf{q}} + n_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}] \delta(\omega_{\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \omega_{\mathbf{q}}) \quad (586)$$

Учитывая малую величину ε только в аргументе дельта-функции, получим:

$$[n_{\mathbf{q}} + n_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}] \delta(\omega_{\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \omega_{\mathbf{q}}) \approx \frac{4T}{3\omega_H} \delta(2\alpha\delta q^2 - \varepsilon/2) \quad (587)$$

Тогда

$$\gamma_{\mathbf{k}} = \frac{g\omega_m^2 T \sin^2 2\theta_{\mathbf{k}}}{24\pi^2 \omega_H} \int d^3 q \delta(2\alpha\delta q^2 - \varepsilon/2) \quad (588)$$

Так как $\mathbf{q} = \mathbf{k}/2 + \delta\mathbf{q}$, то $d\mathbf{q} = d\delta\mathbf{q}$, и поэтому

$$\int d^3 q \delta(2\alpha\delta q^2 - \varepsilon/2) = \int d^3 \delta q \frac{1}{2\alpha} \delta(\delta q^2 - \varepsilon/4\alpha) = \frac{\pi}{\alpha} \sqrt{\frac{\varepsilon}{4\alpha}} \quad (589)$$

Окончательно

$$\gamma_{\mathbf{k}} = \frac{\sqrt{\omega_{\mathbf{k}} - 3\omega_H} g\omega_m^2 T \sin^2 2\theta_{\mathbf{k}}}{48\pi\omega_H (\omega_{ex} a^2)^{3/2}} \quad (590)$$

Зависимость вида $\sqrt{\omega_{\mathbf{k}} - 3\omega_H}$ неаналитична и характерна почти для всех пороговых явлений. Вклад слияния в этой области может быть больше, но он не имеет особенностей по k , и поэтому распадный вклад хорошо различим.

20.7.5 4. Kolmogorov Wave Turbulence Spectra

Задача

Найти колмогоровские стационарные спектры для: 1) поверхностных капиллярных волн на мелкой и глубокой воде; 2) спиновых волн; 3) звуковых волн в трехмерном пространстве.

Решение

Кинетическое уравнение для трехволнового взаимодействия имеет вид

$$\frac{\partial}{\partial t} n_{\mathbf{k}} = I[n_{\mathbf{k}}] \equiv \pi \int \frac{d\mathbf{k}_1 d\mathbf{k}_2}{(2\pi)^d} (R_{\mathbf{k};\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2} - R_{\mathbf{k}_1;\mathbf{k},\mathbf{k}_2} - R_{\mathbf{k}_2;\mathbf{k},\mathbf{k}_1}) \quad (591)$$

где

$$R_{\mathbf{k};\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2} = |V_{\mathbf{k};\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2}|^2 [n_1 n_2 - n_k (n_1 + n_2)] \delta(\omega_k - \omega_1 - \omega_2) \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2),$$

а $V_{\mathbf{k};\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2}$ - матричный элемент трехволнового взаимодействия.

Для теплового равновесного спектра $n_{\mathbf{k}}^0 = T/\omega_k$ в интеграле столкновений $I[n_{\mathbf{k}}]$ зануляется каждый R -член, поскольку

$$R_{\mathbf{k};\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2} \sim (\omega_k - \omega_1 - \omega_2) \delta(\omega_k - \omega_1 - \omega_2). \quad (593)$$

Кинетическое уравнение сохраняет полную энергию E :

$$\frac{dE}{dt} = \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^d} \omega_{\mathbf{k}} \dot{n}_{\mathbf{k}} = \pi \int \frac{d\mathbf{k} d\mathbf{k}_1 d\mathbf{k}_2}{(2\pi)^{2d}} \omega_{\mathbf{k}} (R_{\mathbf{k};\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2} - R_{\mathbf{k}_1;\mathbf{k},\mathbf{k}_2} - R_{\mathbf{k}_2;\mathbf{k},\mathbf{k}_1}) \quad (594)$$

После переобозначения переменных интегрирования во втором ($\mathbf{k} \leftrightarrow \mathbf{k}_1$) и третьем ($\mathbf{k} \leftrightarrow \mathbf{k}_2$) R -членах получим, что

$$\frac{dE}{dt} = \pi \int \frac{d\mathbf{k} d\mathbf{k}_1 d\mathbf{k}_2}{(2\pi)^{2d}} (\omega_k - \omega_1 - \omega_2) R_{\mathbf{k};\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2} = 0 \quad (595)$$

поскольку R -член содержит $\delta(\omega_k - \omega_1 - \omega_2)$.

Локальное условие сохранения энергии запишем в виде

$$\frac{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}}{\partial t} = -\text{div}_{\mathbf{k}} \mathbf{p} \quad (596)$$

где $\varepsilon_{\mathbf{k}} = \omega_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}}$ - плотность энергии, а $\mathbf{p}$ - плотность потока энергии. Для изотропной системы $\mathbf{p} \parallel \mathbf{k}$, так что для двумерной системы $d = 2$ получим:

$$\text{div}_{\mathbf{k}} \mathbf{p} = \frac{1}{k} \frac{\partial}{\partial k} (kp) \quad \text{откуда} \quad p = -\frac{1}{k} \int_0^k \omega_{\mathbf{q}} \dot{n}_{\mathbf{q}} q dq \quad (597)$$

а полный поток энергии в пространстве волновых векторов $P = \int dS_{\mathbf{k}} p$ равен

$$P_{d=2} = -2\pi \int_0^k \omega_{\mathbf{q}} I_{\mathbf{q}} q dq \quad (598)$$

Для трехмерной системы аналогично находим

$$P_{d=3} = -4\pi \int_0^k \omega_{\mathbf{q}} I_{\mathbf{q}} q^2 dq \quad (599)$$

Найдем теперь для некоторых конкретных систем колмогоровские стационарные спектры вида $n_{\mathbf{k}} \sim 1/k^b$ с постоянным потоком энергии P по спектру.

1а) Поверхностные капиллярные волны на мелкой воде.

В это случае $d = 2, \omega_k \sim k^2, V_{k,12} \sim k_1 k_2$. Тогда

$$[n_1 n_2 - n_k (n_1 + n_2)] \sim 1/k^{2b}, \quad \delta(\omega_k - \omega_1 - \omega_2) \sim 1/k^2, \quad |V|^2 \sim k^4$$

так что

$$I_q \sim \int_0^q d^2 k_1 \frac{1}{k_1^2} \frac{1}{k_1^{2b}} k_1^4 \sim q^{4-2b} \quad (600)$$

Поэтому

$$P_{d=2} \sim \int_0^k q^2 I_q q dq \sim k^{8-2b} = \text{Const} \rightarrow b = 4 \quad (601)$$

Таким образом, стационарный спектр для поверхностных капиллярных волн на мелкой воде имеет вид

$$n_k = \frac{\text{Const}}{k^4} \sim \frac{1}{\omega_k^2} \quad (602)$$

- спектр Каца - Конторовича.

1б) Поверхностные капиллярные волны на глубокой воде.

В это случае $d = 2, \omega_k \sim k^{3/2}, V_{k,12} \sim (k_1 k_2 / k)^{1/4} k_1 k_2 \sim k^{9/4}$. Тогда $[n_1 n_2 - n_k (n_1 + n_2)] \sim 1/k^{2b}, \quad \delta(\omega_k - \omega_1 - \omega_2) \sim 1/k^{3/2}, \quad |V|^2 \sim k^{9/2}$, так что

$$I_q \sim \int_0^q d^2 k_1 \frac{1}{k_1^{3/2}} \frac{1}{k_1^{2b}} k_1^{9/2} \sim q^{5-2b} \quad (603)$$

Поэтому

$$P_{d=2} \sim \int_0^k q^{3/2} I_q q dq \sim k^{17/2-2b} = \text{Const} \rightarrow b = 17/4 \quad (604)$$

Таким образом, стационарный спектр для поверхностных капиллярных волн на глубокой воде имеет вид

$$n_k = \frac{\text{Const}}{k^{17/4}} \quad (605)$$

- спектр Захарова - Филоненко.

1. Спиновые волны.

Для случая $\omega_{ex} k^2 a^2 \gg \omega_H$ закон дисперсии имеет вид $\omega_k \sim k^2$, а матричный элемент от k не зависит. Оказывается, что угловая зависимость у всех трех членов в I_k одинакова, $\sim (1 + 2 \cos^2 \theta - 3 \cos^4 \theta)$, поэтому

$$I_q \sim \int_0^q d^3 k_1 \frac{1}{k_1^2} \frac{1}{k_1^{2b}} \sim q^{1-2b} \quad (606)$$

Таким образом,

$$P_{d=3} \sim \int_0^k q^2 q^{1-2b} q^2 dq \sim k^{6-2b} = \text{Const} \rightarrow b = 3 \quad (607)$$

Стационарный спектр для спиновых волн имеет вид

$$n_k = \frac{\text{Const}}{k^3} \quad (608)$$

1. Звуковые волны в трехмерном пространстве. В это случае $d = 3, \omega_k \sim k, V_{k,12} \sim k^{3/2}$. Тогда $[n_1 n_2 - n_k (n_1 + n_2)] \sim 1/k^{2b}, \delta(\omega_k - \omega_1 - \omega_2) \sim 1/k, |V|^2 \sim k^3$, так что

$$I_q \sim \int_0^q d^3 k_1 \frac{1}{k_1} \frac{1}{k_1^{2b}} k_1^3 \sim q^{5-2b} \quad (609)$$

Поэтому

$$P_{d=3} \sim \int_0^k q q^{5-2b} q^2 dq \sim k^{9-2b} = \text{Const} \rightarrow b = 9/2 \quad (610)$$

Таким образом, стационарный спектр для звуковых волн в трехмерном пространстве имеет вид

$$n_k = \frac{\text{Const}}{k^{9/2}} \sim \frac{1}{\omega_k^{9/2}} \quad (611)$$

- спектр Захарова - Сагдеева.

20.7.6 5. The Langevin Equation for a Polymer Chain

5.1. Модель Рауза

Найти корреляционную функцию расстояния между концами цепи $\langle \mathbf{R}(t) \mathbf{R}(0) \rangle$, используя уравнение Ланжевена.

Решение

В качестве примера применения уравнения Ланжевена рассмотрим динамику полимерной цепи в жидкости при температуре T . Конкретнее, найдем корреляционную функцию

$$\langle \mathbf{R}(t) \mathbf{R}(0) \rangle, \quad (612)$$

где $\mathbf{R}(t)$ - расстояние между концами полимерной цепи в момент времени t . Эта величина (точнее, ее фурье-образ) связана с интенсивностью неупругого рассеяния света полимерной цепью.

Если интересоваться крупномасштабным поведением полимерной цепи, например, если длина волны рассеиваемого излучения $\lambda \gg a \sim 10^{-7}$ см - характерного размера звена цепи, то детали строения полимера несущественны и можно использовать простую модель.

Для описания полимера мы выберем самую простую модель "бусинки на пружинках", которая пригодна для описания крупномасштабного поведения. Гармонический потенциал взаимодействия между достаточно далеко отстоящими друг от друга звеньями цепи имеет энтропийное происхождение и получается следующим образом.

Рассмотрим предельно гибкую цепь, состоящую из последовательности n шарнирно соединенных жестких сегментов длины l . Найдем вероятность $P_n(\mathbf{r})$ того, что расстояние между точками цепи, разделенными n звеньями, будет $\mathbf{r}$. Ввиду независимости ориентаций отдельных сегментов цепи вероятность найти концы сегментов цепи в точках $\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n$ есть

$$P_n(\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n) = g(\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1) g(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \dots g(\mathbf{x}_{n-1}, \mathbf{x}_n), \quad (613)$$

где для свободно сочлененной цепи

$$g(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \frac{1}{4\pi l^2} \delta(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'| - l)$$

есть вероятность найти один конец мономера (жесткого стержня) в точке $\mathbf{x}'$, если другой конец находится в точке $\mathbf{x}$, с нормировкой

$$\int g(\mathbf{x}, \mathbf{x}') d\mathbf{x}' = 1$$

Чтобы найти $P_n(\mathbf{r})$, нам нужно проинтегрировать по всем промежуточным положениям концов сегментов $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{n-1}$:

$$\begin{aligned} P_n(\mathbf{r}) &= \int P_n(\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n = \mathbf{x}_0 + \mathbf{r}) d\mathbf{x}_1 \dots d\mathbf{x}_{n-1} = \\ &= \int \delta\left[\sum_{i=0}^{n-1} \mathbf{y}_i - \mathbf{r}\right] \prod_{i=0}^{n-1} [g(\mathbf{y}_i) d\mathbf{y}_i] \end{aligned} \quad (614)$$

где $\mathbf{y}_i = \mathbf{x}_{i+1} - \mathbf{x}_i$. Используя интегральное представление δ -функции

$$\delta(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{x}) d\mathbf{k}$$

получаем

$$P_n(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{r}) g_k^n d\mathbf{k}$$

где

$$g_k = \int g(\mathbf{y}) \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{y}) d\mathbf{y} \quad (615)$$

Для $g(\mathbf{y}) = (4\pi l^2)^{-1} \delta(|\mathbf{y}| - l)$ имеем

$$g_k = \frac{1}{4\pi l^2} \int_0^\infty \delta(|\mathbf{y}| - l) 2\pi y^2 dy \int_{-1}^{+1} d(\cos \theta) \exp(iky \cos \theta) = \frac{\sin kl}{kl}$$

Для $n \gg 1$ основной вклад дает область интегрирования $k \ll 1/l$, так что $(\sin(kl))/(kl) \approx 1 - k^2 l^2 / 6$ и g_k^n можно представить в виде

$$g_k^n \approx (1 - k^2 l^2 / 6)^n \approx e^{-k^2 l^2 n / 6} \quad (616)$$

Тогда

$$\begin{aligned} P_n(\mathbf{r}) &= \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk_x}{2\pi} e^{-ik_x r_x - k_x^2 l^2 n / 6} \right) \cdot \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk_y}{2\pi} e^{-ik_y r_y - k_y^2 l^2 n / 6} \right) \\ &\cdot \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk_z}{2\pi} e^{-ik_z r_z - k_z^2 l^2 n / 6} \right) = \left(\frac{3}{2\pi n l^2} \right)^{3/2} e^{-\frac{3r^2}{2nl^2}} \end{aligned} \quad (617)$$

Мы получили так называемую Гауссову модель полимерной цепи. Видно, что можно выбирать другое число звеньев цепи n' и их длину l' , получая такое же распределение $P(r)$ при условии $n' l'^2 = n l^2$. Из определения $P(r)$ следует, что эта величина пропорциональна статсумме цепи с закрепленными концами $Z_n(r)$. Тогда свободная энергия цепи есть

$$F_n = -T \ln Z_n = Const + \frac{3Tr^2}{2nl^2} \quad (618)$$

Теперь, если интересоваться крупномасштабным поведением, можно ввести эффективную длину звена цепи $a = \ln^{1/2}$, и свободная энергия цепи равна

$$F = F(0) + \sum_{i=1}^N \frac{3T(\mathbf{x}_{i+1} - \mathbf{x}_i)^2}{2a^2} \quad (619)$$

Это выражение позволяет найти силу $\mathbf{g}_i$, действующую на i -е звено (или бусинку) со стороны соседних звеньев цепи

$$\mathbf{g}_i = -\frac{\partial F}{\partial \mathbf{x}_i} = \frac{3T}{a^2} (\mathbf{x}_{i+1} + \mathbf{x}_{i-1} - 2\mathbf{x}_i)$$

Уравнение Ланжевена теперь принимает вид

$$\xi \frac{\partial \mathbf{x}_i}{\partial t} = \frac{3T}{a^2} (\mathbf{x}_{i+1} + \mathbf{x}_{i-1} - 2\mathbf{x}_i) + \mathbf{f}_i(t), \quad (620)$$

где ξ - коэффициент трения, $\mathbf{f}_i(t)$ - флуктуационная сила, действующая на i -е звено. Удобно считать величину i непрерывной переменной, так что это уравнение можно переписать как

$$\xi \frac{\partial \mathbf{x}_i}{\partial t} = k \frac{\partial^2 \mathbf{x}_i}{\partial i^2} + \mathbf{f}_i(t) \quad (621)$$

где введено обозначение $k = 3T/a^2$. В этом уравнении влияние среды, связанное с трением, мгновенно (нет запаздывания), поэтому естественно считать, что корреляционная функция случайной силы пропорциональна дельта-функции

$$\langle f_\alpha(t, i) f_\beta(t', j) \rangle = 2\xi T \delta(i - j) \delta_{\alpha\beta} \delta(t - t'). \quad (622)$$

Поскольку на концах цепи упругая сила действует только с одной стороны, граничные условия имеют вид

$$\left. \frac{\partial \mathbf{x}_i}{\partial i} \right|_{i=0} = 0, \quad \left. \frac{\partial \mathbf{x}_i}{\partial i} \right|_{i=N} = 0$$

Решение, согласующееся с этими граничными условиями, ищем в виде

$$\mathbf{x}(t, i) = \mathbf{y}_0(t) + \sum_{p=1}^{\infty} \mathbf{y}_p(t) \cos \frac{\pi p i}{N} \quad (623)$$

Величина $\mathbf{y}_0(t)$ определяет движение центра масс $\mathbf{X}$ цепи, поскольку

$$\mathbf{X}(t) = \frac{1}{N} \int_0^N \mathbf{x}(i, t) di = \mathbf{y}_0 \quad (624)$$

Из уравнения Ланжевена получаем

$$\xi \frac{\partial \mathbf{y}_0}{\partial t} = \frac{1}{N} \int_0^N \xi \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial t} di = \frac{1}{N} \int_0^N \left[k \frac{\partial^2 \mathbf{x}}{\partial i^2} + \mathbf{f}(i, t) \right] di = \frac{1}{N} \int_0^N \mathbf{f}(i, t) di \quad (625)$$

так как $\left. \frac{\partial \mathbf{x}_i}{\partial i} \right|_{i=0, N} = 0$. Тогда

$$\mathbf{y}_0(t) - \mathbf{y}_0(0) = \frac{1}{N\xi} \int_0^t dt' \int_0^N \mathbf{f}(i, t') di \quad (626)$$

Среднеквадратичное смещение центра масс за время t

$$\begin{aligned} \langle (\mathbf{y}_0(t) - \mathbf{y}_0(0))^2 \rangle &= \\ &= \frac{1}{N^2 \xi^2} \int_0^t dt' \int_0^t dt'' \int_0^N di \int_0^N dj \delta(i-j) \delta(t-t') 6\xi T = \frac{6T}{N\xi} t \end{aligned} \quad (627)$$

позволяет найти коэффициент диффузии D_c полимерной цепи

$$D_c = \frac{T}{N\xi} \quad (628)$$

который оказывается в N раз меньше коэффициента диффузии одного звена. Компоненты

$$\mathbf{y}_p(t) = \frac{2}{N} \int_0^N di \mathbf{x}(t, i) \cos \frac{\pi p i}{N} \quad p = 1, 2, \dots$$

с $p > 0$ описывают внутренние движения в цепи. Используя уравнение Ланжевена, получим

$$\frac{d\mathbf{y}_p}{dt} = \frac{2}{N\xi} \int_0^N di \left[k \frac{\partial^2 \mathbf{x}}{\partial i^2} + \mathbf{f}(i, t) \right] \cos \frac{\pi p i}{N} = \frac{2}{N\xi} \mathbf{f}_p(t) - \frac{1}{\tau} \mathbf{y}_p(t), \quad (629)$$

где

$$\mathbf{f}_p(t) = \int_0^N \mathbf{f}(i, t) \cos \frac{\pi p i}{N} di, \quad \tau_p = \frac{N^2 \xi}{k \pi^2 p^2}. \quad (630)$$

При интегрировании этого уравнения удобно начальное условие отнести к моменту времени $t' \rightarrow -\infty$ и выбрать его равным нулю, поскольку его влияние из-за трения пренебрежимо мало. Тогда решением уравнения Ланжевена является

$$\mathbf{y}_p(t) = \frac{2}{N\xi} \int_{-\infty}^t \exp\left(-\frac{t-t'}{\tau_p}\right) \mathbf{f}_p(t') dt' \quad (631)$$

Используя выражение для коррелятора случайной силы, находим

$$\langle f_p(t) \rangle = 0, \quad \langle f_{p\alpha}(t) f_{q\beta}(t') \rangle = T N \xi \delta_{pq} \delta_{\alpha\beta} \delta(t-t'). \quad (632)$$

Теперь можно вычислить коррелятор

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{y}_p(t) \mathbf{y}_q(0) \rangle &= \frac{12T\delta_{pq}}{N\xi} \int_{-\infty}^t dt' \int_{-\infty}^0 dt'' e^{-(t-t'-t'')/\tau_p} \delta(t' - t'') = \\ &= \frac{6T\tau_p\delta_{pq}}{N\xi} e^{-t/\tau_p} \end{aligned} \quad (633)$$

Расстояние между концами цепи можно представить в виде

$$\mathbf{R}(t) = \mathbf{x}(t, N) - \mathbf{x}(t, 0) = \sum_{p=1,2,3,4,\dots} [(-1)^p - 1] \mathbf{y}_p(t) = -2 \sum_{p=1,3,5,\dots} \mathbf{y}_p(t).$$

Тогда при использовании выражения для $\langle \mathbf{y}_p(t) \mathbf{y}_q(0) \rangle$ зависимость от времени коррелятора расстояния между концами цепи имеет вид

$$\langle \mathbf{R}(t) \mathbf{R}(0) \rangle = \frac{8Na^2}{\pi^2} \sum_{p=1,3,5,\dots} \frac{1}{p^2} \exp\left(-\frac{tp^2}{\tau_1}\right) \quad (635)$$

Минимальное время релаксации, $\tau_1 = N^2 a^2 \xi / (3T \pi^2)$, определяет поведение коррелятора расстояния между концами цепи на больших временных масштабах.

При $t = 0$ воспроизводится хорошо известный результат $\langle \mathbf{R}^2 \rangle = Na^2$, поскольку

$$\sum_{p=1,3,5,\dots} \frac{1}{p^2} = \sum_{p=1,2,3,4,\dots} \frac{1}{p^2} - \sum_{p=2,4,6,\dots} \frac{1}{p^2} = \sum_{p=1,3,5,\dots} \frac{1}{p^2} \left(1 - \frac{1}{4}\right) = \frac{\pi^2}{8} \quad (636)$$

где использовано

$$\sum_{p=1,2,3,\dots} \frac{1}{p^2} = \zeta_2(1) = \int_0^\infty \frac{x dx}{e^x - 1} = \frac{\pi^2}{6} \quad (637)$$

5.2. Полимер в случайном потоке

Найти функцию распределения по размерам полимера, помещенного в случайный поток.

Решение

Гибкий полимер, состоящий из N звеньев длиной l , принимает в жидкости запутанную, клубковую конфигурацию с характерным размером $R_0 = \sqrt{N}l \ll Nl$ - длины цепи в растянутом состоянии. Помещенный в турбулентный поток, полимер принимает вытянутую конфигурацию, так что его можно приближенно описать, указывая лишь расстояние между концами цепи. Как правило, характерный размер полимера даже в растянутом состоянии гораздо меньше вязкого масштаба турбулентного потока, поэтому действующая со стороны потока жидкости растягивающая сила

пропорциональна расстоянию между концами цепи R . Уравнение Ланжевена принимает вид

$$\frac{dR}{dt} = \sigma(t)R + f(R) \quad (638)$$

где σ - градиент скоростей в турбулентном потоке. Его среднее значение и среднеквадратичное отклонение задаются соотношениями $\langle \sigma(t) \rangle = \lambda$, $\langle (\sigma(t) - \lambda)(\sigma(t') - \lambda) \rangle = D\delta(t - t')$, а $f(R)$ - упругая сила натяжения полимера, имеющая энтропийное происхождение.

Найдем сначала вид функции $f(R)$ для модели свободно-сочлененной цепи из N звеньев длиной l . Действие внешней силы $\vec{F}$ на каждое звено полимерной цепи эквивалентно действию потенциала $U_i = -\vec{F} \cdot \vec{r}_i$, где r_i - радиус вектор i -го звена. Расстояние между концами цепи R в этом случае находится из

$$R = \frac{1}{Z} \prod_{i=1}^N \int_{-1}^{+1} \left(\sum_i l \cos \theta_i \right) e^{\beta F l \cos \theta_i} 2\pi d(\cos \theta_i) \quad (639)$$

где статсумма Z равна

$$Z = \prod_{i=1}^N \int_{-1}^{+1} e^{\beta F l \cos \theta_i} 2\pi d(\cos \theta_i) \quad (640)$$

$\beta = 1/T$ - обратная температура, θ_i - угол между i -м звеном и направлением внешней силы $\vec{F}$. Размер полимера под действием внешней силы определяется выражением

$$R = N \frac{\int_{-1}^{+1} l \cos \theta_i e^{\beta F l \cos \theta_i} d(\cos \theta_i)}{\int_{-1}^{+1} e^{\beta F l \cos \theta_i} d(\cos \theta_i)} = \frac{N}{\beta F} \left[\frac{\beta F l (e^{\beta F l} + e^{-\beta F l})}{e^{\beta F l} - e^{-\beta F l}} - 1 \right] \quad (641)$$

Из 3-го закона Ньютона следует, что упругая сила в равновесии должна компенсировать внешнюю силу, т. е. $f(R) = -F(R)$. Для слабого растяжения, $\beta f l \ll 1$,

$$R \approx -\frac{1}{3}Nl^2\beta f, \text{ откуда } f \approx -\frac{3TR}{Nl^2}, \quad (642)$$

тогда как для сильного растяжения, $\beta fl \gg 1$,

$$R \approx Nl + \frac{N}{\beta f}, \text{ откуда } f(R) \approx -\frac{T}{l(1 - R/Nl)}. \quad (643)$$

Для последующего применения удобно описывать зависимость силы от растяжения во всем интервале $(\sqrt{Nl}, Nl)$ с помощью интерполяционной формулы

$$f \approx -\frac{T}{l} \left(2x + \frac{x}{1-x} \right), \quad (644)$$

где $x = R/Nl$. Полученные формулы справедливы лишь при $R \gg \sqrt{Nl}$, когда полимерная цепь растянута и ее поведение можно описывать в терминах силы $f(R)$ энтропийного происхождения.

Найдем теперь функцию распределения $P(\rho, t)$ по размерам полимера ρ , используя уравнение Ланжевена (ρ ввели, чтобы не путать с $R(t)$). По определению

$$P(\rho, t) = \langle \delta(\rho - R(t)) \rangle. \quad (645)$$

Тогда

$$\frac{\partial P(\rho, t)}{\partial t} = \left\langle -\frac{dR}{dt} \frac{\partial}{\partial \rho} \delta(\rho - R(t)) \right\rangle = \frac{\partial j(\rho, t)}{\partial \rho} \quad (646)$$

где

$$j(\rho, t) = -\left\langle \frac{dR}{dt} \delta(\rho - R(t)) \right\rangle = -\rho \langle \sigma(t) \delta(\rho - R(t)) \rangle - f(\rho) P(\rho, t) \quad (647)$$

Величина $R(t)$ коррелирует с $\sigma(t)$. Поэтому для вычисления $\langle \sigma(t) \delta(\rho - R(t)) \rangle$ представим $R(t)$ в виде

$$R(t) \approx R(t - \varepsilon) + \int_{t-\varepsilon}^t \sigma(t') R(t') dt' + \varepsilon f(R) \quad (648)$$

где $\varepsilon \rightarrow 0$. Последние два члена малы, и можно разложить δ -функцию по малому параметру, что дает

$$\begin{aligned} \langle \sigma(t) \delta(\rho - R(t)) \rangle &= \lambda P(\rho) - \left\langle (\sigma(t) - \lambda) \int_{t-\varepsilon}^t \sigma(t') R(t') dt' \frac{\partial}{\partial \rho} \delta(\rho - R(t)) \right\rangle = \\ &= \lambda P(\rho) - \frac{\partial}{\partial \rho} \frac{D}{2} \rho P(\rho) \end{aligned} \quad (649)$$

где мы использовали $\int_0^\infty \delta(x) dx = 1/2$ и перешли к пределу $\varepsilon \rightarrow 0$. Окончательно для функции распределения $P(\rho, t)$ по размерам цепи получаем уравнение типа Фоккера - Планка:

$$\frac{\partial}{\partial t} P(\rho, t) = \frac{\partial}{\partial \rho} (-f(\rho) P - \lambda \rho P) + \frac{D}{2} \frac{\partial}{\partial \rho} \left[\rho \frac{\partial}{\partial \rho} (\rho P) \right] \equiv \frac{\partial j}{\partial \rho}, \quad (650)$$

где

$$j = (-f(\rho) - \lambda \rho) P(\rho, t) + \frac{D\rho}{2} \frac{\partial}{\partial \rho} (\rho P(\rho, t)) \quad (651)$$

Найдем стационарное решение этого уравнения с $j = 0$ (полимеры не рождаются и не уничтожаются). Тогда, заменяя $\rho \rightarrow R$, получим из (651)

$$\frac{d(RP)}{RP} = \frac{2(f(R) + \lambda R)dR}{DR^2} \quad (652)$$

откуда

$$P(R) = A \frac{1}{R} \exp \left(\frac{2}{D} \int^R \frac{(f(r') + \lambda r') dr'}{r'^2} \right) \quad (653)$$

где A - нормировочная постоянная.

Наиболее интересен случай сильного растяжения полимера (возможность разрыва цепи не рассматриваем). Используя интерполяционную формулу для силы (644), получаем

$$\begin{aligned} \frac{2}{D} \int^R \frac{(f(r') + \lambda r') dr'}{r'^2} &= \\ &= -\frac{2T}{DNl^2} \int^{R/Nl} \left(\frac{2}{x} + \frac{1}{x(1-x)} \right) dx + \frac{2\lambda}{D} \int^{R/Nl} \frac{dx}{x} \end{aligned} \quad (654)$$

Вычисляя интегралы, находим

$$P(R) = \frac{A}{Nl} \left(\frac{R}{Nl} \right)^{a-1} \left(1 - \frac{R}{Nl} \right)^b, \quad (655)$$

где

$$a = \frac{2}{D} \left(\lambda - \frac{3T}{Nl^2} \right), \quad b = \frac{2T}{DNl^2} \quad (656)$$

Это распределение имеет смысл (нормируемо) только в достаточно сильном растягивающем потоке, $a > 0$ ($\lambda > 3T/Nl^2$), поскольку мы изначально предполагали, что цепь является сильно вытянутой и ее можно описать одномерной моделью. Естественно, что детали поведения функции распределения зависят от используемой модели полимера.

Нормировочная постоянная A определяется из условия

$$\frac{A}{Nl} \int_0^1 x^{a-1} (1-x)^b dx = \frac{A}{Nl} \frac{\Gamma(a)\Gamma(b+1)}{\Gamma(a+b+1)} = 1 \quad (657)$$

Тогда моменты равны

$$\overline{R^n} = (Nl)^n \frac{\Gamma(a+n)\Gamma(a+b+1)}{\Gamma(a)\Gamma(a+b+1+n)}. \quad (658)$$

В частности,

$$\bar{R} = \frac{Nla}{a+b+1}, \quad \overline{R^2} = \frac{(Nl)^2 a(a+1)}{(a+b+1)(a+b+2)}, \quad (659)$$

где использовано $\Gamma(z+1) = z\Gamma(z)$.

Наибольший интерес представляет поведение цепи вблизи порога $a \ll 1$ ($D \gg \lambda - 3T/Nl^2$) (где оно слабо зависит от используемой модели полимера):

$$\bar{R} \approx \frac{Nla}{b+1}, \quad \overline{R^2} \approx \frac{(Nl)^2 a}{(b+1)(b+2)}, \quad \text{откуда} \quad \frac{\overline{R^2} - \bar{R}^2}{\bar{R}^2} \approx \frac{b+1}{a(b+2)} \gg 1,$$

т. е. длина цепи сильно флуктуирует. Условие $a \ll 1$ следует уточнить. Поскольку мы считали цепь вытянутой по сравнению с равновесным значением, то из $\bar{R} > l\sqrt{N}$ следует, что $a > (1+b)/\sqrt{N}$.

20.7.7 6. Neutron Deceleration

Задача

Найти стационарное пространственное распределение в зависимости от энергии для точечного источника моноэнергетических нейтронов, замедляющихся в среде в результате упругого рассеяния на ядрах массой $A \gg 1$, считая сечение рассеяния не зависящим от энергии нейтрона.

Качественное рассмотрение.

При рассеянии легкой частицы массой m (нейтрона), движущейся со скоростью v , на неподвижной частице массой $M \approx Am$, переданный импульс меняется от нулевого до максимального $\Delta P \approx 2mv$, так что теряемая энергия $\Delta \varepsilon \approx (\Delta P)^2/2M \sim (m/M)\varepsilon$. Тогда для того, чтобы замедлиться от энергии ε_0 до ε , нейтрону потребуется испытать число соударений N , определяемое из соотношения $(1 - m/M)^N \sim \varepsilon/\varepsilon_0$, т. е. $N \sim (M/m) \ln(\varepsilon_0/\varepsilon)$.

Если длина свободного пробега равна λ , то вероятность $P(r)$ оказаться на расстоянии r за N шагов длиной λ в результате случайного блуждания пропорциональна

$$P(r) \sim \exp\left(-\frac{3r^2}{2N\lambda^2}\right) = \exp\left(-\frac{3r^2}{2\lambda^2(M/m) \ln(\varepsilon_0/\varepsilon)}\right)$$

Эта же величина определяет и распределение числа нейтронов по энергии с точностью до предэкспоненциального множителя.

Описание замедления нейтронов с помощью уравнения Фоккера - Планка.

Для количественного описания процесса замедления нейтронов рассмотрим кинетическое уравнение для функции распределения нейтронов $f(\vec{r}, \vec{p})$ по импульсам $\vec{p}$ и координатам $\vec{r}$ в стационарном случае при отсутствии внешних полей:

$$\vec{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} = \int d^3 \vec{p}_1 [w(\vec{p}, \vec{p}_1) f(\vec{p}_1) - w(\vec{p}_1, \vec{p}) f(\vec{p})] \quad (661)$$

где $w(\vec{p}_1, \vec{p}) d^3 \vec{p}_1$ - вероятность рассеяния в единицу времени нейтрона из состояния с импульсом $\vec{p}$ в состояние с импульсом $\vec{p}_1$ в интервале $d^3 \vec{p}_1$.

При рассеянии нейтронов на тяжелых ядрах с массой $M \gg m$ относительное изменение энергии нейтрона мало, и если им вовсе пренебречь, то в правой части в интеграле столкновений надо положить $|\vec{p}_1| = |\vec{p}|$. В этом случае вероятность рассеяния $w(\vec{p}_1, \vec{p})$ симметрична относительно перестановки импульсов и интеграл столкновений I_0 принимает вид

$$I_0[f] = \int d^3 \vec{p}_1 w(\vec{p}_1, \vec{p}) [f(\vec{p}_1) - f(\vec{p})] \quad (662)$$

Ищем решение кинетического уравнения в виде

$$f(\vec{r}, \vec{p}) = f_0(\vec{r}, |\vec{p}|) + g(\vec{r}, \vec{p}) \quad (663)$$

где f_0 зависит лишь от модуля импульса, и, следовательно, $I_0[f_0] = 0$, а g является малой поправкой. Получающемуся кинетическому уравнению

$$\vec{v} \cdot \frac{\partial f_0}{\partial \vec{r}} = \int d^3 \vec{p}_1 w(\vec{p}_1, \vec{p}) [g(\vec{p}_1) - g(\vec{p})] \quad (664)$$

удовлетворяет функция

$$g(\vec{r}, \vec{p}) = -\vec{v} \cdot \frac{\partial f_0}{\partial \vec{r}} \tau(|\vec{p}|) \quad (665)$$

где

$$\tau^{-1}(|\vec{p}|) = \int d^3 \vec{p}_1 w(\vec{p}_1, \vec{p}) [1 - \cos \theta] \quad (666)$$

а θ - угол между импульсами $\vec{p}$ и $\vec{p}_1$. По порядку величины τ - время свободного пробега нейтрона между столкновениями.

Поскольку нас интересует функция распределения нейтронов $f(\vec{r}, \varepsilon)$ по энергиям ε и координатам $\vec{r}$, в кинетическом уравнении (661) нужно усреднить функцию $f(\vec{r}, \vec{p})$ по всем направлениям импульсов:

$$f(\vec{r}, \varepsilon) = \langle f(\vec{r}, \vec{p}) \rangle = \int \frac{d\Omega_p}{4\pi} f(\vec{r}, \vec{p}) \quad (667)$$

Тогда при усреднении в левой части кинетического уравнения от члена $\langle \vec{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} \rangle$ останется лишь вклад от g :

$$\langle \vec{v} \cdot \frac{\partial g}{\partial \vec{r}} \rangle = \langle \vec{v} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{r}} (-\tau \vec{v} \cdot \frac{\partial f_0}{\partial \vec{r}}) \rangle = -\tau v^2 \frac{\partial^2 f_0}{\partial r_i \partial r_j} \int \frac{d\Omega_p}{4\pi} \frac{p_i p_j}{p^2} = -\frac{\tau v^2}{3} \frac{\partial^2 f_0}{\partial r^2}.$$

Представив вероятность перехода в единицу времени $w(\vec{p}_1, \vec{p}) d^3 \vec{p}_1 = v N d\sigma$, где N - плотность числа рассеивающих нейтроны ядер, $d\sigma$ - дифференциальное сечение рассеяния, выражение для τ можно переписать в виде

$$\tau^{-1}(|\vec{p}|) = \int d^3 \vec{p}_1 w(\vec{p}_1, \vec{p}) [1 - \cos \theta] = \int v N d\sigma [1 - \cos \theta] = v N \sigma_{tr} \equiv \frac{v}{\lambda} \quad (669)$$

где величину $\sigma_{tr} \equiv \int d\sigma [1 - \cos \theta]$ называют транспортным сечением столкновений, а $\lambda \equiv 1/N\sigma_{tr}$ - длина свободного пробега нейтрона. Тогда коэффициент диффузии нейтронов D равен $\tau v^2/3 = \lambda v/3$.

Учтем теперь в интеграле столкновений небольшое изменение энергии нейтрона при рассеянии на тяжелых ядрах ($\Delta\varepsilon/\varepsilon \sim m/M$). Для этого выделим явно из вероятности перехода $w(\vec{p}_1, \vec{p})$ дельтафункцию, учитывающую законы сохранения энергии и импульса при упругом рассеянии нейтрона на ядрах:

$$w(\vec{p}_1, \vec{p}) = W \delta(\varepsilon - \varepsilon' - \Delta), \quad w(\vec{p}, \vec{p}_1) = W \delta(\varepsilon - \varepsilon' + \Delta), \quad (670)$$

где $\Delta = (\vec{p} - \vec{p}_1)^2/2M$ - энергия отдачи ядра при рассеянии нейтрона, а W зависит от $|\vec{p}|$, $|\vec{p}_1|$ и θ - угла между импульсами и симметрична относительно перестановки $\vec{p}$ и $\vec{p}_1$. (Например, по теории возмущений

$$dw(\vec{p}_1, \vec{p}) = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle \vec{p}_1 | \hat{V} | \vec{p} \rangle \right|^2 \delta(\varepsilon_i - \varepsilon_f) d^3 \vec{p}_1, \quad (671)$$

где $\hat{V}$ - рассеивающий потенциал ядра, $\varepsilon_i, \varepsilon_f$ - начальная и конечная энергия системы "нейтрон + ядро".)

Тогда часть интеграла столкновений I_1 , связанная с изменением энергии нейтрона при рассеянии, есть

$$I_1 = \int d^3 \vec{p}_1 W [-f_0(\varepsilon) \delta(\varepsilon - \varepsilon' - \Delta) + f_0(\varepsilon') \delta(\varepsilon - \varepsilon' + \Delta)] \quad (672)$$

Здесь в функции распределения взят только основной вклад f_0 . Разлагая выражение в квадратных скобках по малому параметру Δ , получаем

$$I_1 = \int d^3\vec{p}_1 W \Delta \left[2f_0(\varepsilon) \delta'(\varepsilon - \varepsilon') + \frac{\partial f_0(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \delta(\varepsilon - \varepsilon') \right] \quad (673)$$

Первый член запишем как

$$\begin{aligned} 2f_0 \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \int d^3\vec{p}_1 W \Delta \delta(\varepsilon - \varepsilon') - 2f_0 \int d^3\vec{p}_1 W \delta(\varepsilon - \varepsilon') \frac{\partial \Delta}{\partial \varepsilon} = \\ = 2f_0 \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \left[\frac{2m\varepsilon v}{M \lambda} \right] - 2f_0 \frac{m v}{M \lambda} = \frac{4f_0 m v}{M \lambda} \end{aligned} \quad (674)$$

где использовано $v = \sqrt{2\varepsilon/m}$ и $\delta(\varepsilon - \varepsilon') \Delta = \delta(\varepsilon - \varepsilon') \frac{2m\varepsilon}{M} (1 - \cos \theta)$, $\delta(\varepsilon - \varepsilon') \frac{\partial \Delta}{\partial \varepsilon} = \delta(\varepsilon - \varepsilon') \frac{m}{M} (1 - \cos \theta)$.

Второй член в I_1 дает вклад

$$\frac{\partial f_0(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \int d^3\vec{p}_1 W \Delta \delta(\varepsilon - \varepsilon') = \frac{\partial f_0(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \frac{2m\varepsilon v}{M \lambda} \quad (676)$$

Суммируя вклады, получаем

$$I_1 = \frac{2m}{M \lambda} \left(2f_0 v + v \varepsilon \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) = \frac{2\sqrt{2m}}{M \lambda} \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} \frac{\partial}{\partial \varepsilon} (f_0 \varepsilon^2) \quad (677)$$

Более общий способ приведения интеграла столкновений к дивергентному виду приведен в приложении.

Для стационарного распределения, с учетом $\lambda = \text{Const}$, $v = \sqrt{2\varepsilon/m}$, получаем

$$-\frac{\lambda}{3} \sqrt{\frac{2\varepsilon}{m}} \frac{\partial^2 f_0}{\partial r^2} = \frac{2\sqrt{2m}}{M \lambda} \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} \frac{\partial}{\partial \varepsilon} (f_0 \varepsilon^2) \quad (678)$$

После умножения этого уравнения на $\varepsilon^{3/2}$, имеем

$$-\frac{\lambda^2 M}{6 m} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (\varepsilon^2 f) = \varepsilon \frac{\partial}{\partial \varepsilon} (\varepsilon^2 f) \quad (679)$$

Вводя обозначения

$$q \equiv \varepsilon^2 f, \quad \tau \equiv \frac{\lambda^2 M}{6 m} \ln \frac{\varepsilon_0}{\varepsilon}, \quad (680)$$

где ε_0 - начальная энергия нейтрона, так что значение $\varepsilon = \varepsilon_0$ соответствует $\tau = 0$, получаем окончательно уравнение типа теплопроводности:

$$\frac{\partial q}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 q}{\partial r^2} \quad (681)$$

Начальному условию при $\tau = 0$ (т. е. $\varepsilon = \varepsilon_0$) $f(\varepsilon_0, r) \sim \delta(r)$ - точечный источник моноэнергетических нейтронов в начале координат - соответствует решение

$$q = A \exp \left(-\frac{r^2}{4\tau} \right) \quad (682)$$

Возвращаясь к исходным обозначениям, имеем

$$f(\varepsilon, r) = \frac{A}{\varepsilon^2} \exp \left[-\frac{3r^2}{2\lambda^2(M/m) \ln(\varepsilon_0/\varepsilon)} \right]. \quad (683)$$

Из этого выражения следует, что вероятность найти нейтрон с энергией ε заметно отлична от нуля на расстояниях, не превышающих

$$r_\varepsilon \sim \lambda \sqrt{\frac{M}{m} \ln(\varepsilon_0/\varepsilon)}. \quad (684)$$

Вблизи начала координат плотность потока нейтронов в единичном энергетическом интервале $\Phi(\varepsilon)$, равная произведению скорости на плотность числа нейтронов, есть

$$\Phi(\varepsilon) = f(\varepsilon)\rho(\varepsilon)v \sim \frac{1}{\varepsilon^2} \sqrt{\varepsilon} \sqrt{\varepsilon} \sim \frac{1}{\varepsilon} \quad (685)$$

что выражает хорошо известный "закон" Ферми.

Естественно, что гауссово распределение устанавливается на расстоянии от источника $r > \lambda$. Однако оно нарушается и на достаточно больших расстояниях, так как там доминируют нейтроны, пролетевшие расстояние r без столкновений, поскольку вероятность этого пропорциональна $\exp(-r/\lambda)$ и спадает гораздо медленнее гауссового распределения. Приравнявая показатели экспонент для этих двух распределений, получаем оценку максимального расстояния от источника, где еще применимо диффузионное приближение

$$r_{\max} \sim \lambda \frac{M}{m} \ln(\varepsilon_0/\varepsilon) \quad (686)$$

Отметим, что $r_{\max} \gg r_\varepsilon$ для $M \gg m, \varepsilon_0 \gg \varepsilon$.

Приложение

Полезно рассмотреть в общем виде вывод интеграла столкновений в "Фоккер-Планковской" форме. Обозначим функцию распределения по переменной x (которую пока не конкретизируем) через $f(x, t)$, нормированную условием

$$\int f(x, t) dx = 1 \quad (687)$$

Функции распределения в два момента времени связаны соотношением

$$f(x, t + \tau) = \int f(z, t) w(x, t + \tau; z, t) dz \quad (688)$$

где $w(x, t + \tau; z, t)$ - вероятность изменения переменной от значения z до значения x за время τ . Если вероятность перехода w быстро убывает с ростом $|z - x|$, подынтегральное выражение можно

разложить и для малых значений τ получается уравнение

$$\tau \frac{\partial f}{\partial t} \approx -\frac{\partial}{\partial x} \left(f(x, t) \int (z - x) w dz \right) + \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(f(x, t) \int \frac{(z - x)^2}{2} w dz \right) \quad (689)$$

Отметим, что в правой части этого уравнения оба члена имеют одинаковый порядок, поскольку величина $(z - x)$ в общем случае знакопеременная, а в подынтегральном выражении второго члена стоит положительная величина. Окончательно имеем уравнение типа Фоккера - Планка:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} [f(x, t) A(x)] + \frac{\partial^2}{\partial x^2} [f(x, t) B(x)] \quad (690)$$

где

$$A(x) = \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{\int (z - x) w dz}{\tau}, \quad B(x) = \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{\int (z - x)^2 w dz}{2\tau}. \quad (691)$$

В нашем случае мы используем нормировку

$$\int f_0(|\vec{p}|) d^3\vec{p} = \int f_0(\varepsilon) \rho(\varepsilon) d\varepsilon = 1 \quad (692)$$

где $\rho(\varepsilon)$ - плотность состояний, и поэтому уравнение Фоккера Планка в дивергентном виде, выражающем закон сохранения числа частиц, записывается для функции $f_0(\varepsilon)\rho(\varepsilon)$ и имеет вид

$$\frac{\partial f(\varepsilon, t) \rho(\varepsilon)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial \varepsilon} [f(\varepsilon, t) \rho(\varepsilon) A(\varepsilon)] + \frac{\partial^2}{\partial \varepsilon^2} [f(\varepsilon, t) \rho(\varepsilon) B(\varepsilon)] = -\frac{\partial j_\varepsilon}{\partial \varepsilon} \quad (693)$$

где плотность потока частиц в энергетическом пространстве j_ε есть

$$j_\varepsilon = f(\varepsilon, t) \rho(\varepsilon) A(\varepsilon) - \frac{\partial}{\partial \varepsilon} [f(\varepsilon, t) \rho(\varepsilon) B(\varepsilon)]. \quad (694)$$

Условие обращения j_ε в ноль в тепловом равновесии, когда $f \sim e^{-\varepsilon/T}$, дает связь коэффициентов A и B :

$$\rho(\varepsilon) A(\varepsilon) = \frac{\partial}{\partial \varepsilon} [\rho(\varepsilon) B(\varepsilon)] - \frac{\rho(\varepsilon) B(\varepsilon)}{T}. \quad (695)$$

Используя эту связь, уравнение Фоккера - Планка окончательно записывается в виде

$$\frac{\partial f(\varepsilon, t) \rho(\varepsilon)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \left[\rho(\varepsilon) B(\varepsilon) \left(\frac{f(\varepsilon)}{T} + \frac{\partial f(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right) \right] \quad (696)$$

Коэффициент диффузии в энергетическом пространстве при рассеянии нейтрона на тяжелых ядрах, имеющих максвелловское распределение по скоростям с температурой T , равен

$$B(\varepsilon) = \frac{1}{2} \left\langle \int (\varepsilon - \varepsilon')^2 N_0 v d\sigma(\varepsilon \rightarrow \varepsilon') \right\rangle \quad (697)$$

где $\langle \dots \rangle$ означает усреднение по максвелловскому распределению по скоростям ядер, на которых упруго рассеиваются нейтроны (N_0 - число ядер в единице объема); $d\sigma(\varepsilon \rightarrow \varepsilon')$ - дифференциальное сечение рассеяния для изменения энергии нейтрона от ε до ε' . Для вычисления величины $B(\varepsilon)$ рассмотрим столкновение нейтрона массой m с тяжелым ядром массой $M \gg m$. Из закона сохранения импульса

$$m\vec{v} + M\vec{V} = m\vec{v}' + M\vec{V}' \quad (698)$$

получим

$$V'^2 = V^2 + \frac{2m}{M} \vec{V} \cdot (\vec{v} - \vec{v}') + \frac{m^2}{M^2} (\vec{v} - \vec{v}')^2 \quad (699)$$

Пренебрегая последним членом при подстановке в закон сохранения энергии

$$\frac{mv^2}{2} + \frac{MV^2}{2} = \frac{mv'^2}{2} + \frac{MV'^2}{2} \quad (700)$$

получим

$$v^2 - v'^2 = \frac{M}{m} (V'^2 - V^2) \approx 2\vec{V} \cdot (\vec{v} - \vec{v}') \quad (701)$$

Откуда

$$(\varepsilon - \varepsilon')^2 \approx m^2 \left[\vec{V} \cdot (\vec{v} - \vec{v}') \right]^2 \quad (702)$$

Усредним это выражение сначала по максвелловской функции распределения f_0 по скоростям ядер

$$\int (\varepsilon - \varepsilon')^2 f_0 d\vec{V} = m^2 \left(\int V_i V_j f_0 d\vec{V} \right) (\vec{v} - \vec{v}')_i (\vec{v} - \vec{v}')_j = \frac{m^2 T}{M} (\vec{v} - \vec{v}')^2 \quad (703)$$

где $\int V_i V_j f_0 d\vec{V} = \delta_{ij}(T/M)$. Тогда, считая рассеяние нейтронов на тяжелых ядрах изотропным ($\cos \theta \sim m/M \ll 1$) и упругим, получим

$$B(\varepsilon) = \frac{1}{2} \left(\int (\vec{v} - \vec{v}')^2, N_0 v d\sigma(\varepsilon \rightarrow \varepsilon') \right) \frac{m^2 T}{M} \approx \frac{m^2 T}{M} v^3 \sigma N_0 = \frac{m^2 T v^3}{\lambda M} \quad (704)$$

где $\lambda = 1/(N_0 \sigma)$ - длина свободного пробега нейтрона, не зависящая от его энергии ε . Теперь, с учетом пространственной диффузии нейтронов, уравнение Фоккера - Планка при рассеянии нерелятивистских нейтронов ($\rho(\varepsilon) \sim \sqrt{\varepsilon}$) на неподвижных ядрах ($T \rightarrow 0$) принимает вид

$$\frac{\partial f(\varepsilon, r, t)}{\partial t} = \frac{\lambda v}{3} \Delta f(\varepsilon, r, t) + \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} \left(\frac{\partial}{\partial \varepsilon} \frac{\sqrt{\varepsilon} m^2 v^3 f(\varepsilon, r, t)}{\lambda M} \right) \quad (705)$$

эквивалентный использованному выше.

20.7.8 7. Smolukhovsky Equation for Polar Liquids

Задача

Найти диэлектрическую проницаемость полярной жидкости и декремент затухания электромагнитных волн.

Решение

Потенциальная энергия U молекулы жидкости с дипольным моментом p в электрическом поле E

$$U = -\vec{p} \cdot \vec{E} = -pE \cos \theta \quad (706)$$

поэтому уравнение Смолуховского для функции распределения $f(\theta)$ диполей по ориентациям имеет вид

$$\frac{\partial f(\theta, t)}{\partial t} = D \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left[\sin \theta \left(\frac{\partial f}{\partial \theta} + \frac{f}{T} \frac{\partial U}{\partial \theta} \right) \right] \quad (707)$$

где D - коэффициент диффузии по углам ориентации полярной молекулы. Для слабого поля ($pE \ll T$) функция распределения мало отличается от равновесного значения $f_0 = 1/4\pi$, поэтому ищем решение в виде $f = f_0 + f_1 \cos \theta$, где $f_1/f_0 \sim U/T$. Для периодически меняющегося электрического поля $E \sim e^{-i\omega t}$ из уравнения Смолуховского для $f_1 = a e^{-i\omega t}$ находим

$$(-i\omega) a \cos \theta = \frac{D}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left[-a \sin^2 \theta + \frac{pE}{4\pi T} \sin^2 \theta \right]. \quad (708)$$

Следовательно,

$$f_1 = \frac{DpE}{2\pi T(2D - i\omega)} e^{-i\omega t} \quad (709)$$

Дипольный момент единицы объема P равен

$$P = n\bar{p} = n \int_{-1}^{+1} p \cos \theta f_1 \cos \theta \frac{d \cos \theta}{2} = \frac{nDp^2 E e^{-i\omega t}}{6\pi T(2D - i\omega)} \quad (710)$$

где n - число молекул в единице объема. Диэлектрическая проницаемость равна

$$\varepsilon = 1 + \frac{4\pi P}{E} = 1 + \frac{2nDp^2}{3T(2D - i\omega)} \quad (711)$$

Для электромагнитной волны волновой вектор k связан с частотой ω соотношением $k = \sqrt{\varepsilon}\omega/c$. Тогда мнимая часть волнового вектора равна

$$\text{Im} k = \frac{nDp^2 \omega^2}{3cT(4D^2 + \omega^2)} \quad (712)$$

Характерная длина затухания l_d электромагнитной волны в полярной жидкости равна

$$l_d \sim \frac{1}{\text{Im} k} = \frac{3cT(4D^2 + \omega^2)}{nDp^2 \omega^2} \quad (713)$$

Для $\omega \gg D$

$$l_d \sim \frac{3cT}{nDp^2} \quad (714)$$

20.8 Seminars by Kolokolov 2

20.8.1 8. Evolution of a Globular Cluster of Stars

Задача

Шаровое скопление состоит из N гравитационно связанных звезд массы m , имеющих среднеквадратичную скорость v^2 . В результате взаимодействия звезд некоторые из них приобретают скорости, превышающие скорость вылета из скопления, и улетают (испаряются) из системы.

Используя теорему вириала, оценить скорость испарения звезд и эволюцию параметров скопления - характерного размера скопления $\bar{R}(t)$, числа звезд в скоплении $N(t)$, среднеквадратичной скорости $v^2(t)$.

Решение

Основной вклад в изменение импульса звезд дают столкновения с большими прицельными параметрами, поэтому эти изменения невелики и эволюция функции распределения звезд по импульсам описывается уравнением Фоккера - Планка. Однако это уравнение не имеет простого аналитического решения и мы рассмотрим упрощенную качественную кинетику эволюции шарового скопления звезд.

В гравитационно связанных звездных системах состояние полного статистического равновесия не достигается, что проявляется в испарении звезд из системы. Скорость испарения можно оценить как

$$\frac{dN}{dt} = -\alpha \frac{N}{\tau} \quad (715)$$

где α - доля звезд, имеющих скорости больше параболической, τ - время релаксации.

Величина α существенно зависит от детального распределения плотности числа звезд в скоплении. Приведем грубую оценку α . По теореме вириала для гравитационно связанной системы $\bar{U} = -2\bar{T}$, где $\bar{U} = GN^2m^2/\bar{R}$ - средняя потенциальная энергия, $\bar{T} = Nmv^2/2$ - средняя кинетическая энергия. Откуда $v^2 = GNm/\bar{R}$. Обозначим среднюю кинетическую энергию на одну звезду, необходимую для ее удаления из скопления $mv_p^2/2$. Эта величина должна быть равна изменению потенциальной энергии скопления после удаления одной звезды:

$$\delta \left(\frac{GN^2m^2}{\bar{R}} \right) = -\frac{2\bar{U}}{N} \quad (716)$$

поскольку энергия улетающей звезды на бесконечности близка к нулю. Таким образом,

$$\frac{mv_p^2}{2} = -\frac{2\bar{U}}{N} = \frac{4\bar{T}}{N} = \frac{4mv^2}{2} \quad (717)$$

и параболическая скорость $v_p = 2v$. Тогда, предполагая, что распределение звезд по скоростям является максвелловским, получим

$$\alpha = \frac{\int_{v_p}^{\infty} \exp(-\gamma u^2) u^2 du}{\int_0^{\infty} \exp(-\gamma u^2) u^2 du} \approx 0,007 \quad (718)$$

где $\gamma = 3/2v^2$. Поскольку доля испаряющихся звезд мала, можно ожидать, что использование равновесного максвелловского распределения по скоростям звезд не приводит к заметным погрешностям.

Оценим теперь время релаксации τ . Рассмотрим столкновение двух звезд (1) и (2) в системе покоя звезды (2).

Если найти изменение кинетической энергии звезды в единицу времени $d\Delta\varepsilon_1/dt$, то время релаксации τ можно оценить как $\tau = \varepsilon_1/(d\Delta\varepsilon_1/dt)$. При одном столкновении

$$\Delta\varepsilon_1 = \frac{\Delta p_2^2}{2m} = \frac{(F\Delta t)^2}{2m} \sim \frac{G^2m^3}{r^2v^2} \quad (719)$$

где $F = Gm^2/r^2$. Суммируя по числу столкновений за единицу времени и по всем прицельным параметрам, получим

$$\frac{d\Delta\varepsilon_1}{dt} \sim vn \int \frac{G^2m^3}{r^2v^2} 2\pi r dr \sim \frac{nG^2m^3}{v} 2\pi \ln \frac{r_{\max}}{r_{\min}} \quad (720)$$

где $n = N/\bar{R}^3$ - плотность числа звезд в скоплении, $r_{\max} \sim \bar{R}$ - максимальный прицельный параметр. Минимальный прицельный параметр оцениваем из условия, что при $r = r_{\min}$ изменение импульса порядка самого значения импульса звезды $F\Delta t \sim mv$. Откуда $r_{\min} \sim Gm/v^2$. Окончательно

$$\tau \sim \frac{v^3 \bar{R}^3}{NG^2m^2 \ln N} \approx \frac{N\bar{R}}{v \ln N} \quad (721)$$

Сравним время релаксации τ с характерным динамическим временем пролета звезды по всему скоплению $t_d \sim \bar{R}/v$:

$$\frac{\tau}{t_d} = \frac{N}{\ln N} \gg 1 \quad (722)$$

Эта оценка показывает, что звезда много раз проходит по всему скоплению, прежде чем покинуть его, что гарантирует применимость теоремы вириала.

Найдем изменение параметров скопления за время $t \geq \tau$, вызванного испарением звезд. Из теоремы вириала следует, что полная энергия E есть

$$E = \bar{T} + \bar{U} = \frac{1}{2}\bar{U} = -\frac{GN^2m^2}{2\bar{R}} \quad (723)$$

Откуда изменение энергии со временем $\dot{E}$ равно

$$\dot{E} = -\frac{GN\dot{N}m^2}{\bar{R}} + \frac{GN^2m^2\dot{\bar{R}}}{2\bar{R}^2} \quad (724)$$

Следовательно,

$$\frac{\dot{E}}{E} = \frac{2\dot{N}}{N} - \frac{\dot{\bar{R}}}{\bar{R}} \quad (725)$$

При испарении звезды улетают из скопления с энергией, близкой к нулевой, поэтому $\dot{E} = 0$ и из

$$\frac{2\dot{N}}{N} = \frac{\dot{\bar{R}}}{\bar{R}} \quad (726)$$

следует

$$\frac{N^2(t)}{N_0^2} = \frac{\bar{R}(t)}{\bar{R}_0}, \quad v^2(t) = \frac{GNm}{\bar{R}} = v^2(0) \frac{N_0}{N(t)}. \quad (727)$$

Тогда из (721) для времени релаксации имеем

$$\tau = \tau_0 \left(\frac{N(t)}{N_0} \right)^{7/2} \frac{1}{\ln(N(t)/N_0)} \quad (728)$$

Интегрируя уравнение для скорости испарения звезд (715), пренебрегая слабой логарифмической зависимостью, получаем закон уменьшения числа звезд и характерного размера скопления:

$$N(t) = N_0 \left(1 - \frac{7\alpha}{2\tau_0} t \right)^{2/7}, \quad \bar{R}(t) = \bar{R}_0 \left(1 - \frac{7\alpha}{2\tau_0} t \right)^{4/7} \quad (729)$$

тогда как плотность числа звезд и их среднеквадратичная скорость растут как

$$n(t) = \frac{n_0}{\left(1 - \frac{7\alpha}{2\tau_0} t \right)^{10/7}}, \quad v^2(t) = \frac{v^2}{\left(1 - \frac{7\alpha}{2\tau_0} t \right)^{2/7}} \quad (730)$$

Из-за роста плотности числа звезд следует принять во внимание возможность непосредственного столкновения звезд. Число звезд, столкнувшихся за единицу времени, определяется как

$$\dot{N}_{col} = \frac{N}{t_{col}} = Nvn\sigma = \frac{N^2v\pi r_*^2}{\bar{R}^3} \quad (731)$$

где r_* - удвоенный радиус звезды (гравитационной фокусировкой пренебрегаем). Время между столкновениями звезд изменяется с изменением размера скопления как

$$t_{col}(t) = \frac{1}{nv\sigma} = t_{col}(0) \left(\frac{\bar{R}(t)}{\bar{R}(0)} \right)^{11/7} \quad (732)$$

тогда как время релаксации из (728) равно

$$\tau(t) \approx \tau_0 \left(\frac{\bar{R}(t)}{\bar{R}_0} \right)^{7/4} \quad (733)$$

Отсюда следует, что на более поздней стадии эволюция звездного скопления будет определяться непосредственным столкновением звезд. Приравнявая время релаксации τ ко времени между столкновениями t_{col} , найдем размер скопления R_{col} , для которого начинают доминировать столкновения

$$\frac{N\bar{R}}{v \ln N} = \frac{1}{nv\sigma}, \quad (734)$$

откуда

$$\frac{N^2}{R_{col}^2 \ln N} = \frac{1}{\pi r_*^2}, \quad (735)$$

следовательно,

$$R_{col} = r_* \frac{N(t)}{\ln^{1/2} N(t)} \quad (736)$$

Этот размер довольно мал.

20.8.2 9. Teapot Theory

В качестве конкретного примера кинетики фазовых переходов 1-го рода рассмотрим кипение чистой жидкости.

Для процесса кипения в поле тяжести важную роль играет всплывание пузырьков из-за градиента давления в жидкости. Всплывающие пузырьки переносят энергию, поэтому вместе с двумерным кинетическим уравнением, описывающим изменение функции распределения по размерам пузырьков и их высоте, следует использовать уравнение, описывающее перенос энергии.

Задача

Найти изменение температуры перегретой жидкости в невесомости.

Решение

Рассмотрим эволюцию функции распределения $f(r, t)$ по размерам пузырьков r без силы тяжести:

$$\frac{\partial f(r, t)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial r} \left[\frac{dr}{dt} f(r, t) \right] = 0 \quad (737)$$

При слабом перегреве жидкости критический размер r_c зародышей новой фазы - пузырьков - является большим по сравнению с размерами молекул и в кинетическом уравнении можно пренебречь диффузией по размерам пузырьков, радиус которых не очень близок к критическому.

Скорость роста размера пузырька dr/dt определяется из микроскопического описания потока частиц внутри пузыря. Результирующая плотность потока частиц j в пузырек определяется как разность плотности потока частиц с поверхности жидкости j_1 и из газовой фазы j_2 :

$$j_1 = \frac{\beta}{4} \bar{v} n_0 \quad (738)$$

где β - коэффициент конденсации, $\bar{v} = \sqrt{8T/\pi m}$ - средняя тепловая скорость молекул пара массой m , n_0 - плотность насыщенного пара при данной температуре T . Плотность потока частиц из газовой фазы

$$j_2 = \frac{\beta}{4} \bar{v} n \quad (739)$$

n - плотность молекул пара в пузырьке. Таким образом,

$$j = \frac{\beta}{4} \bar{v} (n_0 - n) \quad (740)$$

Полный поток частиц I выразим через давление пара:

$$I = 4\pi r^2 j = \frac{\pi r^2 \beta \bar{v}}{T} (P_0 - P_r) = \frac{\pi r^2 \beta \bar{v}}{T} \left(\delta P - \frac{2\sigma}{r} \right) \quad (741)$$

где мы использовали выражение для давления пара в пузырьке $P_r = P_0 - \delta P + 2\sigma/r$, P_0 - равновесное давление насыщенного

пара, σ - коэффициент поверхностного натяжения, δP - отклонение от равновесного давления, определяемое степенью перегрева жидкости.

С другой стороны, полный поток частиц определяется выражением

$$I = \frac{d}{dt} N = \frac{d}{dt} \frac{4\pi r^3 n}{3} = \frac{d}{dt} \frac{4\pi r^3 P_0}{3T} \quad (742)$$

Приравнявая эти два выражения для I , получаем скорость роста радиуса пузырька

$$\frac{dr}{dt} = \frac{\beta \bar{v}}{4} \left(\frac{\delta P}{P_0} - \frac{2\sigma}{P_0 r} \right) \equiv A \left(\Delta - \frac{R_0}{r} \right). \quad (743)$$

Здесь введены обозначения $A = \beta \bar{v}/4$, $\Delta = \delta P/P_0$ - степень отклонения от равновесия, $R_0 = 2\sigma/P_0$.

Связь величины Δ с перегревом δT находится из уравнения Клайперона - Клаузиуса:

$$\frac{\delta P}{\delta T} = \frac{\delta S}{\delta V} = \frac{\lambda P}{NT^2} \rightarrow \Delta = \frac{\delta P}{P} = \frac{q \delta T}{T^2}, \quad (744)$$

где $q = \lambda/N$ - скрытая теплота перехода, отнесенная к одной частице.

Изменение потенциала Гиббса $\Delta\Phi$ при переходе n частиц в новую фазу равно

$$\delta\Phi = -|\Delta\mu|n + 4\pi r^2 \sigma, \quad (745)$$

где

$$|\Delta\mu|n = v_g \delta P \frac{4\pi r^3}{3v_g} \quad (746)$$

где v_g - объем, приходящийся на одну молекулу в газовой фазе. Значение критического размера пузырька находится из условия экстремума потенциала Гиббса:

$$\frac{\partial}{\partial r} \delta\Phi = -\delta P 4\pi r_c^2 + 8\pi \sigma r_c = 0, \text{ откуда } r_c = \frac{2\sigma}{\delta P} \quad (747)$$

Таким образом,

$$\delta\Phi = 4\pi\sigma \left(r^2 - \frac{2r^3}{3r_c} \right) = \frac{4\pi r_c^3}{3} \left(1 - 3(r - r_c)^2 - \frac{2(r - r_c)^3}{r_c} \right) \equiv \varepsilon \quad (748)$$

есть энергия пузырька - минимальная работа, которую нужно совершить для образования пузырька радиуса r .

Пусть в начальный момент мы перегрели жидкость на δT и пузырьки имеют распределение по размерам, описываемое некой заданной функцией. Найдем теперь, как будет меняться температура жидкости, если ее теплоизолировать в отсутствие поля тяжести.

Полная энергия E определяется выражением

$$E = CT + \int dr \varepsilon f(r, t) \quad (749)$$

где первый член - энергия жидкости с теплоемкостью C , которую считаем постоянной для небольшой степени перегрева; второй член - энергия пузырьков. Из условия теплоизолированности получаем уравнение

$$\begin{aligned} 0 &= C \frac{dT}{dt} + \int dr \varepsilon \frac{\partial f(r, t)}{\partial t} = C \frac{dT}{dt} - \int dr \varepsilon \frac{\partial}{\partial r} \left(f \frac{dr}{dt} \right) = \\ &= C \frac{dT}{dt} + \int dr f \frac{dr}{dt} \frac{\partial \varepsilon}{\partial r} \end{aligned} \quad (750)$$

где мы использовали кинетическое уравнение и один раз проинтегрировали по частям с учетом, что $\varepsilon f dr / dt|_0^\infty = 0$. Используя выражения для энергии и скорости роста пузырьков, получим

$$\frac{dr}{dt} \frac{\partial \varepsilon}{\partial r} = A\Delta \left(1 - \frac{r_c}{r} \right) 8\pi\sigma \left(r - \frac{r^2}{r_c} \right) = -\frac{8\pi\sigma A\Delta}{r_c} (r - r_c)^2 \quad (751)$$

Подставляя это выражение в предыдущее уравнение, находим скорость изменения температуры жидкости:

$$\frac{dT}{dt} = \frac{1}{C} \int dr f \frac{8\pi\sigma A\Delta}{r_c} (r - r_c)^2 > 0 \quad (752)$$

Это означает, что появившиеся в перегретой жидкости пузырьки как при схлопывании (для пузырьков с $r < r_c$), так и при росте (для $r > r_c$) выделяют энергию и разогревают окружающую жидкость. Здесь наблюдается качественное отличие от эволюции зародышей (капелек жидкости) при конденсации, в процессе которой зародыши с $r > r_c$ уменьшают степень отклонения от равновесия (концентрацию пересыщенного пара), а с $r < r_c$ - увеличивают.

Получим теперь критерий, определяющий условие пренебрежимости диффузией по размерам пузырьков в кинетическом уравнении.

С учетом диффузии поток j_r в пространстве размеров пузырьков определяется выражением

$$j_r = f \frac{dr}{dt} + D_r \frac{\partial f}{\partial r} \quad (753)$$

Коэффициент диффузии D_r по размерам пузырьков находится из условия, что для равновесной функции распределения f_0 поток $j_r = 0$. Поскольку

$$f_0 \sim \exp \left(-\frac{\delta\Phi}{T} \right) \sim \exp \left(\frac{4\pi\sigma}{T} (r - r_c)^2 \right) \quad (754)$$

то мы имеем

$$D_r = \frac{dr/dt}{\partial \ln f_0 / \partial r} = \frac{T dr/dt}{8\pi\sigma(r-r_c)} \quad (755)$$

Теперь условие пренебрежимости диффузионным членом в потоке можно записать в виде

$$\left| f \frac{dr}{dt} \right| \gg D_r \frac{\partial f}{\partial r}, \text{ откуда } |r-r_c| \gg \frac{T}{8\pi\sigma} \frac{1}{f} \frac{\partial f}{\partial r}. \quad (756)$$

Оценивая $\frac{1}{f} \frac{\partial f}{\partial r}$ как $1/r_c$, так как именно вблизи r_c существенна диффузия, получаем критерий возможности ею пренебречь:

$$\left| \frac{r-r_c}{r_c} \right| \gg \frac{T}{8\pi\sigma r_c^2} \quad (757)$$

Для воды при $r_c = 10^{-5}$ см получаем $|(r-r_c)/r_c| \gg 10^{-7}$; даже для $r_c = 10^{-7}$ см получаем $|(r-r_c)/r_c| \gg 10^{-3}$.

Таким образом, только для очень малой окрестности r_c важен учет диффузионного члена в кинетическом уравнении.

Задача

Найти стационарную функцию распределения пузырьков в перегретой жидкости, находящейся в поле тяжести. Жидкость подогревается снизу, степень перегрева считать постоянной.

Решение

Рассмотрим теперь более реальную ситуацию, когда жидкость находится в поле тяжести, тепло подается ко дну сосуда и уходит через верхнюю границу поверхности жидкости. Пузырьки рождаются на дне с достаточно произвольным распределением по размерам (определяемым шероховатостью дна, адсорбированным на дне газом и т. д.) и всплывают вверх со скоростью dz/dt , определяемой равенством сил Стокса $F_C \sim r dz/dt$ и Архимеда $F_A \sim r^3$, т. е.

$$\frac{dz}{dt} = \alpha r^2 \quad (758)$$

где α - константа. Теперь эволюция функции распределения по размерам и высоте пузырьков описывается кинетическим уравнением (диффузией пренебрегаем)

$$\frac{\partial f(z, r, t)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z} \left[\frac{dz}{dt} f(z, r, t) \right] + \frac{\partial}{\partial r} \left[\frac{dr}{dt} f(r, t) \right] = 0 \quad (759)$$

а постоянство потока тепла Q записывается в виде (пренебрегая теплопроводностью жидкости и уходом тепла через боковые стенки)

$$Q = \int dr f(r) \varepsilon(r) \frac{dz}{dt} = \text{Const.} \quad (760)$$

Для стационарного кипения, предполагая, что степень перегрева жидкости (и, следовательно, величины Δ и r_c) не зависит от высоты, получаем из (743) и (758), что $dr/dt = A\Delta(1-r_c/r)$ и $dz/dt = \alpha r^2$ не зависят от z . Обозначим

$$u(r) = \frac{dr/dt}{dz/dt} = \frac{A\Delta}{\alpha r^2} \left(1 - \frac{r_c}{r}\right) \quad (761)$$

Тогда стационарным решением (759) является

$$f(z, r) = \frac{1}{A\Delta(1 - r_c/r)} F\left(z - \int_0^r \frac{dr'}{u(r')}\right) \quad (762)$$

Здесь функция F определяется начальной функцией распределения по размерам пузырьков при $z = 0$, т. е. на дне

$$F\left(-\int_0^r \frac{dr'}{u(r')}\right) = A\Delta(1 - r_c/r) f(0, r) \quad (763)$$

Это начальное значение для фиксированного начального размера пузырька r_0 переносится вдоль характеристик:

$$z - \int_0^r \frac{dr'}{u(r')} = \text{Const} = -\int_0^{r_0} \frac{dr'}{u(r')} \quad (764)$$

Для $r_0 < r_c$, используя выражение для $u(r)$, получаем

$$z = \int_r^{r_0} \frac{\alpha r'^3 dr'}{A\Delta(r_c - r')} = \frac{\alpha r_c^3}{A\Delta} \int_{r/r_c}^{r_0/r_c} \frac{x^3 dx}{1 - x} \quad (765)$$

Отсюда следует, что с ростом высоты z радиус пузырька r должен уменьшаться и он схлопывается на типичной высоте

$$z \sim \frac{\alpha r_c^3}{A\Delta} \quad (766)$$

Для $r_0 > r_c$ получаем

$$z = \frac{\alpha r_c^3}{A\Delta} \int_{r_0/r_c}^{r/r_c} \frac{x^3 dx}{x - 1} \approx \frac{\alpha r_c^3}{A\Delta} \left(\frac{r}{r_c}\right)^3 \quad (767)$$

т. е. для $r \gg r_c$ асимптотически радиус пузырька растет с высотой как

$$r \sim z^{1/3} \quad (768)$$

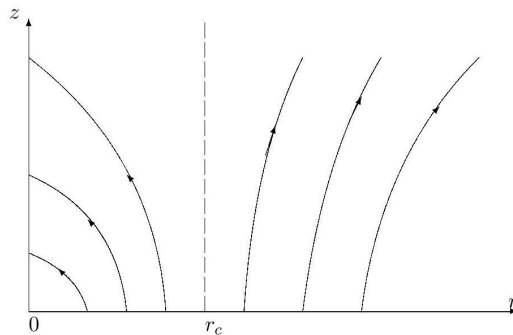


Рис. 14. Качественная картина эволюции пузырьков при всплывании. Пузырьки, радиус r которых меньше критического (r_c), схлопываются на конечной высоте. Пузырьки, радиус r которых больше критического, растут

Качественно картина кипения в рассматриваемом приближении такова: при небольшой степени перегрева критический размер пузырьков большой и образовавшиеся на дне пузырьки в основном схлопываются при всплывании (рис. 14). По мере роста перегрева значение критического радиуса падает и уже заметное число пузырьков при всплывании увеличивают свои размеры. Наконец, при сильной степени перегрева подавляющее число пузырьков растёт и происходит бурное кипение жидкости.

В общем случае степень перегрева Δ и, следовательно, критический радиус пузырьков r_c меняются с высотой z . Получающаяся в результате система уравнений при произвольном значении параметров требует численного анализа, однако можно качественно рассмотреть асимптотический режим кипения, в котором основной поток тепла переносится пузырьками. Для стационарной функции распределения $f(r, z)$ ищем автомодельное (скейлинговое) решение в виде

$$f(r, z) = r_c^\gamma(z) F[r/r_c(z)] \quad (769)$$

предполагая, что зависимость от высоты z заключена в критическом размере пузырьков $r_c(z)$. Теперь условие $Q = \text{Const}$ позволяет определить показатель γ в скейлинговом решении.

20.8.3 10. The Glauber Model

Задача

Найти среднее значение спина, взаимодействующего с термостатом.

Решение

Рассмотрим релаксацию параметра порядка в рамках микроскопической модели Глаубера для изинговских спинов.

Для начала рассмотрим один спин S , который может принимать два значения $S = +1$ и $S = -1$, взаимодействующий с термостатом. Если обозначить через w вероятность переворота спина в единицу времени, то для вероятности $p(S, t)$ найти спин в состоянии S в момент времени t можно написать кинетическое уравнение

$$\frac{d}{dt}p(S, t) = -wp(S, t) + wp(-S, t) \quad (770)$$

Для среднего значения спина

$$\langle S(t) \rangle = \sum_{S=\pm 1} S \cdot p(S, t) = p(1, t) - p(-1, t) \quad (771)$$

получаем уравнение

$$\frac{d}{dt}\langle S(t) \rangle = -w \sum_{S=\pm 1} S \cdot p(S, t) + w \sum_{S=\pm 1} S \cdot p(-S, t) = -2w\langle S(t) \rangle \quad (772)$$

Таким образом,

$$\langle S(t) \rangle = \langle S(0) \rangle e^{-2wt} \quad (773)$$

т. е. время релаксации $\tau = 1/2w$.

Задача

Рассмотрим теперь систему из N изинговских спинов с гамильтонианом $H = -\sum_{n,l} J_{nl} S_n S_l$, взаимодействующих с термостатом. Найти $\langle S(t) \rangle$ в приближении среднего поля.

Решение

Кинетическое уравнение для вероятности $p(S_1, \dots, S_N)$ иметь конфигурацию $(S_1, \dots, S_N)$ записывается в виде

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} p(S_1, \dots, S_N, t) = & - \sum_{l=1}^N w(S_l \rightarrow -S_l) p(S_1, \dots, S_l, \dots, S_N, t) + \\ & + \sum_{l=1}^N w(-S_l \rightarrow S_l) p(S_1, \dots, -S_l, \dots, S_N, t), \end{aligned} \quad (774)$$

где $w(S_l \rightarrow -S_l)$ - вероятность переворота l -го спина в единицу времени из состояния S_l в состояние $-S_l$ за счет взаимодействия с термостатом. Можно найти соотношение между вероятностями переворота спинов, используя принцип детального равновесия:

$$w(S_l \rightarrow -S_l) p_0(S_1, \dots, S_l, \dots, S_N) = w(-S_l \rightarrow S_l) p_0(S_1, \dots, -S_l, \dots, S_N),$$

где $p_0(S_1, \dots, S_l, \dots, S_N)$ есть вероятность равновесной конфигурации с заданным значением спинов, которая пропорциональна

$$\exp(-\beta S_l h_l) \quad (776)$$

где $h_l = -\sum_m J_{lm} S_m$ - эффективное поле, действующее на l -й спин со стороны своего окружения, а β - обратная температура. Тогда получим

$$\frac{w(S_l \rightarrow -S_l)}{w(-S_l \rightarrow S_l)} = \frac{\exp(-\beta S_l h_l)}{\exp(+\beta S_l h_l)} = \frac{1 - S_l \tanh(\beta h_l)}{1 + S_l \tanh(\beta h_l)} \quad (777)$$

При отсутствии взаимодействия между спинами эффективное поле $h_l = -\sum_m J_{lm} S_m = 0$, тогда каждый спин независим и мы возвращаемся к предыдущему результату:

$$w(S_l \rightarrow -S_l) = w(-S_l \rightarrow S_l) = \frac{1}{2\tau} \quad (778)$$

Для ненулевого эффективного поля выберем вероятности перехода в простейшем виде:

$$w(S_l \rightarrow -S_l) = \frac{1}{2\tau} (1 - S_l \tanh(\beta h_l)) \quad (779)$$

чтобы из кинетического уравнения (774) для скорости изменения среднего значения спина $\langle S_l \rangle$ получить уравнение

$$\frac{d}{dt} \langle S_l(t) \rangle = -\frac{1}{\tau} \langle S_l(t) \rangle + \frac{1}{\tau} \langle \tanh(\beta h_l) \rangle, \quad (780)$$

которое в стационарном случае в приближении среднего поля воспроизводит известный результат. Действительно, в приближении среднего поля $h_l = J \langle S \rangle$, где $J = \sum_m J_{lm} S_m$. Тогда

$$\langle S_l \rangle = \langle S \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{S_l=\pm 1} S_l e^{-\beta H} = \tanh(\beta J \langle S \rangle) \quad (781)$$

где

$$Z = \sum_{S_i=\pm 1} e^{-\beta H} \quad (782)$$

Разлагая $\tanh(\dots)$ вблизи критической температуры T_c (считаем, что взаимодействие между спинами таково, что приводит к ферромагнитному упорядочиванию), где $\langle S \rangle$ мало, получим

$$\langle S \rangle = \sqrt{\frac{3(T_c - T)}{T_c}}, \quad T_c = J \quad (783)$$

Релаксация неравновесного значения $\langle S \rangle$ вблизи критической точки определяется уравнением

$$\begin{aligned} \tau \frac{d}{dt} \langle S(t) \rangle &\approx -\langle S(t) \rangle + \beta J \langle S(t) \rangle - \frac{1}{3} (\beta J \langle S(t) \rangle)^3 \approx \\ &\approx -\langle S(t) \rangle \left(1 - \frac{T_c}{T}\right) - \frac{1}{3} \langle S(t) \rangle^3 \end{aligned} \quad (784)$$

Линеаризуя это уравнение по малому отклонению $\langle S(t) \rangle$ от равновесного значения $\langle S \rangle_0$, найденному выше, получим для $T < T_c$

$$\tau \frac{d}{dt} (\langle S(t) \rangle - \langle S \rangle_0) \approx -\frac{2}{T_c} (T_c - T) (\langle S(t) \rangle - \langle S \rangle_0), \quad (785)$$

т. е. время релаксации τ_{rel} равно:

$$\tau_{rel} = \frac{\tau T_c}{2(T_c - T)} \quad (786)$$

Для $T > T_c$, где $\langle S \rangle_0 = 0$,

$$\tau \frac{d}{dt} \langle S(t) \rangle \approx -\frac{1}{T_c} (T - T_c) \langle S(t) \rangle, \quad (787)$$

т. е. время релаксации τ_{rel} записывается как

$$\tau_{rel} = \frac{\tau T_c}{(T - T_c)} \quad (788)$$

Видно, что времена релаксации при приближении к критической температуре стремятся к бесконечности (так называемое критическое замедление), что указывает на возможность существования макросостояний, отвечающих неполному равновесию при заданном неравновесном значении параметра порядка. При $T > T_c$ и $T < T_c$ релаксация $\langle S(t) \rangle$ имеет экспоненциальный характер. Однако при $T = T_c$ получаем

$$\tau \frac{d}{dt} \langle S(t) \rangle = -\frac{1}{3} \langle S(t) \rangle^3 \quad (789)$$

откуда

$$\langle S(t) \rangle = \frac{\langle S(0) \rangle}{(1 + \langle S(0) \rangle^2 t / 3\tau)^{1/2}} \quad (790)$$

т. е. релаксация в критической точке носит степенной характер.

В случае, если начальное значение средней намагниченности пространственно неоднородно, удобно перейти к фурье-компонентам.

В линейном приближении выше критической точки уравнение релаксации для фурье-компонент принимает вид

$$\tau \frac{d}{dt} \langle S_k(t) \rangle = - \left(1 - \frac{J_k}{T} \right) \langle S_k(t) \rangle, \quad (791)$$

где

$$\langle S_k(t) \rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{r}_l} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_l} S_l(t), \quad J_k = \frac{1}{N} \sum_{\vec{r}_l, \vec{r}_m} e^{-i\vec{k} \cdot (\vec{r}_l - \vec{r}_m)} J_{lm} \quad (792)$$

Типичная зависимость J_k для малых значений волнового вектора k имеет вид $J_k \approx J_0 (1 - k^2 R^2)$ (R - характерный радиус взаимодействия спинов). Время релаксации τ_k для $T > T_c$

$$\tau_k = \frac{\tau T_c}{(T - T_c) + T_c k^2 R^2} \quad (793)$$

велико для длинноволновых возмущений.

20.8.4 11. The Decay of the Metastable Phase

Задача

Для магнитной системы во внешнем магнитном поле h свободная энергия равна

$$F = \int d\mathbf{r} \left[\frac{a}{2} \phi^2 + \frac{c}{2} (\nabla \phi)^2 + \frac{u}{4} \phi^4 - h \phi \right] \quad (794)$$

где $a = 2\alpha(T - T_c)$ при $T < T_c$; c, u - Const. В отсутствие поля для однородной намагниченности свободная энергия имеет два одинаковых минимума при $\phi = \pm \phi_0 = \pm \sqrt{-a/u}$. При включении слабого поля значения свободной энергии в минимумах становятся разным и система должна в конце концов перейти в однородное состояние с наименьшей свободной энергией. Если в начальный момент система находилась чуть выше критической точки, а затем ее резко охладили в слабом внешнем магнитном поле, то

переход в термодинамически устойчивое состояние не происходит мгновенно. Сразу после охлаждения система разбивается на домены с разными значениями $\langle \phi \rangle = \pm \phi_0$, поскольку эти состояния являются локальными минимумами, и лишь за счет медленной эволюции система перейдет в состояние однородной намагниченности $\langle \phi \rangle = +\phi_0$.

Найти скорость роста границы домена с $\langle \phi \rangle = +\phi_0$ для одно-, двух- и трехмерной задачи, используя кинетическое уравнение

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -\Gamma \frac{\delta F}{\delta \phi}. \quad (795)$$

Решение

Перепишем кинетическое уравнение в виде

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -a\phi - u\phi^3 + c\Delta\phi + h \quad (796)$$

измеряя время в единицах $1/\Gamma$.

Сначала рассмотрим одномерную задачу и найдем скорость движения доменной стенки v ,

предполагая ее толщину много меньшей характерного размера доменов. Ищем решение в виде $\phi = \phi(\xi)$, где $\xi \equiv x - vt$. Тогда получаем уравнение

$$-v\phi' = -a\phi - u\phi^3 + c\phi'' + h, \quad (797)$$

где ' означает дифференцирование по ξ . Умножая на ϕ' и интегрируя по ξ в пределах от $-\infty$ до $+\infty$ (что эквивалентно интегрированию по x), получаем

$$-v \int_{-\infty}^{+\infty} (\phi')^2 dx = - \left(\frac{a}{2} \phi^2 + \frac{u}{4} \phi^4 - h\phi \right)_{-\infty}^{+\infty} + \left[\frac{c}{2} (\phi')^2 \right]_{-\infty}^{+\infty} \quad (798)$$

Используя граничные условия $\phi \rightarrow \pm\phi_0$, $d\phi/dx \rightarrow 0$ при $x \rightarrow \pm\infty$, находим

$$v = \frac{-2h\phi_0}{\int_{-\infty}^{+\infty} (\phi')^2 dx} \quad (799)$$

Знаменатель можно вычислить в приближении нулевого поля. Решением уравнения

$$c \frac{d^2\phi}{dx^2} = a\phi + u\phi^3 \quad (800)$$

с теми же граничными условиями является

$$\phi = \phi_0 \tanh \left(\sqrt{\frac{-a}{2c}} x \right) \quad (801)$$

Тогда получаем выражение для скорости движения доменной стенки

$$v = -h(2cu)^{1/2}a^{-1} \quad (802)$$

Рассмотрим теперь двумерный случай. Обозначим через R локальный радиус кривизны доменной стенки. Найдем скорость движения доменной стенки в этой области, считая $R \gg \lambda \sim \sqrt{-c/a}$ характерной толщины стенки. Теперь уравнение

$$\partial_t \phi = c\Delta\phi + f(\phi) \quad (803)$$

где введено обозначение $f(\phi) \equiv h - a\phi - u\phi^3$, записывается как

$$\partial_t \phi = \frac{c}{r} \frac{\partial \phi}{\partial r} + c \frac{\partial^2 \phi}{\partial r^2} + f(\phi). \quad (804)$$

Поскольку $\partial\phi/\partial r$ отлична от нуля только в области перехода шириной $\sim \lambda \ll R$, то уравнение принимает вид

$$\partial_t \phi \approx \frac{c}{R} \frac{\partial \phi}{\partial r} + c \frac{\partial^2 \phi}{\partial r^2} + f(\phi), \quad (805)$$

решение которого ищем в виде

$$\phi = \phi(r - v(R)t). \quad (806)$$

Получаем уравнение

$$- \left(v(R) + \frac{c}{R} \right) \phi' = c\phi'' + f(\phi), \quad (807)$$

совпадающее с одномерным случаем. Тогда скорость роста доменной стенки с радиусом кривизны R равна

$$v(R) = -\frac{c}{R} + \frac{h(2cu)^{1/2}}{|a|} \quad (808)$$

Видно, что для $R < R_c = (|a|c^{1/2}) / (h(2u)^{1/2})$ скорость роста отрицательна, тогда как области с $R > R_c$ будут расти. Это приведет к тому, что домен, в котором $\phi = \phi_0$, будет сглаживать свои границы, принимая форму круга. В трехмерном случае скорость движения доменной стенки находится аналогично, и результат имеет вид

$$v = -c \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right) + \frac{h(2cu)^{1/2}}{|a|} \quad (809)$$

где R_1, R_2 - главные радиусы кривизны.

20.8.5 12. Quantum Methods for Describing Reaction Kinetics

При описании процессов, в которых число частиц не сохраняется (как, например, в ядерных или химических реакциях), удобно использовать развитый в квантовой теории метод вторичного квантования. При этом вовсе не обязательно, чтобы рассматриваемая система была квантовой. Предлагаемый метод позволяет учитывать корреляции и флуктуации реагирующих частиц, а также дает возможность использовать приближенные методы теории возмущений, развитые в квантовой теории. Познакомимся с формализмом на простом примере ядерной реакции.

Задача

Пусть в начальный момент времени было некоторое количество ядер N_0 . Найти количество радиоактивных ядер n в момент времени t , образованных в результате облучения нейтронами с плотностью потока Φ . Радиоактивные ядра образуются из исходных в результате реакции захвата нейтрона с сечением σ :



а затем распадаются с постоянной распада λ .

Решение

Кинетическое уравнение для вероятности $P(n, t)$ найти в момент времени t определенное число ядер n имеет вид

$$\frac{\partial}{\partial t} P(n, t) = g[P(n-1, t) - P(n, t)] + \lambda[(n+1)P(n+1, t) - nP(n, t)],$$

где $g = \Phi\sigma N_0$ - скорость образования радиоактивных ядер (активация) при облучении нейтронами (уменьшением числа исходных ядер пренебрегаем, что можно сделать при временах облучения $t \ll 1/(\Phi\sigma)$); λ - скорость распада радиоактивных ядер. Первый член есть произведение вероятности $P(n-1, t)$ найти $n-1$ число радиоактивных ядер на вероятность g захвата нейтрона нерадиоактивным ядром в единицу времени и описывает переход из состояния с $n-1$ к состоянию с n радиоактивными ядрами. Аналогично второй член описывает переход $n \rightarrow n+1$ за счет активации. Третий член есть произведение вероятности $P(n+1, t)$ найти $n+1$ радиоактивное ядро на вероятность λ распада радиоактивного ядра в единицу времени на число имеющихся радиоактивных ядер и описывает переход из состояния с $n+1$ к состоянию с n радиоактивными ядрами. Последний член описывает переход $n \rightarrow n-1$ в результате распада.

Поскольку число ядер в результате активации и распада меняется, удобно описывать этот процесс с помощью операторов рождения $a^\dagger$ и уничтожения a . Состоянию системы, когда имеется n радиоактивных ядер, ставится в соответствие вектор состояния

$$|n\rangle = (a^\dagger)^n |0\rangle, \quad (812)$$

где вакуумное состояние $|0\rangle$ определяется условием $a|0\rangle = 0$ (и, следовательно, $\langle 0|a^\dagger = 0$). Операторы $a^\dagger, a$ являются бозе-операторами, подчиняющимися коммутационным соотношениям $[a, a^\dagger] = aa^\dagger - a^\dagger a = 1$.

В общем случае, даже если в некоторый момент времени было определенное число радиоактивных ядер, в последующие моменты из-за вероятностного характера процессов активации и рас-

пада можно указать лишь вероятность найти то или иное число ядер. Такую ситуацию удобно характеризовать вектором состояния $|\Psi(t)\rangle$, который определяется соотношением

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} P(n, t) (a^\dagger)^n |0\rangle \quad (813)$$

Уравнение, описывающее изменение этого вектора со временем, очень похоже на уравнение Шредингера, которое в нашем примере имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\partial}{\partial t} P(n, t) (a^\dagger)^n |0\rangle = \\ &= g \left[a^\dagger \sum_n P(n-1, t) (a^\dagger)^{n-1} |0\rangle - \sum_n P(n, t) (a^\dagger)^n |0\rangle \right] + \\ &+ \lambda \left[a \sum_n P(n+1, t) (a^\dagger)^{n+1} |0\rangle - a^\dagger a \sum_n P(n, t) (a^\dagger)^n |0\rangle \right] = \\ &= [g(a^\dagger - 1) + \lambda(a - a^\dagger a)] |\Psi(t)\rangle \end{aligned} \quad (814)$$

т. е.

$$\hat{H} = g(a^\dagger - 1) + \lambda(a - a^\dagger a) \quad (815)$$

и были использованы соотношения

$$a^\dagger a (a^\dagger)^n |0\rangle = n (a^\dagger)^n |0\rangle, \quad a (a^\dagger)^{n+1} |0\rangle = (n+1) (a^\dagger)^n |0\rangle, \quad (816)$$

которые получаются с помощью правил коммутации бозе-операторов. Формальное решение кинетического уравнения записывается в виде

$$|\Psi(t)\rangle = e^{\hat{H}t} |\Psi(0)\rangle \quad (817)$$

Нормировка вектора состояния достигается необычным для квантовой теории способом. Понятно, что $\langle \Psi(t) | \Psi(t) \rangle \neq \text{Const}$, поэтому, вспоминая, что $\sum_n P(n, t) = 1$, нужно найти такой вектор $\langle \alpha |$, чтобы выполнялось условие $\langle \alpha | (a^\dagger)^n |0\rangle = 1$ для любых n . Как легко проверить, $\langle \alpha | = \langle 0 | e^a$.

Среднее значение $\bar{F}$ произвольного оператора $\hat{F}(a, a^\dagger)$, отвечающего наблюдаемой величине, находится как

$$\bar{F} = \langle 0 | e^a \hat{F}(a, a^\dagger) |\Psi(t)\rangle = \langle 0 | e^a \hat{F}(a, a^\dagger) e^{\hat{H}t} |\Psi(0)\rangle. \quad (818)$$

Найдем $\bar{n}(t)$ - среднее значение числа радиоактивных ядер в момент времени t , при условии, что в начальный момент времени их не было, т. е. $|\Psi(0)\rangle = |0\rangle$. Оператор числа частиц $\hat{n} = a^\dagger a$, так что

$$\bar{n}(t) = \langle 0 | e^a (a^\dagger a) e^{\hat{H}t} | 0 \rangle = \langle 0 | e^a a e^{\hat{H}t} | 0 \rangle, \quad (819)$$

поскольку $\langle 0 | e^a a^\dagger = \langle 0 | e^a$.

Для вычисления $\bar{n}$ рассмотрим операторную функцию

$$\hat{a}(t) = e^{-\hat{H}t} a e^{\hat{H}t} \quad (820)$$

Дифференцируя ее по времени, получим

$$\frac{d\hat{a}(t)}{dt} = e^{-\hat{H}t} (a\hat{H} - \hat{H}a) e^{\hat{H}t} = e^{-\hat{H}t} (g - \lambda a) e^{\hat{H}t} = g - \lambda \hat{a}(t). \quad (821)$$

Решение этого уравнения ищем в виде $\hat{a}(t) = \hat{C}(t)e^{-\lambda t}$ и, с учетом начального условия $\hat{a}(t=0) = a$, находим

$$\hat{a}(t) = \frac{g}{\lambda} (1 - e^{-\lambda t}) + a e^{-\lambda t} \quad (822)$$

Тогда

$$a e^{\hat{H}t} | 0 \rangle = e^{\hat{H}t} \hat{a}(t) | 0 \rangle = \frac{g}{\lambda} (1 - e^{-\lambda t}) e^{\hat{H}t} | 0 \rangle, \quad (823)$$

и, с учетом нормировки $\langle 0 | e^a e^{\hat{H}t} | 0 \rangle = 1$, получаем

$$\bar{n}(t) = \frac{g}{\lambda} (1 - e^{-\lambda t}), \quad (824)$$

что очевидно. Однако напомним, что эта задача лишь знакомит с формализмом. Более удобно для вычисления средних значений $\bar{F}$ операторов вида $\hat{F}(a^\dagger, a)$ использовать формулу

$$\frac{\partial \bar{F}(t)}{\partial t} = \langle 0 | e^a [\hat{F}(a^\dagger, a), \hat{H}] |\Psi(t)\rangle \quad (825)$$

Для ее получения заметим, что из условия нормировки $\langle 0 | e^a |\Psi(t)\rangle = 1$ следует

$$\langle 0 | e^a \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = \langle 0 | e^a \hat{H} |\Psi(t)\rangle = 0 \quad (826)$$

и ввиду произвольности $|\Psi(t)\rangle$ получаем $\langle 0 | e^a \hat{H} = 0$.

Флуктуации числа ядер в стационарном состоянии находятся из уравнения

$$\frac{\partial \overline{n^2}(t)}{\partial t} = \langle 0 | e^a [\hat{n}^2, \hat{H}] |\Psi(t)\rangle \quad (827)$$

Используя коммутационные правила, имеем

$$\begin{aligned} [\hat{n}^2, \hat{H}] &= \hat{n}[\hat{n}, \hat{H}] + [\hat{n}, \hat{H}]\hat{n} = \hat{n}(ga^\dagger - \lambda a) + (ga^\dagger - \lambda a)\hat{n} = \\ &= g(a^\dagger + 2a^\dagger \hat{n}) - \lambda(-a + 2a\hat{n}) \end{aligned} \quad (828)$$

Тогда

$$\frac{\partial \overline{n^2}(t)}{\partial t} = g[1 + 2\bar{n}(t)] - \lambda[-\bar{n}(t) + 2\overline{n^2}(t)] \quad (829)$$

В стационарном состоянии получаем

$$\overline{n^2} = \frac{\bar{n}(2g + \lambda) + g}{2\lambda} = \bar{n} + \bar{n}^2. \quad (830)$$

Относительные флуктуации равны

$$\frac{\overline{n^2} - \bar{n}^2}{\bar{n}^2} = \frac{1}{\bar{n}} = \frac{\lambda}{g}. \quad (831)$$

Задача

Рассмотрим предельно упрощенную модель цепной реакции деления урана в ядерном реакторе. Будем интересоваться только нейтронами и условно запишем реакцию деления ими ядер урана (считая число ядер урана постоянным), реакцию спонтанного деления и реакцию поглощения нейтронов соответственно в виде



где G, g, λ - скорости соответствующих реакций (число превращений в единицу времени).

Найти число n нейтронов в момент времени t .

Решение

Кинетическое уравнение для вероятности $P(n, t)$ найти n нейтронов в момент времени t имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} P(n, t) = & G[(n-1)P(n-1, t) - nP(n, t)] + \\ & + g[P(n-1, t) - P(n, t)] + \lambda[(n+1)P(n+1, t) - nP(n, t)], \end{aligned} \quad (833)$$

где первый член есть произведение вероятности $P(n-1, t)$ найти $n-1$ нейтронов на вероятность G одному нейтрону вызвать реакцию деления в единицу времени на число имеющихся нейтронов $n-1$, в результате чего появляется n нейтронов. Другие члены имеют столь же очевидную физическую интерпретацию. Тогда уравнение для функции $|\Psi(t)\rangle = \sum_n P(n, t) (a^\dagger)^n |0\rangle$ принимает вид

$$\frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = \hat{H} |\Psi(t)\rangle \quad (834)$$

где

$$\hat{H} = G(a^\dagger - 1)a^\dagger a + g(a^\dagger - 1) + \lambda(a - a^\dagger a) \quad (835)$$

Если в начальный момент времени нейтронов не было, т. е. $|\Psi(0)\rangle = |0\rangle$, то выражение для среднего числа $\bar{n}(t)$ нейтронов есть

$$\bar{n}(t) = \langle 0 | e^a e^{-\hat{H}t} (a^\dagger a) e^{\hat{H}t} | 0 \rangle = \langle 0 | e^a e^{-\hat{H}t} \hat{n} e^{\hat{H}t} | 0 \rangle, \quad (836)$$

откуда

$$\frac{\partial \bar{n}(t)}{\partial t} = \langle 0 | e^a [\hat{n}, \hat{H}] e^{\hat{H}t} | 0 \rangle \quad (837)$$

Поскольку $[\hat{n}, a] = -a$, $[\hat{n}, a^\dagger] = a^\dagger$, мы находим, что

$$[\hat{n}, \hat{H}] = Ga^\dagger \hat{n} + ga^\dagger - \lambda a \quad (838)$$

Тогда, используя равенства $\langle 0|e^a a^\dagger = \langle 0|e^a$, $\langle 0|e^a a = \langle 0|e^a a^\dagger a = \langle 0|e^a \hat{n}$, получаем

$$\frac{\partial \bar{n}(t)}{\partial t} = -(\lambda - G)\bar{n}(t) + g = -\frac{\bar{n}(t)}{\tau} + g \quad (839)$$

где введено обозначение $\tau = 1/(\lambda - G)$. Решением этого уравнения с начальным условием $\bar{n}(0) = 0$ является

$$\bar{n}(t) = g\tau (1 - e^{-t/\tau}) \quad (840)$$

В случае $\tau > 0$, т. е. $\lambda > G$, имеется стационарное решение

$$\bar{n}(t \rightarrow \infty) \equiv n_0 = g\tau = \frac{g}{\lambda - G} \quad (841)$$

Видно, что при $\lambda \rightarrow G$ сверху число нейтронов в стационарном состоянии будет расти. Для $\lambda < G$ будет происходить неограниченный экспоненциальный рост числа нейтронов - произойдет взрыв.

Найдем теперь флуктуации числа нейтронов в стационарном состоянии, для чего рассмотрим уравнение для $\overline{n^2}(t)$:

$$\frac{\partial \overline{n^2}(t)}{\partial t} = \langle 0|e^a [\hat{n}^2, \hat{H}] |\Psi(t)\rangle \quad (842)$$

Используя коммутационные правила, находим

$$\begin{aligned} [\hat{n}^2, \hat{H}] &= \hat{n}[\hat{n}, \hat{H}] + [\hat{n}, \hat{H}]\hat{n} = \\ &= G(\hat{n}a^\dagger \hat{n} + a^\dagger \hat{n}^2) + g(\hat{n}a^\dagger + a^\dagger \hat{n}) - \lambda(\hat{n}a + a\hat{n}) = \\ &= G(a^\dagger \hat{n} + 2a^\dagger \hat{n}^2) + g(a^\dagger + 2a^\dagger \hat{n}) - \lambda(-a + 2a\hat{n}) \end{aligned} \quad (843)$$

Тогда

$$\frac{\partial \overline{n^2}(t)}{\partial t} = G[\bar{n}(t) + 2\overline{n^2}(t)] + g[1 + 2\bar{n}(t)] - \lambda[-\bar{n}(t) + 2\overline{n^2}(t)] \quad (844)$$

В стационарном состоянии получаем

$$\overline{n^2} = \frac{\bar{n}(G + 2g + \lambda) + g}{2(\lambda - G)} = \bar{n}^2 + \frac{\bar{n}\lambda}{\lambda - G} \quad (845)$$

откуда для относительных флуктуаций имеем неравенство

$$\frac{\overline{n^2} - \bar{n}^2}{\bar{n}^2} = \frac{\lambda}{g} > \frac{1}{\bar{n}} \quad (846)$$

которое показывает отличие распределения по числу нейтронов в стационарном состоянии от пуассоновского.

На рис. 15 приведена зависимость от времени для среднеквадратичных флуктуаций числа нейтронов $\sqrt{\overline{n^2} - \bar{n}^2}$. Представленные на рисунке результаты численного моделирования являются средними по 100 реализациям для значений скоростей реакций $g = 0, 1$, $\lambda = 0,004$, $G = 0,003$.

Более того, флуктуации числа нейтронов могут быть произвольно велики независимо от их среднего числа. Все это является следствием присутствия в операторе эволюции $\hat{H}$ кубического по операторам $a^\dagger, a$ члена.

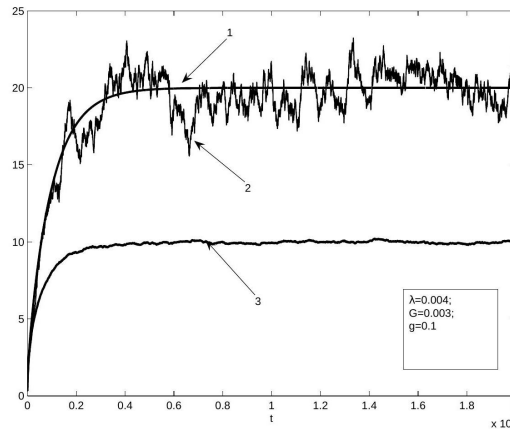


Рис. 15. Зависимость от времени для среднеквадратичных флуктуаций числа нейтронов $\sqrt{\overline{n^2} - \bar{n}^2}$, кривая 1 - аналитическое решение ур. (844), кривая 2— результаты численного моделирования кинетического уравнения. Для сравнения приведены результаты численного моделирования для $\sqrt{\bar{n}(t)}$ - кривая 3, показывающие отличие статистики от пуассоновской

Задача

Рассмотрим реакцию двухчастичной аннигиляции $A + A \rightarrow \emptyset$ в случае, когда скорость реакции λ очень мала, а коэффициент диффузии D очень большой. Найти скорость убывания числа частиц, считая, что в начальном состоянии находилось N_0 частиц.

Решение

При указанных условиях скорость уменьшения числа частиц определяется только скоростью реакции и любые неоднородности плотности числа частиц выравниваются за счет быстрой диффузии. Тогда кинетическое уравнение для вероятности $P(N, t)$ найти N частиц в момент времени t имеет вид

$$\frac{\partial}{\partial t} P(N, t) = \lambda(N+1)(N+2)P(N+2, t) - \lambda N(N-1)P(N, t), \quad (847)$$

где за λ обозначена для удобства удвоенная вероятность аннигиляции. Определяя вектор состояния

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{N=0}^{\infty} P(N, t) (a^\dagger)^N |0\rangle \quad (848)$$

можно переписать кинетическое уравнение в виде

$$\begin{aligned} \frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} &= \lambda a^2 \sum_{N=0}^{\infty} P(N+2, t) (a^\dagger)^{N+2} |0\rangle - \\ &- \lambda (a^\dagger)^2 a^2 \sum_{N=0}^{\infty} P(N, t) (a^\dagger)^N |0\rangle = \lambda [a^2 - (a^\dagger)^2 a^2] |\psi\rangle \equiv \hat{H} |\psi\rangle \end{aligned} \quad (849)$$

Начальному состоянию из N_0 частиц соответствует вектор состояния

$$|\psi(0)\rangle = (a^\dagger)^{N_0} |0\rangle. \quad (850)$$

Тогда зависимость среднего числа частиц $N(t)$ от времени t дается выражением

$$N(t) = \langle 0 | e^a (a^\dagger a) e^{\hat{H}t} (a^\dagger)^{N_0} | 0 \rangle. \quad (851)$$

Теперь удобно, используя соотношения коммутации, перенести действие оператора e^a на вакуумное состояние $|0\rangle$. Легко убедиться, что для произвольной функции $F(a, a^\dagger)$ операторов рождения и уничтожения выполняется свойство

$$e^{\gamma a} F(a, a^\dagger) = F(a, a^\dagger + \gamma) e^{\gamma a}. \quad (852)$$

Значит, используя явный вид оператора $\hat{H}$, для $\gamma = 1$ получим

$$N(t) = \langle 0 | a e^{-\lambda t [(a^\dagger)^2 a^2 + 2a^\dagger a^2]} (a^\dagger + 1)^{N_0} | 0 \rangle. \quad (853)$$

Используем инвариантность среднего вида $\langle 0 | F(a, a^\dagger) | 0 \rangle$, в том числе и $N(t)$, относительно замены $a \rightarrow N_0 a$, $a^\dagger \rightarrow a^\dagger / N_0$, имеем

$$N(t) = N_0 \langle 0 | a e^{-\lambda t [(a^\dagger)^2 a^2 + 2N_0 a^\dagger a^2]} (1 + a^\dagger / N_0)^{N_0} | 0 \rangle. \quad (854)$$

Считая число частиц N_0 в начальный момент большим, мы можем оставить в операторе $\hat{H}$ только последний член, получая

$$N(t) \approx N_0 \langle 0 | a e^{-\lambda t 2N_0 a^\dagger a^2} e^{a^\dagger} | 0 \rangle. \quad (855)$$

Для дальнейших упрощений подействуем, используя коммутационные соотношения, оператором a на вакуумное состояние $|0\rangle$. Для этого нам нужно вычислить коммутатор $[a, e^{-\lambda t 2N_0 a^\dagger a^2}]$. Для функции

$$f(\alpha) = e^{\alpha a^\dagger a^2} a e^{-\alpha a^\dagger a^2} \quad (856)$$

где $\alpha = \lambda t 2N_0$, имеем уравнение

$$\frac{df}{d\alpha} = e^{\alpha a^\dagger a^2} (a^\dagger a^3 - a a^\dagger a^2) e^{-\alpha a^\dagger a^2} = e^{\alpha a^\dagger a^2} (-a^2) e^{-\alpha a^\dagger a^2} = -f^2 \quad (857)$$

решением которого, с учетом начального условия $f(\alpha = 0) = a$, является

$$f(\alpha) = \frac{a}{\alpha a + 1} \quad (858)$$

Таким образом,

$$\langle 0 | a e^{-\alpha a^\dagger a^2} = \langle 0 | e^{-\alpha a^\dagger a^2} \frac{a}{\alpha a + 1} = \langle 0 | \frac{a}{\alpha a + 1}, \quad (859)$$

где в последнем равенстве учтено, что $\langle 0 | a^\dagger = 0$. Функцию $f(\alpha)$ надо понимать как ряд

$$f(\alpha) = \frac{a}{\alpha a + 1} = a [1 - (\alpha a) + (\alpha a)^2 + \dots] \quad (860)$$

Тогда, действуя этой функцией на $e^{a^\dagger} |0\rangle$, получим

$$f(\alpha) e^{a^\dagger} |0\rangle = \frac{a}{\alpha a + 1} e^{a^\dagger} |0\rangle = \frac{1}{\alpha + 1} e^{a^\dagger} |0\rangle \quad (861)$$

поскольку $a^n e^{a^\dagger} |0\rangle = e^{a^\dagger} |0\rangle$. Окончательно

$$N(t) = N_0 \langle 0 | \frac{1}{\alpha + 1} e^{a^\dagger} |0\rangle = \frac{N_0}{1 + 2\lambda N_0 t} \quad (862)$$

Отметим, что формальная кинетика, основанная на уравнении для средней концентрации

$$\frac{\partial N(t)}{\partial t} = -\lambda N^2(t) \quad (863)$$

дает правильную степенную зависимость средней концентрации от времени, но неправильный коэффициент

$$N(t) = \frac{N_0}{1 + N_0 \lambda t} \quad (864)$$

На рис. 16 приведена в логарифмическом масштабе зависимость числа частиц от времени. Результаты N_{sim} получены усреднением по пяти реализациям численного моделирования решения кинетического уравнения (847) для начального числа частиц $N_0 = 10^3$ и вероятности аннигиляции $\lambda = 3 \cdot 10^{-5}$. Параметры моделирования подобраны так, чтобы, с одной стороны, подтвердить необходимость описания процесса аннигиляции с помощью кинетического уравнения и некорректность применения уравнения для средних концентраций; с другой стороны, чтобы были видны флуктуации данных моделирования относительно аналитического решения N_{kin} уравнения (862).

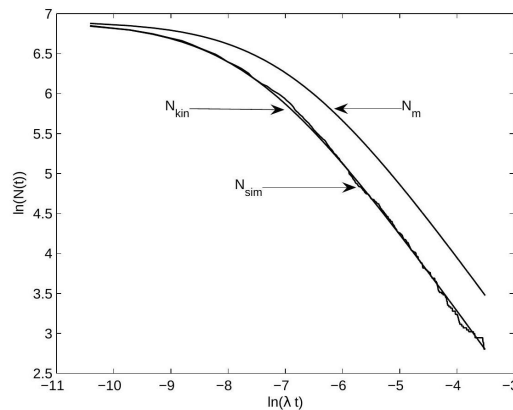


Рис. 16. Логарифмическая зависимость числа частиц от времени, N_{kin} - аналитическое решение (862) кинетического уравнения, N_{sim} - численное моделирование кинетического уравнения (847), N_m - аналитическое решение (864) уравнения для средней концентрации

Даже очень простые примеры, рассмотренные выше, показывают достоинства применения методов квантовой теории для решения кинетического уравнения. Действительно, для нахождения средних значений мы получаем обыкновенные дифференциальные уравнения (а для стационарного случая - алгебраические), тогда как при традиционном использовании производящей функции для решения кинетического уравнения приходится решать дифференциальное уравнение в частных производных.

13. Описание магнитного резонанса методом матрицы плотности

20.8.6 13. Description of Magnetic Resonance by the Density Matrix Method

Задача

Используя формализм матрицы плотности, описать прецессию электрона со спином $1/2$, находящегося в смешанном (частично поляризованном) состоянии, во внешнем

магнитном поле $\vec{B}$.

Решение

Гамильтониан имеет вид

$$\hat{H} = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = -\mu_0 \sigma_j B_j, \quad (865)$$

где $\mu_0 = e\hbar/2mc$ - магнитный момент электрона, σ_j - матрицы Паули. Вектор средней поляризации электрона выражается через матрицу плотности

$$P_i = Sp(\hat{\rho} \sigma_i) \quad (866)$$

С учетом нормировки

$$Sp(\hat{\rho}) = 1 \quad (867)$$

можно выразить матрицу плотности через P_i . Для частиц со спином 1/2 матрица плотности имеет размерность 2×2 и ее можно представить в виде

$$\hat{\rho} = aI + b_k \sigma_k \quad (868)$$

Поскольку $Sp(\sigma_k) = 0$, сразу находим, что $a = 1/2$. Подставляя искомый вид матрицы плотности в выражение для средней поляризации, имеем

$$P_i = Sp[(aI + b_k \sigma_k) \sigma_i] = b_k Sp(\sigma_k \sigma_i) = b_k 2\delta_{ik} = 2b_i \quad (869)$$

Следовательно,

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2} (I + P_k \sigma_k). \quad (870)$$

Изменение вектора средней поляризации P_i со временем описывается уравнением

$$\begin{aligned} \frac{dP_i}{dt} &= Sp\left(\frac{d\hat{\rho}}{dt} \sigma_i\right) = \frac{1}{i\hbar} Sp([\hat{H}, \hat{\rho}] \sigma_i) = \frac{(-\mu_0) B_j}{i\hbar} Sp\left(\left[\sigma_j, \frac{1}{2} P_k \sigma_k\right] \sigma_i\right) = \\ &= \frac{(-\mu_0) B_j P_k i e_{jkm}}{i\hbar} Sp(\sigma_m \sigma_i) = \frac{eB}{mc} [\vec{P} \times \vec{n}]_i \end{aligned} \quad (871)$$

где $\vec{n} = \vec{B}/|\vec{B}|$ - единичный вектор вдоль направления магнитного поля. Это уравнение описывает вращение вектора средней поляризации $\vec{P}$ вокруг внешнего магнитного поля $\vec{B}$ с угловой частотой eB/mc .

Задача

Рассмотреть поведение спина в магнитном поле $B = B_0 + B_1(t)$, где постоянное магнитное поле B_0 направлено по оси z , а переменное - по оси x . Учесть взаимодействие спина с тепловыми колебаниями решетки.

Решение

Уравнения для элементов матрицы плотности двухуровневой системы, взаимодействующей с термостатом, запишем покомпонентно:

$$\begin{aligned}\frac{d\rho_{00}}{dt} &= -\frac{i}{\hbar} \left([\hat{H}_0, \hat{\rho}]_{00} + [\hat{V}, \hat{\rho}]_{00} \right) - \frac{1}{\tau_1} (\rho_{00} - \bar{\rho}_{00}) \\ \frac{d\rho_{01}}{dt} &= -\frac{i}{\hbar} \left([\hat{H}_0, \hat{\rho}]_{01} + [\hat{V}, \hat{\rho}]_{01} \right) - \frac{1}{\tau_2} \rho_{01}\end{aligned}\quad (872)$$

где $\hat{H}_0 = -\mu B_0 \hat{\sigma}_z$, $\hat{V} = -\mu B_1(t) \hat{\sigma}_x$, $\bar{\rho}_{ij}$ - равновесное значение матрицы плотности. Вычисляем коммутаторы:

$$\begin{aligned}[\hat{H}_0, \hat{\rho}]_{00} &= -\mu B_0 [(\hat{\sigma}_z \hat{\rho})_{00} - (\hat{\rho} \hat{\sigma}_z)_{00}] = 0 \\ [\hat{V}, \hat{\rho}]_{00} &= -\mu B_1(t) [(\hat{\sigma}_x \hat{\rho})_{00} - (\hat{\rho} \hat{\sigma}_x)_{00}] = -\mu B_1(t) (\rho_{10} - \rho_{01}) \\ [\hat{H}_0, \hat{\rho}]_{01} &= -\mu B_0 [(\hat{\sigma}_z \hat{\rho})_{01} - (\hat{\rho} \hat{\sigma}_z)_{01}] = -2\mu B_0 \rho_{01} \\ [\hat{V}, \hat{\rho}]_{01} &= -\mu B_1(t) [(\hat{\sigma}_x \hat{\rho})_{01} - (\hat{\rho} \hat{\sigma}_x)_{01}] = -\mu B_1(t) (\rho_{11} - \rho_{00})\end{aligned}\quad (873)$$

Тогда уравнения для элементов матрицы плотности принимают вид

$$\begin{aligned}\frac{d\rho_{00}}{dt} &= \frac{i\mu B_1(t)}{\hbar} (\rho_{10} - \rho_{01}) - \frac{1}{\tau_1} (\rho_{00} - \bar{\rho}_{00}), \\ \frac{d\rho_{01}}{dt} &= \frac{2i\mu B_0}{\hbar} \rho_{01} + \frac{i\mu B_1(t)}{\hbar} (\rho_{11} - \rho_{00}) - \frac{1}{\tau_2} \rho_{01},\end{aligned}\quad (874)$$

и $\rho_{10} = \rho_{01}^*$. Средние значения магнитных моментов находятся из

$$\begin{aligned}M_x &= \mu Sp(\hat{\rho} \hat{\sigma}_x) = \mu (\rho_{01} + \rho_{10}) = 2\mu \operatorname{Re} \rho_{10} \\ M_y &= \mu Sp(\hat{\rho} \hat{\sigma}_y) = i\mu (\rho_{01} - \rho_{10}) = 2\mu \operatorname{Im} \rho_{10} \\ M_z &= \mu Sp(\hat{\rho} \hat{\sigma}_z) = \mu (\rho_{00} - \rho_{11})\end{aligned}\quad (875)$$

Используя уравнения для элементов матрицы плотности, получим уравнения Блоха:

$$\begin{aligned}\frac{dM_x}{dt} &= \frac{2\mu B_0}{\hbar} M_y - \frac{1}{\tau_2} M_x \\ \frac{dM_y}{dt} &= -\frac{2\mu B_0}{\hbar} M_x + \frac{2\mu B_1(t)}{\hbar} M_z - \frac{1}{\tau_2} M_y \\ \frac{dM_z}{dt} &= -\frac{2\mu B_1(t)}{\hbar} M_y - \frac{1}{\tau_1} (M_z - \bar{M}_z)\end{aligned}\quad (876)$$

Скорость накачки энергии переменным внешним полем в двухуровневую систему равна

$$\begin{aligned}\frac{dE}{dt} &= -\frac{d}{dt} \mu B_0 Sp(\hat{\rho} \hat{\sigma}_z) = -\mu B_0 \frac{d}{dt} (\rho_{00} - \rho_{11}) = \\ &= -2\mu B_0 \frac{d\rho_{00}}{dt} = 2\mu B_0 \frac{2\mu B_1(t)}{\hbar} \operatorname{Im}(\rho_{10})\end{aligned}\quad (877)$$

Для периодического магнитного поля $B_1(t) = (B_1 e^{i\omega t} + c.c.)$, с учетом $B_1 \ll B_0$, в уравнении для матричного элемента ρ_{01} можно заменить выражение $(\rho_{11} - \rho_{00})$ его равновесным значением $(\bar{\rho}_{11} - \bar{\rho}_{00}) \approx -(\mu B_0)/(2T)$ (при $T \gg \mu B_0$). Решение ищем в виде $\rho_{01} = r e^{i\omega t} + \bar{r} e^{-i\omega t}$, получая

$$r = \frac{i\tau_2}{i(\omega - \omega_0)\tau_2 + 1} \frac{\mu B_1 \omega_0}{4T}, \quad \bar{r} = \frac{i\tau_2}{i(-\omega - \omega_0)\tau_2 + 1} \frac{\mu B_1 \omega_0}{4T}, \quad (878)$$

где $\omega_0 = 2\mu B_0/\hbar$. Усредняя по времени, имеем

$$\frac{d\bar{E}}{dt} = \frac{(\mu B_1)^2 \omega_0}{2T} \frac{\tau_2}{(\omega - \omega_0)^2 \tau_2^2 + 1} + \frac{(\mu B_1)^2 \omega_0}{2T} \frac{\tau_2}{(\omega + \omega_0)^2 \tau_2^2 + 1} \quad (879)$$

Первый член в этом выражении имеет резкий максимум при $\omega = \omega_0$, второй же член нерезонансный, и им можно пренебречь.

В кинетике много особых моделей, которые иногда становятся нужны, их тут и пропишу.

??? мб это же перекину в раздел про кинетику твердых тел?

21 Exotic Models of Quantum Kinetics

(maybe I'll put here a half of a book by Kamenev...)

21.0.1 Quantum Gas that Hits a Wall (???)

(????????????????????)

постановка задачи

Имеется плоская стенка, которая с небольшой скоростью движется через равновесный газ фермионов.

Столкновения фермионов со стенкой носят зеркальный характер.

Найти силу сопротивления, испытываемую стенкой. То же самое сделать для бозонов. Рекомендуется перед решением этих задач вспомнить определение тензора плотности потока импульса и обсудить его физический смысл. Как изменится решение задачи, если стенка является полупроницаемой мембраной, т.е.

с вероятностью $D < 1$ частица может проходить сквозь стенку? Обсудить случай диффузного отражения от стенки.

решение

не актуально

22 Phase Transitions and Nucleation (??)

(main section for these effects)

22.1 Basics of Phase Transitions

22.2 7. Kinetics of Phase Transitions of the 1st Kind by Kolokolov

Рассматривая фазовые переходы 1-го рода, будем для определенности говорить о процессе конденсации перенасыщенного пара. Появление новой фазы, т. е. жидкости, происходит через флуктуационное образование зародышей. Однако энергетически невыгодный эффект появления границы раздела двух фаз приводит к тому, что при небольшом отклонении от равновесия развиваться в новую фазу могут только зародыши достаточно крупного размера. В этом случае характерное время роста зародыша велико по сравнению со временем элементарных актов присоединения (потери) молекул к зародышу. Таким образом, мы имеем систему с сильно различающимися временными масштабами и кинетика фазового перехода описывается уравнением Фоккера - Планка для функции распределения зародышей $f(r, t)$ по их размерам:

$$\frac{\partial f(r, t)}{\partial t} = -\frac{\partial j_r}{\partial r} \quad (231)$$

где плотность потока j_r в "пространстве размеров" равна

$$j_r = V(r)f(r, t) - B\frac{\partial f(r, t)}{\partial r} \quad (232)$$

Первый член описывает регулярный рост зародышей новой фазы (которые будем считать сферически симметричными), вызванный термодинамической неустойчивостью системы, а второй член

- флуктуационное изменение размера зародыша за счет нерегулярных процессов присоединения и испарения отдельных молекул.

Функция распределения по размерам зародышей $f(r, t)$ имеет нормировку

$$\int f(r, t)dr = N \quad (233)$$

где N - число зародышей в единице объема.

22.2.1 7.1. Zeldovich's Theory

Theory

При малом отклонении от равновесия время распада метастабильного состояния очень велико и можно ввести "равновесную" функцию распределения $f_0(r)$, пропорциональную вероятности флуктуационного образования зародыша радиуса r :

$$f_0(r) \sim \exp\left(-\frac{R}{T}\right) \quad (234)$$

где R - минимальная работа, которую нужно совершить для образования зародыша. Эта величина складывается из изменения потенциала Гиббса и работы по созданию границы раздела двух фаз:

$$R = 4\pi r^2\sigma + n\Delta\mu \quad (235)$$

Здесь n - число молекул в новой фазе

$$n = \frac{4\pi r^3}{3v} \quad (236)$$

а v - объем, приходящийся на одну молекулу в жидкости, величина приближенно постоянная, σ - коэффициент поверхностного натяжения:

$$\Delta\mu = \frac{\partial\mu}{\partial T}\delta T = \frac{q}{T}\delta T, \quad (237)$$

где q - теплота испарения, δT - степень переохлаждения пара. Величина R имеет максимум при некотором значении $r = r_c$, который назовем критическим размером зародыша.

Разлагая R вблизи критического размера зародыша, получаем

$$R \approx R(r_c) + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} R \right)_{r_c} (r - r_c)^2 = R(r_c) - 4\pi\sigma (r - r_c)^2 \quad (238)$$

где r_c определяется из условия $(\partial/\partial r)R|_{r_c} = 0$, т. е.

$$r_c = \frac{2\sigma v_{\text{ж}}}{|\Delta\mu|} \quad (239)$$

Таким образом, вблизи r_c

$$f_0(r) = f_0(r_c) \exp \left[\frac{4\pi\sigma}{T} (r - r_c)^2 \right] \quad (240)$$

где

$$f_0(r_c) = \text{Const} \exp \left[-\frac{4\pi\sigma r_c^2}{3T} \right] \quad (241)$$

Вблизи минимума f_0 большую роль играют флуктуации, которые могут привести как к росту, так и к уменьшению размера зародыша. Этот эффект важен в окрестности r_c размером $\delta r \sim (T/4\pi\sigma)^{1/2}$. Если же зародыш вырастет до размера $r > r_c + \delta r$, то с подавляющей вероятностью он будет в дальнейшем неограниченно расти.

Для "равновесной" функции распределения $f_0 \sim \exp(-R/T)$ поток j_r обращается в ноль и мы получаем связь коэффициентов V и B :

$$V = -\frac{B}{T} \frac{\partial R}{\partial r} \quad (242)$$

Удобно переписать выражение для потока j_r через отношение f/f_0 :

$$j_r = -B f_0 \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{f}{f_0} \right) \quad (243)$$

Для стационарного процесса роста новой фазы $j_r = j_0 = \text{Const}$ получаем

$$\frac{f}{f_0} = j_0 \int_r^\infty \frac{dr'}{B f_0} + \text{Const}. \quad (244)$$

Одно граничное условие принимает вид

$$\left(\frac{f}{f_0} \right)_{r \rightarrow 0} \rightarrow 1, \quad (245)$$

означающий, что на начальной стадии конденсации имеется много зародышей с малым размером, а скорость конденсации невелика и не успевает истощать эту область функции распределения. Другое граничное условие

$$\left(\frac{f}{f_0}\right)_{r \gg r_c} \rightarrow 0 \quad (246)$$

означает, что в области $r \gg r_c$ число достаточно крупных зародышей мало, т. е. реальная функция распределения значительно меньше "равновесной". Из последнего граничного условия следует, что $\text{Const} = 0$ и мы получаем

$$\frac{f}{f_0} = j_0 \int_r^\infty \frac{dr'}{B f_0}, \quad (247)$$

где из первого граничного условия следует

$$\frac{1}{j_0} = \int_0^\infty \frac{dr'}{B f_0} \quad (248)$$

Используя полученное выше разложение для f_0 вблизи r_c , получаем

$$j_0 = 2\sqrt{\frac{\sigma}{T}} B(r_c) f_0(r_c). \quad (249)$$

Найдем скорость роста радиуса зародыша $V(r)$ в случае конденсации пара. Внутри капельки радиуса r давление больше на $\Delta P = 2\sigma/r$ (получается из $\Delta P \Delta V = \sigma \Delta S$; $\Delta S, \Delta V$ - изменения площади поверхности и объема). Это дополнительное давление приводит к смещению точки равновесия двух фаз. Если для плоской поверхности раздела двух фаз имело место равенство

$$\mu_\Gamma(P_0, T_0) = \mu(P_0, T_0) \quad (250)$$

где индексы "Г" и "ж" относятся к газовой и жидкой фазам соответственно. В этом выражении $P = P_0 + \delta P$, $P_\text{ж} = P_0 + \delta P + \Delta P$, так что из

$$\mu_\Gamma(P_0 + \delta P, T_0) = \mu(P_0 + \delta P + \Delta P, T_0) \quad (251)$$

следует (с учетом, что объем, приходящийся на одну молекулу в газовой фазе - v , гораздо больше соответствующей величины в жидкой фазе $-v_\text{ж}$):

$$\delta P = \frac{2\sigma v}{r v_\Gamma} \quad (252)$$

Это означает, что равновесная концентрация пара вблизи капельки жидкости радиуса r имеет вид

$$n(r) = n_\infty \left(1 + \frac{2\sigma v_\text{ж}}{r T}\right), \quad (253)$$

где n_∞ - концентрация насыщенного пара над плоской поверхностью. Для перенасыщенного пара на капельку радиуса r падает постоянный поток молекул

$$-J = 4\pi\rho^2 D \frac{dn}{d\rho} \rightarrow n(\rho) = \bar{n} + \frac{J}{4\pi D \rho} \quad (254)$$

где ρ - расстояние от центра капельки, D - коэффициент диффузии. При $\rho \rightarrow \infty$ $n(\rho) \rightarrow \bar{n}$ - средней концентрации перенасыщенного пара. Тогда

$$\begin{aligned} -J &= 4\pi r D (\bar{n} - n(r)) = 4\pi r D (\bar{n} - n_\infty) - \frac{8\pi\sigma v_\text{ж} D n_\infty}{T} = \\ &= -\frac{8\pi\sigma v_\text{ж} D n_\infty}{T} \left(1 - \frac{r}{r_c}\right) \end{aligned} \quad (255)$$

С другой стороны,

$$-J = \frac{d}{dt} \left(\frac{4\pi r^3}{3v_{\text{ж}}} \right) = \left(\frac{4\pi r^2}{v_{\text{ж}}} \right) \frac{dr}{dt} \quad (256)$$

Следовательно получим из (255) и (256):

$$V(r) = \frac{2Dv_{\text{ж}}^2 \sigma n_{\infty}}{rT} \left(\frac{1}{r_c} - \frac{1}{r} \right), \quad r_c = \frac{2\sigma v_{\text{ж}} n_{\infty}}{T(\bar{n} - n_{\infty})}. \quad (257)$$

Теперь, используя связь коэффициентов V и B

$$B|_{r \rightarrow r_c} = \left[\frac{TV}{\partial R / \partial r} \right]_{r \rightarrow r_c} = \frac{Dv_{\text{ж}}^2 n_{\infty}}{4\pi r_c^3}, \quad (258)$$

можно получить результирующую скорость конденсации:

$$j = 2\sqrt{\frac{\sigma}{T}} \frac{Dv_{\text{ж}}^2 n_{\infty}}{4\pi r_c^3} f_0(r_c). \quad (259)$$

22.2.2 7.2. Qualitative Results of the Lifshitz-Slezov Theory

Предыдущее рассмотрение относилось к ранней стадии конденсации, когда большая часть молекул находится в газовой фазе. По мере конденсации молекул в капельки газовая фаза истощается, что приводит к росту радиуса критического зародыша. Тогда капельки, не успевшие вырасти достаточно большими, начинают испаряться, а испарившиеся молекулы конденсируются на более крупных зародышах, радиус которых больше критического. Сам критический радиус растет из-за уменьшения $\bar{n}$ (уравнение (257)). Происходит косвенное "поедание" мелких капелек более крупными. Эта поздняя стадия процесса конденсации называется коалесценцией.

Мы рассмотрим эту стадию качественно. Уравнение Фоккера Планка для достаточно крупных зародышей сводится к уравнению непрерывности

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial r}(\dot{r}f) = 0, \quad (260)$$

где скорость роста зародыша, которую мы теперь обозначим $\dot{r}$, найдена выше (уравнение (257)):

$$\dot{r} = \frac{C}{r} \left(\frac{1}{r_c} - \frac{1}{r} \right), \quad C = \frac{2Dv_{\text{ж}}^2 \sigma}{T}. \quad (261)$$

Если проинтегрировать уравнение непрерывности по r от 0 до ∞ , то получится для скорости изменения числа капелек ($N(t) = \int_0^{\infty} f(r, t) dr$) уравнение

$$\frac{dN}{dt} = j(r)_{r \rightarrow 0} \quad (262)$$

где j - скорость потока капелек в пространстве размеров. Поскольку на стадии коалесценции капельки малого размера ($r < r_c$) испаряются и исчезают, то поток $j(r)_{r \rightarrow 0}$ отличен от нуля. Попробуем найти закон изменения числа капелек N .

Условие сохранения общего количества молекул имеет вид

$$\int_0^{\infty} \frac{4\pi}{3} r^3 f(r, t) dr = \text{Const} \quad (263)$$

где мы считаем, что на стадии коалесценции подавляющая часть вещества находится в жидкой фазе. Функцию распределения $f(r, t)$ ищем в скейлинговом виде

$$f(r, t) = \frac{A}{r_c^\alpha} f(r/r_c) = \frac{A}{r_c^\alpha} f(x), \quad (264)$$

где A - константа и введено обозначение $x \equiv r/r_c$, а зависимость от времени входит через $r_c = r_c(t)$. Показатель α находится из сохранения общего числа молекул

$$\int_0^\infty \frac{4\pi}{3} r^3 \frac{A}{r_c^\alpha} f(r/r_c) dr = \frac{4\pi}{3} r_c^{4-\alpha} \int_0^\infty x^3 f(x) dx = \text{Const} \quad (265)$$

откуда следует $\alpha = 4$ и функция распределения принимает вид

$$f(r, t) = \frac{A}{r_c^4} f(x) \quad (266)$$

Вычисляем производные

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{4A}{r_c^5} \dot{r}_c f(x) + \frac{A}{r_c^4} f'(x) \left(-\frac{r}{r_c^2} \dot{r}_c \right) = \frac{A \dot{r}_c}{r_c^5} [-4f(x) - x f'(x)], \quad (267)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial r} (\dot{r} f) &= \frac{\partial \dot{r}}{\partial r} f + \frac{\dot{r}}{r_c} f'(x) = \\ &= \frac{1}{r_c^4} \left[\left(-\frac{C}{r_c^2} + \frac{2C}{r_c^3} \right) f(x) + \frac{C}{r_c r} \left(\frac{1}{r_c} - \frac{1}{r} \right) f'(x) \right] = \\ &= \frac{C}{r_c^7} \left[\left(-\frac{1}{x^2} + \frac{2}{x^3} \right) f(x) + \left(\frac{1}{x} - \frac{1}{x^2} \right) f'(x) \right]. \end{aligned} \quad (268)$$

Подставляя эти величины в уравнение непрерывности, имеем:

$$\frac{A \dot{r}_c}{r_c^5} [4f(x) + x f'(x)] = \frac{C}{r_c^7} \left[\left(-\frac{1}{x^2} + \frac{2}{x^3} \right) f(x) + \left(\frac{1}{x} - \frac{1}{x^2} \right) f'(x) \right]. \quad (269)$$

Тогда для того, чтобы функция $f(x)$ зависела только от скейлинговой переменной x , необходимо выполнение условия

$$\dot{r}_c r_c^2 = \text{Const} \quad \rightarrow \quad r_c \sim t^{1/3}, \quad t \rightarrow \infty. \quad (270)$$

Число зародышей в единице объема N со временем уменьшается как

$$N = \int_0^\infty f(r, t) dr = \frac{1}{r_c^3} \int_0^\infty f(x) dx \sim 1/t \quad (271)$$

а из равенства $N(4\pi/3)\bar{r}^3 = \text{Const}$ следует, что средний размер зародыша $\bar{r}$ растет со временем как

$$\bar{r} \sim t^{1/3} \quad (272)$$

или

$$\bar{r} = \frac{\int_0^\infty r f(r, t) dr}{\int_0^\infty f(r, t) dr} \sim r_c \sim t^{1/3} \quad (273)$$

Полученные асимптотические зависимости являются основными качественными результатами теории Лифшица - Слезова.

22.2.3 7.3. Direct "Interaction" of Embryos

Наше описание процесса роста зародышей новой фазы относилось к случаю небольшого начального отклонения от равновесия,

когда образующиеся зародыши находятся далеко друг от друга и их непосредственным "взаимодействием" или "столкновениями" можно пренебречь.

Замечательно, однако, что учет "столкновений" зародышей сохраняет многие качественные черты скейлингового решения, полученного в предыдущем разделе.

Мы рассмотрим упрощенную ситуацию, пренебрегая движением центров зародышей. Рассмотрим один зародыш радиуса r_1 . В интервал времени dt с ним столкнется зародыш радиуса r_2 , если расстояние между их центрами r удовлетворяет условию

$$r_1 + r_2 \leq r \leq (r_1 + r_2) + (\dot{r}_1 + \dot{r}_2) dt \quad (274)$$

Число столкновений в единицу времени в единице объема зародышей с радиусами в интервале $(r_1, r_1 + dr_1)$, $(r_2, r_2 + dr_2)$ равно

$$4\pi \left[(r_1 + r_2)^2 (\dot{r}_1 + \dot{r}_2) \right] f(r_1, t) dr_1 f(r_2, t) dr_2 \quad (275)$$

Результатом такого столкновения будет исчезновение 2-х зародышей радиусами r_1 и r_2 и образование зародыша радиусом $r_{12} = (r_1^3 + r_2^3)^{1/3}$ (это значение r_{12} следует из сохранения суммарного числа молекул и приближенного постоянства объема, приходящегося на одну молекулу в жидкой фазе).

Тогда кинетическое уравнение записывается в виде

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial r}(\dot{r}f) = I \quad (276)$$

где интеграл "столкновений" I есть разность интегралов: $I = I_{\text{in}} - I_{\text{out}}$, которые определяются выражениями

$$I_{\text{in}} = \frac{1}{2} \int_0^\infty dr_1 \int_0^\infty dr_2 4\pi \left[(r_1 + r_2)^2 (\dot{r}_1 + \dot{r}_2) \right] f(r_1, t) f(r_2, t) \delta(r - r_{12}),$$

где множитель $1/2$ устраняет двойной учет каждого парного "столкновения":

$$I_{\text{out}} = \frac{1}{2} \int_0^\infty dr_1 \int_0^\infty dr_2 4\pi \left[(r_1 + r_2)^2 (\dot{r}_1 + \dot{r}_2) \right] \times \quad (278)$$

$$\times f(r_1, t) f(r_2, t) [\delta(r - r_1) + \delta(r - r_2)]$$

Снова ищем решение кинетического уравнения в скейлинговом виде:

$$f(r, t) = \frac{1}{r_c^4} F(x), \quad x = r/r_c \quad (279)$$

где зависимость функции распределения от времени определяется зависимостью от времени радиуса критического зародыша, $r_c = r_c(t)$, а зависимость r_c^{-4} получается из условия сохранения общего числа молекул в жидкой фазе:

$$\int_0^\infty \frac{4\pi}{3} r^3 f(r, t) dr = \text{Const} \quad (280)$$

Подставляя скейлинговую функцию распределения в интеграл столкновений и учитывая, что

$$\dot{r}_c = \frac{C}{r} \left(\frac{1}{r_c} - \frac{1}{r} \right) \sim r_c^{-2} \quad (281)$$

получим

$$I \sim r_c^{-7} \quad (282)$$

т. е. такую же зависимость, как члена $\partial_r[\dot{r}f(r, t)]$, полученную в предыдущем разделе. Следовательно, зависимость от времени критического радиуса зародыша, $r_c \sim t^{1/3}$, числа зародышей в единице объема, $N \sim 1/t$, среднего размера зародыша, $\bar{r} \sim t^{1/3}$, сохраняются такими же, как в теории Лифшица - Слезова. Вид скейлинговой функции $F(x)$, естественно, изменяется.

22.2.4 7.4. Kinetics of Free Coagulation

Рассмотрим необратимую реакцию слияния капель с числом частиц g и l в каплю с числом частиц $g + l$. Обозначим через $f(g, t)$ функцию распределения по числу частиц g в капле. Из сохранения полного числа частиц в капле следует условие

$$\int_0^\infty g f(g, t) dg = \text{Const} \quad (283)$$

Кинетическое уравнение, описывающее изменение функции распределения, имеет вид $\partial_t f(g, t) = \frac{1}{2} \int_0^g K(g-l, l) f(g-l, t) f(l, t) dl - f(g, t) \int_0^\infty K(g, l) f(l, t) dl$,

где $K(g, l)$ - вероятность слияния двух капель с числом частиц g и l в единицу времени.

Рассмотрим случай, когда две капли с радиусами r_1 и r_2 движутся диффузионным образом и сталкиваются, когда расстояние между их центрами $r \leq r_1 + r_2$. Если одна капля покоится, то плотность потока частиц на нее есть

$$j = -\kappa_2 \frac{dn_2}{dr} \quad (285)$$

где n_2 - плотность числа частиц с радиусами r_2 , удовлетворяющая граничным условиям

$$n_2(r_1 + r_2) = 0, \quad n_2(\infty) = N_2 \quad (286)$$

Тогда полный поток равен

$$J = 4\pi r^2 \kappa_2 \frac{dn_2}{dr} \quad (287)$$

откуда

$$n_2(r) = N_2 - \frac{J}{4\pi \kappa_2 r} \quad (288)$$

и из условия $n_2(r_1 + r_2) = 0$ находим

$$J = N_2 4\pi \kappa_2 (r_1 + r_2) \quad (289)$$

Тогда вероятность столкновения в единицу времени есть J/N_2 . С учетом движения обеих капель находим

$$K(r_1, r_2) = 4\pi (\kappa_1 + \kappa_2) (r_1 + r_2) \quad (290)$$

Коэффициент диффузии связан с размером капли и вязкостью среды соотношением

$$\kappa = \frac{T}{6\pi r \eta} \quad (291)$$

Окончательно для вероятности слияния капель получаем

$$K(g, l) = \frac{2T}{3\eta} \frac{(g^{1/3} + l^{1/3})^2}{g^{1/3}l^{1/3}} \quad (292)$$

Решение кинетического уравнения на больших временах, когда начальные условия забываются, ищем в скейлинговом виде

$$f(g, t) = A(t)\phi[B(t)g] \equiv A(t)\phi(x) \quad (293)$$

где $x \equiv Bg$. Тогда

$$\partial_t f(g, t) = \phi(x) \frac{dA}{dt} + x \frac{d\phi}{dx} \frac{A}{B} \frac{dB}{dt} \quad (294)$$

$$I = \frac{1}{2B} \int_0^x K(x, y) A\phi(x-y) A\phi(y) dy - \frac{A\phi(x)}{B} \int_0^\infty K(x, y) A\phi(y) dy \quad (295)$$

Чтобы функция ϕ зависела только от x , необходимо выполнение условий

$$\frac{dA}{dt} \sim \frac{A}{B} \frac{dB}{dt} \sim \frac{A^2}{B} \quad (296)$$

Ищем решение в виде степенных функций $A(t) = at^{-\alpha}$, $B(t) = bt^{-\beta}$, что дает $-\alpha - 1 = -2\alpha + \beta$, т. е. $\alpha = \beta + 1$. Из условия сохранения полного числа частиц

$$\text{Const} = \int_0^\infty g f(g, t) dg = \frac{A}{B^2} \int_0^\infty y \phi(y) dy \quad (297)$$

получаем $\alpha = 2\beta$, откуда окончательно $\alpha = 2$, $\beta = 1$.

Таким образом, эволюция функции распределения описывается выражением

$$f(g, t) \sim \frac{1}{t^2} \phi(g/t) \quad (298)$$

Скейлинговая функция $\phi(x)$ находится из уравнения

$$\phi(x) + x \frac{d\phi}{dx} = \frac{1}{2} \int_0^x K(x, y) \phi(x-y) \phi(y) dy - \phi(x) \int_0^\infty K(x, y) \phi(y) dy \quad (299)$$

например, численно.

22.3 8. Kinetics of Phase Transitions of the 2nd Kind by Kolokolov

Фазовые переходы 2-го рода характеризуются появлением ниже критической температуры T_c некоторого упорядочивания, описываемого так называемым параметром порядка - макроскопической величиной, описывающей степень упорядочивания. Несмотря на разнообразие типов взаимодействия, приводящих к появлению упорядочивания (примеры: переход в сверхпроводящее, сверхтекучее состояния, сегнетоэлектрики, бинарные сплавы, различные типы магнитного упорядочивания), поведение систем вблизи критической точки качественно и даже количественно описывается универсальными соотношениями. Универсальность фазовых переходов 2-го рода объясняется тем, что поведение систем вблизи критической точки определяется большими областями скоррелированных частиц, так что детали межчастичного взаимодействия несущественны.

Можно ожидать, что при слабом отклонении от равновесия релаксация параметра порядка к своему равновесному значению будет описываться также универсальным способом.

22.3.1 8.1. The Fluctuation-Dissipative Theorem

В общем случае параметр порядка, который мы обозначим $\phi(\mathbf{r}, t)$, может меняться как во времени, так и в пространстве. Так же как для фазовых переходов первого рода, изменение параметра порядка при слабом отклонении от равновесия можно описывать с помощью уравнения Ланжевена:

$$\partial_t \phi(\mathbf{r}, t) = -\Gamma \frac{\delta F}{\delta \phi(\mathbf{r}, t)} + \xi(\mathbf{r}, t) \quad (300)$$

где Γ - кинетический коэффициент. Первый член в правой части описывает медленное приближение системы к равновесию, а второй - быстрые флуктуационные изменения параметра порядка. Корреляторы случайной "силы" равны

$$\langle \xi(\mathbf{r}, t) \rangle = 0, \quad \langle \xi(\mathbf{r}, t) \xi(\mathbf{r}', t') \rangle = 2D \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t') \quad (301)$$

Вид первого члена предложен Ландау и связан с тем фактом, что в равновесии свободная энергия F имеет минимум, и поэтому разумно предположить, что при малом отклонении от равновесия скорость приближения к нему пропорциональна величине отклонения.

Коэффициент "диффузии" D в этом соотношении можно связать с кинетическим коэффициентом Γ .

Из уравнения Ланжевена для малых значений δt получаем

$$\phi(\mathbf{r}, t + \delta t) = \phi(\mathbf{r}, t) - \Gamma \frac{\delta F}{\delta \phi(\mathbf{r}, t)} \delta t + \int_t^{t+\delta t} \xi(\mathbf{r}, t') dt' \quad (302)$$

и аналогично

$$\phi(\mathbf{r}', t + \delta t) = \phi(\mathbf{r}', t) - \Gamma \frac{\delta F}{\delta \phi(\mathbf{r}', t)} \delta t + \int_t^{t+\delta t} \xi(\mathbf{r}', t'') dt'' \quad (303)$$

Перемножая эти выражения и усредняя по реализациям случайного шума ξ , получим:

$$\begin{aligned} & \langle \phi(\mathbf{r}, t + \delta t) \phi(\mathbf{r}', t + \delta t) \rangle - \langle \phi(\mathbf{r}, t) \phi(\mathbf{r}', t) \rangle = \\ & = -\Gamma \delta t \left[\left\langle \phi(\mathbf{r}, t) \frac{\delta F}{\delta \phi(\mathbf{r}', t)} \right\rangle + \left\langle \phi(\mathbf{r}', t) \frac{\delta F}{\delta \phi(\mathbf{r}, t)} \right\rangle \right] + \\ & + \int_t^{t+\delta t} dt' \int_t^{t+\delta t} dt'' \langle \xi(\mathbf{r}, t') \xi(\mathbf{r}', t'') \rangle \end{aligned} \quad (304)$$

Усреднение $\phi(\mathbf{r}, t)$ и $\delta F / \delta \phi(\mathbf{r}, t)$ с $\int_t^{t+\delta t} \xi(\mathbf{r}, t') dt'$ даст ноль, так как на значение параметра порядка в момент времени t будущие флуктуации влияния не оказывают. Усреднение по шуму ξ должно быть эквивалентно усреднению по ансамблю Гиббса в тепловом равновесии. Например:

$$\begin{aligned} \left\langle \phi(\mathbf{r}', t) \frac{\delta F}{\delta \phi(\mathbf{r}, t)} \right\rangle &= Z^{-1} \int \phi(\mathbf{r}', t) \frac{\delta F}{\delta \phi(\mathbf{r}, t)} e^{-F/T} D\phi = \\ &= Z^{-1} (-T) \int \phi(\mathbf{r}', t) \frac{\delta e^{-F/T}}{\delta \phi(\mathbf{r}, t)} D\phi = \\ &= Z^{-1} T \int \frac{\delta \phi(\mathbf{r}', t)}{\delta \phi(\mathbf{r}, t)} e^{-F/T} D\phi = T \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \end{aligned} \quad (305)$$

где $Z = \int e^{-F/T} D\phi$ - статсумма. Тогда, учитывая такой же вклад от $\langle \phi(\mathbf{r}', t) \frac{\delta F}{\delta \phi(\mathbf{r}, t)} \rangle$, получаем

$$-2\Gamma T \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta t + 2D \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta t = 0 \quad (306)$$

и, следовательно, $D = \Gamma T$.

Можно измерить в экспериментах по рассеянию корреляционную функцию $C(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t - t') \equiv \langle \phi(\mathbf{r}, t) \phi(\mathbf{r}', t') \rangle_{eq} = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{2\tau} \int_{-\tau}^{+\tau} dt'' \phi(\mathbf{r}, t + t'') \phi(\mathbf{r}', t' + t'')$.

Также экспериментально измеримой величиной является функция отклика. Включим магнитное поле $h(\mathbf{r}', t')$ и измерим среднюю намагниченность $\langle \phi(\mathbf{r}, t) \rangle$ в точке $\mathbf{r}$ в момент времени t . Для слабого поля отклик должен быть линейным:

$$\langle \phi(\mathbf{r}, t) \rangle = \int G(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t - t') h(\mathbf{r}', t') d\mathbf{r}' dt' \quad (308)$$

Из причинности следует, что функция отклика $G = 0$ для $t < t'$.

Корреляционная функция C и функция отклика G связаны соотношением, известным как флуктуационно-диссипативная теорема (ФДТ).

Феноменологически свободную энергию системы можно представить в виде разложения по четным степеням параметра порядка и его производных, как это предложил Ландау:

$$F = \int d\mathbf{r} \left[\frac{c}{2} (\nabla \phi(\mathbf{r}, t))^2 + \frac{a}{2} \phi^2(\mathbf{r}, t) + \frac{u}{4} \phi^4(\mathbf{r}, t) \right] \quad (309)$$

где коэффициенты разложения являются аналитическими функциями температуры и вблизи критической точки c и u можно считать постоянными, тогда как $a \sim T - T_c$ меняет знак. Феноменологически это учитывает, что при $T > T_c$ свободная энергия имеет минимум при нулевом значении параметра порядка, а при $T < T_c$ параметр порядка отличен от нуля.

Рассмотрим квадратичное приближение для свободной энергии, раскладывая функционал свободной энергии по малым отклонениям параметра порядка от его равновесного значения, $\phi = \phi_0 + \delta\phi$, где $\phi_0 = \sqrt{-a/u}$ для $T < T_c$ и $\phi_0 = 0$ для $T > T_c$. Переходя к фурье-компонентам, получим:

$$F = \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} [c(\nabla \phi(\mathbf{r}, t))^2 + a\phi^2(\mathbf{r}, t)] = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \phi_{\mathbf{k}} \phi_{-\mathbf{k}} (a + ck^2) \quad (310)$$

где теперь $a = \alpha(T - T_c)$ для $T > T_c$ и $a = 2\alpha(T_c - T)$ для $T < T_c$. Тогда кинетическое уравнение принимает вид

$$\partial_t \phi(\mathbf{k}, t) = -\Gamma \frac{\partial F}{\partial \phi(-\mathbf{k}, t)} + \xi(\mathbf{k}, t) = -\Gamma (a + ck^2) \phi(\mathbf{k}, t) + \xi(\mathbf{k}, t) \quad (311)$$

Найдем сначала характерное время релаксации системы, выведенной в начальный момент времени $t = 0$ из равновесия. Пусть начальное отклонение параметра порядка от равновесного значения характеризуется величиной $\phi(\mathbf{k}, 0)$. Тогда согласно полученному уравнению, пренебрегая шумом, получим:

$$\phi(\mathbf{k}, t) = \phi(\mathbf{k}, 0) e^{-t/\tau}, \quad \text{где} \quad \tau = \frac{1}{\Gamma(ck^2 + a)}. \quad (312)$$

Видно, что при $T \rightarrow T_c (a \rightarrow 0)$ время релаксации параметра порядка к равновесному значению для длинноволновых флуктуаций ($k \rightarrow 0$) может быть значительно больше $1/\Gamma$.

Теперь найдем корреляционную функцию флуктуаций параметра порядка. Раскладывая $\phi(\mathbf{k}, t)$ и $\xi(\mathbf{k}, t)$ в интеграл Фурье

$$\phi(\mathbf{k}, t) = \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} \phi(\mathbf{k}, \omega), \quad \xi(\mathbf{k}, t) = \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} \xi(\mathbf{k}, \omega) \quad (313)$$

получим

$$\phi(\mathbf{k}, \omega) = \frac{\xi(\mathbf{k}, \omega)}{\Gamma(a + ck^2) - i\omega}. \quad (314)$$

Тогда корреляционная функция равна

$$\begin{aligned} C(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t - t') &= \langle \phi(\mathbf{r}, t) \phi(\mathbf{r}', t') \rangle = \\ &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} \int \frac{d\omega_1}{2\pi} \int \frac{d\omega_2}{2\pi} e^{i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r} + i\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r}' - i\omega_1 t - i\omega_2 t'} \langle \phi(\mathbf{k}_1, \omega_1) \phi(\mathbf{k}_2, \omega_2) \rangle \end{aligned} \quad (315)$$

Для коррелятора фурье-компонент шума из (301) следует

$$\langle \xi(\mathbf{k}_1, \omega_1) \xi(\mathbf{k}_2, \omega_2) \rangle = 2\Gamma T \Delta(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2) 2\pi \delta(\omega_1 + \omega_2). \quad (316)$$

Тогда

$$C(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t - t') = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}_1} \int \frac{d\omega_1}{2\pi} e^{i\mathbf{k}_1 \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}') - i\omega_1(t - t')} \frac{2\Gamma T}{\Gamma^2(a + ck_1^2)^2 + \omega_1^2} \quad (317)$$

Функция отклика находится как реакция системы на внешнее магнитное поле $h(\mathbf{r}, t')$, в результате чего свободная энергия изменяется на $-\int h(\mathbf{r}', t') \phi(\mathbf{r}', t') d\mathbf{r}'$ и при переходе к фурье-компонентам принимает вид

$$F = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \phi_{\mathbf{k}} \phi_{-\mathbf{k}} (a + ck^2) - \sum_{\mathbf{k}} h_{\mathbf{k}} \phi_{-\mathbf{k}} \quad (318)$$

Решением кинетического уравнения, в котором пренебрегаем шумом по сравнению с внешним полем,

$$\partial_t \phi(\mathbf{k}, t) = -\Gamma(a + ck^2) \phi(\mathbf{k}, t) + \Gamma h(\mathbf{k}, t) \quad (319)$$

является

$$\phi(\mathbf{k}, \omega) = \frac{\Gamma h(\mathbf{k}, \omega)}{\Gamma(a + ck^2) - i\omega} \quad (320)$$

Таким образом, фурье-компонента функции отклика $G(\mathbf{k}, \omega)$ есть

$$G(\mathbf{k}, \omega) = \frac{\Gamma}{\Gamma(a + ck^2) - i\omega} \quad (321)$$

а ее мнимая часть

$$\text{Im } G(\mathbf{k}, \omega) = \frac{\Gamma \omega}{\Gamma^2(a + ck^2)^2 + \omega^2} \quad (322)$$

ответственная за поглощение системой энергии внешнего поля, связана с корреляционной функцией соотношением

$$C(\mathbf{k}, \omega) = \frac{2T}{\omega} \text{Im } G(\mathbf{k}, \omega), \quad (323)$$

известным как флуктуационно-диссипативная теорема для классических систем.

Рассмотрим вывод ФДТ для модели Изинга выше критической температуры T_c .

Если внешнее поле отсутствует, то вероятности найти спин в какой-то момент времени t' в состояниях ± 1 одинаковы, тогда $\langle s(t) \rangle = 0$. Тогда корреляционную функцию можно представить в виде

$$\langle s(t)s(t') \rangle_{eq} = \frac{1}{2} \langle s(t) \rangle_{s(t')=+1} - \frac{1}{2} \langle s(t) \rangle_{s(t')=-1} \quad (324)$$

где $\langle s(t) \rangle_{s(t')=\pm 1}$ - условная вероятность найти среднее значение спина в момент времени t равным $\langle s(t) \rangle$, если в момент времени t' он имел значения $s(t') = \pm 1$. Пусть теперь в момент времени $t \rightarrow -\infty$ включили слабое постоянное внешнее магнитное поле, а в момент времени t' его выключили. До этого момента t' система находилась в равновесии, так что вероятности найти спин в состояниях ± 1 есть

$$P[s(t') = \pm 1] = \frac{1}{2} \left(1 \pm \frac{h}{T} \right) \quad (325)$$

При этом отклик системы в момент времени t на внешнее поле есть

$$\langle s(t) \rangle_h = \frac{1+h/T}{2} \langle s(t) \rangle_{s(t')=+1} + \frac{1-h/T}{2} \langle s(t) \rangle_{s(t')=-1} = \frac{h}{T} \langle s(t)s(t') \rangle_{eq},$$

поскольку в отсутствие поля в интервале (t, t') $\langle s(t) \rangle_{s(t')=+1} + \langle s(t) \rangle_{s(t')=-1} = \langle s(t) \rangle = 0$.

С другой стороны,

$$\langle s(t) \rangle_h = \int_{-\infty}^{t'} G(t-t'') h(t'') dt'' = h \int_{-\infty}^{t'} G(t-t'') dt'', \quad \langle s(t)s(t') \rangle_{eq} = C(t-t').$$

Таким образом, мы установили, что

$$C(t-t') = T \int_{-\infty}^{t'} G(t-t'') dt'' \quad (328)$$

Учитывая, что корреляционная функция является четной от $t-t'$, а функция отклика обращается в ноль при отрицательном значении своего аргумента, как это следует из принципа причинности, мы можем записать для производной корреляционной функции

$$C'(t-t') = T [G(t'-t) - G(t-t')] \quad (329)$$

Тогда для фурье-компонент имеем полученное выше для другой модельной системы соотношение

$$C(\omega) = \frac{2T}{\omega} \text{Im } G(\omega) \quad (330)$$

Энергия магнитной системы E пропорциональна

$$E \sim \int d\mathbf{r} \langle \phi^2(\mathbf{r}, t) \rangle \quad (331)$$

так что

$$\frac{dE}{dt} \sim \int d\mathbf{r} \langle \phi(\mathbf{r}, t) \dot{\phi}(\mathbf{r}, t) \rangle \sim C'(0) \sim \int d\omega C'(\omega) \sim \int d\omega \text{Im } G(\omega) \quad (332)$$

22.3.2 8.2. The Growth Rate of the Embryos of the New Phase

Вычисление скорости роста зародышей новой фазы может быть выполнено в достаточно общем виде с использованием кинетических моделей.

В модели с несохраняющимся параметром порядка $\phi(\mathbf{r}, t)$ (модель типа А) используется релаксационное уравнение

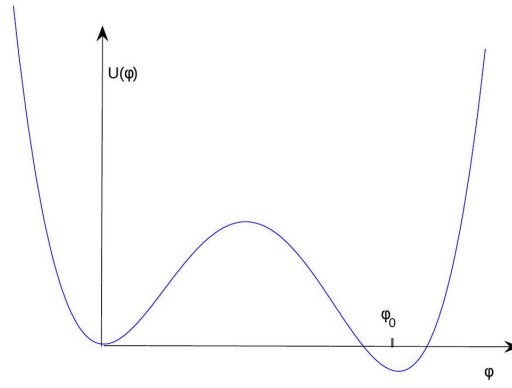


Рис. 6. Модельный потенциал, описывающий переход из метастабильного состояния при $\phi = 0$ к равновесному состоянию $\phi = \phi_0$. Высота барьера, разделяющего два минимума U_0 , разность значений потенциала в минимумах ψ

$$\partial_t \phi = -\Gamma \frac{\delta H}{\delta \phi}, \quad H = \int d\mathbf{r} \left[\frac{c}{2} (\nabla \phi)^2 + U(\phi) \right] \quad (333)$$

со слегка несимметричным потенциалом $U(\phi)$ (рис. 6).

Высокий потенциальный барьер не позволяет всей системе одновременно перейти в термодинамически устойчивое состояние,

поскольку вероятность такого сценария пропорциональна $e^{(-U_0 V)}$, где V - объем системы. Следовательно, образование новой фазы возможно только за счет образования и роста зародыша новой фазы - области конечного объема, занятой энергетически более выгодной фазой в море метастабильной фазы. Член $c(\nabla \phi)^2/2$ описывает поверхностную энергию зародыша.

Полная энергия "круглого" зародыша

$$F = S_d \sigma - V_d \psi \quad (334)$$

где S_d, V_d - соответственно площадь и объем d -мерного зародыша, σ - поверхностная энергия границы. Сначала оценим толщину переходной области λ . Энергия границы имеет оценку

$$E_w \sim S_d \lambda \left[c (\phi_0 / \lambda)^2 + U_0 \right] \quad (335)$$

Минимизируя это выражение по λ , получим

$$\lambda \sim \phi_0 \sqrt{c/U_0}, \quad \sigma \sim \phi_0 \sqrt{cU_0}. \quad (336)$$

Далее рассмотрим зародыши, у которых размер зародыша $R \gg \lambda$, т. е. достаточно продвинутую стадию роста зародыша.

Скорость изменения размера зародыша получим, умножив обе части релаксационного уравнения на $\delta H / \delta \phi$ и проинтегрировав по объему (измеряя время в единицах $1/\Gamma$); слева получится dF/dt - производная по времени от энергии внутри зародыша. Тогда

$$\frac{dR}{dt} \frac{\partial F}{\partial R} = - \int \left(\frac{\delta H}{\delta \phi} \right)^2 dV = - \int \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} \right)^2 dV \quad (337)$$

$\partial_t \phi$ отлична от нуля только на движущейся стенке; пусть за время δt стенка сдвигается на свою толщину λ , тогда $\delta \phi(R) = \phi_0$ при $\delta t dR/dt = \lambda$, откуда

$$\frac{\partial \phi(R)}{\partial t} = \frac{\phi_0}{\lambda} \frac{dR}{dt}. \quad (338)$$

Поскольку

$$\int \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} \right)^2 dV \sim \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} \right)^2 \lambda S_d \sim \left(\frac{dR}{dt} \right)^2 \frac{\phi_0^2}{\lambda} S_d \quad (339)$$

то мы получим

$$\frac{\phi_0^2}{\lambda} \frac{dR}{dt} = -\frac{1}{S_d} \frac{\partial F}{\partial R} \quad (340)$$

где F задано уравнением (334).

Таким образом,

$$\frac{dR}{dt} = \frac{\lambda}{\phi_0^2} \left(\psi - \frac{2\sigma}{R} \right) \equiv \text{Const} \left(\frac{1}{R_c} - \frac{1}{R} \right). \quad (341)$$

В качестве примера модели типа А можно привести образование и рост пузырька пара в перегретой жидкости. В данном случае параметром порядка служит разность плотностей пара и жидкости, а несохранение параметра порядка объясняется баллистической (недиффузионной) доставкой молекул воды с поверхности внутрь пузырька.

С другой стороны, процесс конденсации пара в жидкость должен описываться с учетом локального сохранения параметра порядка, поскольку в данном случае рост зародыша жидкой фазы обусловлен диффузионной доставкой большого числа молекул из гораздо менее плотной фазы пара. В этой модели (модель В) скорость изменения параметра порядка получается из уравнения непрерывности

$$\partial_t \phi = -\nabla j \quad (342)$$

где плотность потока в силу сохранения параметра порядка определяется разной степенью отклонения от равновесия в различных пространственных точках

$$j = -\nabla \frac{\delta H}{\delta \phi}, \quad (343)$$

так что

$$\partial_t \phi = \Delta \frac{\delta H}{\delta \phi} \quad (344)$$

с тем же самым выражением для H , уравнение (333) (и, следовательно, оценками толщины стенки и скорости изменения параметра порядка), что и в модели типа А. Меняется лишь уравнение

движения

$$\frac{dR}{dt} \frac{\partial F}{\partial R} = \int \frac{\partial \phi}{\partial t} \left(\frac{1}{\Delta} \frac{\partial \phi}{\partial t} \right) dV \quad (345)$$

где для $d = 3$

$$\left(\frac{1}{\Delta} \frac{\partial \phi}{\partial t} \right) (\mathbf{r}, t) = - \int \frac{1}{4\pi |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \frac{\partial \phi}{\partial t} (\mathbf{r}', t) dV' \quad (346)$$

Тогда имеем оценку

$$\begin{aligned} \int \frac{\partial \phi}{\partial t} \left(\frac{1}{\Delta} \frac{\partial \phi}{\partial t} \right) dV &\sim \frac{1}{R} \left(\int \frac{\partial \phi}{\partial t} dV \right)^2 \sim \\ &\sim \frac{1}{R} \left(\frac{\phi_0 dR/dt}{\lambda} \cdot \lambda S_d \right)^2 \sim \phi_0^2 \left(\frac{dR}{dt} \right)^2 \frac{S_d^2}{R} \end{aligned} \quad (347)$$

В итоге получаем скорость роста границы зародыша в случае сохраняющегося параметра порядка

$$\frac{dR}{dt} = \frac{\text{Const}}{R} \left(\psi - \frac{2\sigma}{R} \right) \equiv \frac{\text{Const}}{R} \left(\frac{1}{R_c} - \frac{1}{R} \right) \quad (348)$$

22.3.3 8.3. Sound Attenuation near the Critical Point

Время релаксации параметра порядка для длинноволновых возмущений вблизи критической точки принимает большие значения, и поэтому релаксация параметра порядка может давать заметный вклад в затухание. Как пример рассмотрим релаксацию звуковых колебаний, возбужденных в такой среде.

Равновесное значение параметра порядка, обозначим его через ϕ_0 , в общем случае зависит от температуры и давления, так что при распространении звуковой волны равновесное значение параметра порядка будет меняться:

$$\phi_0 = \phi_{00} + \phi'_0 \quad (349)$$

где ϕ_{00} - усредненное по периоду колебаний равновесное значение параметра порядка, а $\phi'_0 \sim e^{-i\omega t}$ (ω - частота звуковой волны). Для слабо неравновесного значения параметра порядка можно аналогично записать

$$\phi = \phi_{00} + \phi'. \quad (350)$$

Тогда, линеаризуя уравнение релаксации

$$\frac{d\phi}{dt} = -\frac{1}{\tau} (\phi - \phi_0), \quad (351)$$

получим

$$\phi' = \frac{\phi'_0}{1 - i\omega\tau}. \quad (352)$$

Скорость звука определяется производной

$$\begin{aligned} \frac{dP}{d\rho} &= \left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_\phi + \left(\frac{\partial P}{\partial \phi} \right)_\rho \frac{\partial \phi}{\partial \rho} = \left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_\phi + \left(\frac{\partial P}{\partial \phi} \right)_\rho \frac{\partial \phi_0}{\partial \rho} \frac{1}{1 - i\omega\tau} = \\ &= \frac{1}{1 - i\omega\tau} \left(\left[\left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_\phi + \left(\frac{\partial P}{\partial \phi} \right)_\rho \frac{\partial \phi_0}{\partial \rho} \right] - i\omega\tau \left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_\phi \right). \end{aligned} \quad (353)$$

Выражение

$$\left[\left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_\phi + \left(\frac{\partial P}{\partial \phi} \right)_\rho \frac{\partial \phi_0}{\partial \rho} \right] \equiv c_0^2 \quad (354)$$

определяет скорость распространения низкочастотной звуковой волны в случае, когда процесс сжатия-растяжения настолько медленный, что параметр порядка за период колебания успевает релаксировать к своему равновесному значению.

С другой стороны,

$$\left(\frac{\partial P}{\partial \rho}\right)_\phi \equiv c_\infty^2 \quad (355)$$

определяет скорость распространения высокочастотной звуковой волны в случае, когда за период колебания параметр порядка не успевает измениться.

82 9. Методы квантовой теории для описания реакционной кинетики

Таким образом, для произвольной частоты звуковой волны ω

$$c^2 = \frac{1}{1 - i\omega\tau} [c_0^2 - i\omega\tau c_\infty^2] \quad (356)$$

Волновой вектор равен

$$k = \frac{\omega}{c} = \omega \sqrt{\frac{1 - i\omega\tau}{c_0^2 - i\omega\tau c_\infty^2}} \quad (357)$$

Видно, что при распространении звуковая волна затухает и наибольший вклад от релаксации параметра порядка получается при $\omega\tau \sim 1$. При удалении от критической точки время релаксации уменьшается и для $\omega\tau \ll 1$ затухание, связанное с релаксацией параметра порядка, становится слабым:

$$k \approx \frac{\omega}{c_0} + i\frac{\omega^2\tau}{2c_0^3} (c_\infty^2 - c_0^2) \quad (358)$$

Затухание, обусловленное вкладом релаксации параметра порядка, становится слабым, и для высокочастотных звуковых колебаний для $\omega\tau \gg 1$

$$k \approx \frac{\omega}{c_\infty} + i\frac{1}{2\tau c_\infty} \left(\frac{c_\infty^2 - c_0^2}{c_\infty^2} \right) \quad (359)$$

22.3.4 9. Methods of Quantum Theory for Describing Reaction Kinetics

Традиционно для описания кинетики реакций используют уравнения для средних значений концентраций реагирующих веществ. Однако этот подход не учитывает термодинамические флуктуаций концентрации реагирующих веществ. Распределение вещества является равномерным только в среднем - в среднем по достаточно большому объему или в среднем по достаточно длинному интервалу времени. В малых же объемах флуктуации неизбежны.

Так, даже в полностью однородной системе в отсутствие реакций в некотором объеме V имеется дисперсия полного числа частиц N :

$$\langle (N - \bar{N})^2 \rangle = \bar{N}, \quad \bar{N} = nV \quad (360)$$

где n - плотность числа частиц.

Когда происходит реакция, то полное число частиц какого-либо сорта, скажем N_A , даже в равновесии нельзя считать заданным, поскольку акты реакции происходят статистически случайно и лишь в среднем полное число частиц сорта A равно равновесному значению $\bar{N}_A$. Акты реакции могут приводить к пространственным

флуктуациям, выравнивание которых происходит за счет диффузии, процесса достаточно медленного, особенно для длинноволновых флуктуаций, так как флуктуации с характерным размером l выравниваются за характерное время $\tau \sim l^2/D_A$ (D_A – коэффициент диффузии частиц сорта A). Эти флуктуации приводят к другому закону приближения к равновесию, нежели предсказывают уравнения формальной кинетики.

Рассмотрим качественно реакцию диссоциации $A \rightarrow B + B$ и обратную ей реакцию рекомбинации $B + B \rightarrow A$. Пусть сначала молекулы A находятся при низкой температуре, так что полностью устанавливается флуктуационное распределение молекул A , но диссоциации нет. Затем проводится равномерное по пространству нагревание всего объема до температуры, когда диссоциация заметна и измеряется число образовавшихся частиц B .

Формальная кинетика, основанная на уравнениях для средних концентраций

$$\frac{db}{dt} = 2w_+a - w_-b^2, \quad 2a + b = \text{Const}, \quad (361)$$

где w_+ – скорость диссоциации, w_- – скорость рекомбинации, связанные с константой скорости реакции соотношением $K_p(T) = 2w_+/w_-$, предсказывает экспоненциальное приближение к равновесию. Действительно, записывая $b = \langle b \rangle + \delta b$ и учитывая, что из $2a + b = \text{Const}$ следует $\delta a = -\delta b/2$, после линеаризации уравнения,

получим

$$\frac{d\delta b}{dt} = 2w_+\langle a \rangle - w_+\delta b - w_-\langle b \rangle^2 - 2w_-\langle b \rangle\delta b = -2(w_+ + w_-\langle b \rangle)\delta b \quad (362)$$

Откуда

$$\delta b(t) = \delta b(0)e^{-2(w_+ + w_-\langle b \rangle)t} \quad (363)$$

Однако учет флуктуаций числа частиц приводит к совершенно другому закону приближения к равновесию. Кинетику локального установления равновесного состава будем считать достаточно быстрой. В результате реакции возникает локальное равновесие. И пока диффузия (достаточно медленный процесс) не изменила концентраций, мы имеем согласно закону действующих масс локально равновесное соотношение

$$b(\mathbf{r}) = [K_p(T)a(\mathbf{r})]^{1/2} \quad (364)$$

где плотности числа частиц сорта A и B – $a(\mathbf{r})$ и $b(\mathbf{r})$ – зависят от пространственной координаты $\mathbf{r}$; $K_p(T)$ – константа скорости реакции при температуре T . Отсюда находим

$$\langle b(\mathbf{r}) \rangle = \langle K_p^{1/2}(T)(a(\mathbf{r}))^{1/2} \rangle < K_p^{1/2}(T)\langle a(\mathbf{r}) \rangle^{1/2}. \quad (365)$$

Неравенство следует из свойства $\langle \sqrt{x} \rangle < \sqrt{\langle x \rangle}$, т. е. выпуклости функции $(a(\mathbf{r}))^{1/2}$. Таким образом, при неравномерном распределении числа частиц A локально равновесное количество продуктов диссоциации дает меньшую среднюю концентрацию по сравнению с расчетом по средней концентрации исходного вещества A . Запишем

$$a(\mathbf{r}) = \langle a(\mathbf{r}) \rangle + \delta a(\mathbf{r}), \quad \delta a(\mathbf{r}) \ll \langle a(\mathbf{r}) \rangle, \quad (366)$$

так что можно разложить:

$$a^{1/2}(\mathbf{r}) \approx \langle a(\mathbf{r}) \rangle^{1/2} + \frac{1}{2} \frac{\delta a(\mathbf{r})}{\langle a(\mathbf{r}) \rangle^{1/2}} - \frac{1}{8} \frac{[\delta a(\mathbf{r})]^2}{\langle a(\mathbf{r}) \rangle^{3/2}} \quad (367)$$

После усреднения получим

$$\langle a^{1/2}(\mathbf{r}) \rangle \approx \langle a(\mathbf{r}) \rangle^{1/2} \left(1 - \frac{1}{8} \frac{\langle [\delta a(\mathbf{r})]^2 \rangle}{\langle a(\mathbf{r}) \rangle^2} \right) \quad (368)$$

Из распределения Пуассона находим

$$\langle [\delta a(\mathbf{r})]^2 \rangle = \left\langle \left(\frac{\Delta N_A}{V} \right)^2 \right\rangle = \frac{\langle N_A \rangle}{V^2} = \frac{\langle a \rangle}{V} \rightarrow \frac{\langle [\delta a(\mathbf{r})]^2 \rangle}{\langle a(\mathbf{r}) \rangle^2} = \frac{1}{\langle a \rangle V}. \quad (369)$$

За время t диффузия сглаживает флуктуации на масштабах $l \sim (Dt)^{1/2}$, т. е. в объеме $V \sim (Dt)^{3/2}$. Тогда концентрация b частиц сорта B приближается к равновесию по закону

$$b(t) = \langle b \rangle \left[1 - \frac{\alpha}{\langle a \rangle (Dt)^{3/2}} \right] \quad (370)$$

где α - число порядка 1.

Другой характерный пример дает необратимая реакция аннигиляции $A + A \rightarrow 0$ (допустим, что продукты реакции удаляются или при выбранных условиях скорость обратной реакции очень мала). В данном примере скорость процесса на поздних стадиях будет определяться также скоростью диффузии.

Полное теоретическое описание системы классически реагирующих частиц обеспечивается кинетическим уравнением для набора функций вероятностей $[P_N]$, элементы которого дают вероятности найти в момент времени t в системе N частиц в точках $\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N$. Поскольку все частицы одного типа идентичны, функции P_N симметричны относительно перестановок аргументов.

Удобно для начала разбить все пространство на ячейки (или ввести решетку), приписывая координату центру ячейки (узлу решетки). Этот формальный прием облегчает описание и не меняет физики задачи, если интересоваться крупномасштабным и долговременным поведением системы реагирующих частиц. Тогда кинетическое уравнение для вероятности $P[n]$ найти нашу систему в состоянии $[n] = (n_1, n_2, \dots)$, где n_i - числа заполнения каждой ячейки (узла), принимает вид

$$\frac{dP[n]}{dt} = \sum_{[n']} R_{n' \rightarrow n} P[n'] - \sum_{[n']} R_{n \rightarrow n'} P[n] \quad (371)$$

где $R_{n \rightarrow n'}$ - скорости перехода от состояния $[n]$ к состоянию $[n']$. Кинетическое уравнение смешивает функции P_N с разным полным

9. Методы квантовой теории для описания реакционной кинетики

числом частиц, поскольку в общем случае число частиц в процессе реакции не сохраняется.

Несохранение числа частиц и их тождественность наводит на мысль попытаться применить для рассмотрения классического кинетического уравнения хорошо известный способ описания многочастичной квантовой задачи, основанный на использовании представления вторичного квантования, вводя операторы рождения и уничтожения. Удобно ввести бозе-операторы $a_i^\dagger, a_i$ для каждой ячейки (узла) i , подчиняющиеся коммутационным соотношениям

$$[a_i, a_j^\dagger] = a_i a_j^\dagger - a_j^\dagger a_i = \delta_{ij} \quad (372)$$

и вакуумное состояние $|0\rangle$, такое, что $a_i |0\rangle = 0$. Классическому состоянию реакционной системы, которая описывается вероятностью $P([n], t)$ иметь в момент времени t в i -й ячейке (узле) n_i частиц, сопоставим вектор состояния

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{[n]} P([n], t) (a_1^\dagger)^{n_1} (a_2^\dagger)^{n_2} \dots |0\rangle \quad (373)$$

Тогда кинетическое уравнение можно формально записать как уравнение Шредингера:

$$\frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} = \hat{H}|\psi(t)\rangle \quad (374)$$

Этот подход известен как техника Doi-Peliti (см.: [18]).

Число частиц в данной ячейке (узле) может меняться как за счет реакций, так и за счет диффузии частиц. Сначала рассмотрим диффузию. Сосредоточим внимание сначала только на двух узлах, 1 и 2, и запишем кинетическое уравнение для $P(n_1, n_2)$, описывающее только переход $1 \rightarrow 2$:

$$\frac{dP(n_1, n_2)}{dt} = W(n_1 + 1)P(n_1 + 1, n_2 - 1) - Wn_1P(n_1, n_2) \quad (375)$$

где W - вероятность перехода. Определяя вектор состояния

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n_1, n_2} P(n_1, n_2, t) (a_1^\dagger)^{n_1} (a_2^\dagger)^{n_2} |0\rangle \quad (376)$$

можно переписать кинетическое уравнение в виде

$$\begin{aligned} \frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} &= W a_1 a_2^\dagger \sum_{n_1, n_2} P(n_1 + 1, n_2 - 1, t) (a_1^\dagger)^{n_1+1} (a_2^\dagger)^{n_2-1} |0\rangle - \\ &- W a_1^\dagger a_1 \sum_{n_1, n_2} P(n_1, n_2, t) (a_1^\dagger)^{n_1} (a_2^\dagger)^{n_2} |0\rangle = \\ &= W (a_2^\dagger - a_1^\dagger) a_1 |\psi\rangle \equiv \hat{H}_{12} |\psi\rangle \end{aligned} \quad (377)$$

Обратные переходы $2 \rightarrow 1$ описываются аналогично с помощью оператора эволюции $\hat{H}_{21} = W (a_1^\dagger - a_2^\dagger) a_2$. Тогда процесс диффузии между узлами 1 и 2 описывается оператором эволюции

$$\hat{H}_d = W (a_1^\dagger - a_2^\dagger) a_2 - W (a_1^\dagger - a_2^\dagger) a_1 = -W (a_2^\dagger - a_1^\dagger) (a_2 - a_1) \quad (378)$$

Для N ячеек (узлов) диффузия описывается оператором

$$\hat{H}_d = -W \sum_{\vec{i}, \vec{e}} (a_{\vec{i}+\vec{e}}^\dagger - a_{\vec{i}}^\dagger) (a_{\vec{i}+\vec{e}} - a_{\vec{i}}) \quad (379)$$

где мы предположили, что переходы происходят только между ближайшими ячейками. Для обобщения на непрерывное описание процесса диффузии заменяем

$$\sum_{\vec{e}} (a_{\vec{i}+\vec{e}}^\dagger - a_{\vec{i}}^\dagger) (a_{\vec{i}+\vec{e}} - a_{\vec{i}}) \rightarrow d_0^2 (\vec{\nabla} a^\dagger(\mathbf{r})) \cdot (\vec{\nabla} a(\mathbf{r})) \quad (380)$$

где d_0 - расстояние между ближайшими ячейками (узлами). Включая d_0^2 в коэффициент диффузии $D = W d_0^2$, получим

$$H_d = -D \int d\mathbf{r} (\vec{\nabla} a^\dagger(\mathbf{r})) \cdot (\vec{\nabla} a(\mathbf{r})) \quad (381)$$

Переходя к фурье-компонентам, имеем

$$H_d = -D \sum_{\mathbf{k}} k^2 a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}} \quad (382)$$

Рассмотрим теперь кинетическое уравнение для процесса реакции между частицами. Естественно, что оно будет различным для разных типов реакций. Поэтому мы в качестве примера рассмотрим реакцию двухчастичной аннигиляции, $A + A \rightarrow 0$, происходящую между любыми двумя частицами в одной ячейке (узле). В этом случае кинетическое уравнение принимает вид

$$\frac{dP(n_1)}{dt} = \lambda(n_1 + 2)(n_1 + 1)P(n_1 + 2) - \lambda(n_1)(n_1 - 1)P(n_1), \quad (383)$$

где за λ обозначена для удобства удвоенная вероятность аннигиляции. Определяя вектор состояния

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n_1=0}^{\infty} P(n_1, t) (a_1^{\dagger})^{n_1} |0\rangle, \quad (384)$$

можно переписать кинетическое уравнение в виде

$$\begin{aligned} \frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} &= \lambda a_1^2 \sum_{n_1=0}^{\infty} P(n_1 + 2, t) (a_1^{\dagger})^{n_1+2} |0\rangle - \\ &- \lambda (a_1^{\dagger})^2 a_1^2 \sum_{n_1=0}^{\infty} P(n_1, t) (a_1^{\dagger})^{n_1} |0\rangle = \lambda [a_1^2 - (a_1^{\dagger})^2 a_1^2] |\psi\rangle \equiv \hat{H} |\psi\rangle. \end{aligned} \quad (385)$$

Отметим, что вектор

$$a_1^2 \sum_{n_1=0}^{\infty} P(n_1 + 2, t) (a_1^{\dagger})^{n_1+2} |0\rangle \quad (386)$$

действительно равен $a_1^2 |\psi\rangle$, так как его можно представить как

$$a_1^2 \left[\sum_{n_1=0}^{\infty} P(n_1 + 2, t) (a_1^{\dagger})^{n_1+2} |0\rangle + P(1, t) a_1^{\dagger} |0\rangle + P(0, t) |0\rangle \right], \quad (387)$$

ввиду того, что a_1^2 при действии на два последних члена даст 0.

Для N ячеек (узлов) оператор эволюции H_a за счет реакции аннигиляции равен

$$H_a = \sum_i \lambda [a_i^2 - (a_i^{\dagger})^2 a_i^2]. \quad (388)$$

Обобщение на непрерывный случай выглядит так:

$$H_a = \int d\mathbf{r} \lambda [a^2(\mathbf{r}) - (a^{\dagger}(\mathbf{r}))^2 a^2(\mathbf{r})]. \quad (389)$$

Переходя к фурье-компонентам операторов рождения и уничтожения,

$$a(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \quad a^{\dagger}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^{\dagger} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \quad (390)$$

получим

$$H_a = \sum_{\mathbf{k}} \lambda a_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}} - \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{q}} \lambda a_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{k}_2 - \mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{k}_1} a_{\mathbf{k}_2}. \quad (391)$$

Условие нормировки для функции распределения для одной ячейки (узла) $\sum_n P(n) = 1$ в терминах векторов состояния принимает вид

$$\langle 0 | e^{a_1} \sum_{n_1} P(n_1) (a_1^\dagger)^{n_1} | 0 \rangle = 1, \quad (392)$$

поскольку для любых n_1 выполняется условие

$$\langle 0 | e^{a_1} (a_1^\dagger)^{n_1} | 0 \rangle = 1, \quad (393)$$

так как $\langle 0 | a_1^n (a_1^\dagger)^n | 0 \rangle = n!$, в чем легко убедиться, используя коммутационные соотношения.

В случае непрерывного описания условие нормировки

$$\langle 0 | e^{\int d\mathbf{r} a(\mathbf{r})} \sum_{N=0}^{\infty} P_N(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) a^\dagger(\mathbf{r}_1) \dots a^\dagger(\mathbf{r}_N) | 0 \rangle = 1, \quad (394)$$

с учетом коммутационных соотношений

$$[a(\mathbf{r}_i), a^\dagger(\mathbf{r}_j)] = \delta(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j), \quad (395)$$

сводится к обычному

$$\sum_{N=0}^{\infty} \int d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N P_N(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = 1 \quad (396)$$

В терминах фурье-компонент нормировочный вектор записывается в виде

$$\langle 0 | e^{\int d\mathbf{r} a(\mathbf{r})} = \langle 0 | e^{\sqrt{V} a_{\mathbf{k}=0}}, \quad (397)$$

поскольку

$$\int d\mathbf{r} \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} = \sqrt{V} a_{\mathbf{k}=0} \equiv \sqrt{V} a_0 \quad (398)$$

Средние значения физических величин $A(n_1, n_2, \dots)$ определяются как средние значения операторов $\hat{A}(a_1^\dagger a_1, \dots)$, соответствующих этой величине, выраженных через операторы рождения и уничтожения, в обкладках $\langle 0 | e^{\sqrt{V} a_0} \hat{A}(a_1^\dagger a_1, \dots) | \psi(t) \rangle$. Например, для оператора полного числа частиц $\hat{N}$

$$\hat{N} = \int d\mathbf{r} a^\dagger(\mathbf{r}) a(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} \quad (399)$$

среднее значение $\bar{N}$ равно

$$\bar{N} = \bar{n}V = \langle 0 | e^{\sqrt{V} a_0} \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} | \psi(t) \rangle = \sqrt{V} \langle 0 | e^{\sqrt{V} a_0} a_0 | \psi(t) \rangle, \quad (400)$$

поскольку для всех $\mathbf{k} \neq 0$ оператор $a_{\mathbf{k}}^\dagger$ коммутирует с $e^{\sqrt{V} a_0}$, давая 0 при действии на вакуумное состояние.

Скорость изменения со временем физических величин $\dot{\hat{A}}$ находится как среднее значение коммутатора соответствующего оператора $\hat{A}$ с оператором эволюции $\hat{H}$,

$$\langle 0 | e^{\sqrt{V}a_0} [\hat{A}, \hat{H}] | \psi(t) \rangle, \quad (401)$$

так как из условия нормировки

$$\langle 0 | e^{\sqrt{V}a_0} | \psi(t) \rangle = 1 \quad (402)$$

следует

$$\langle 0 | e^{\sqrt{V}a_0} \frac{d}{dt} | \psi(t) \rangle = \langle 0 | e^{\sqrt{V}a_0} \hat{H} | \psi(t) \rangle = 0 \quad (403)$$

и в силу произвольности состояния $|\psi\rangle$ получаем $\langle 0 | e^{\sqrt{V}a_0} \hat{H} = 0$.
Для упрощения дальнейших вычислений плотности числа частиц

$$n(t) = \langle 0 | e^{\sqrt{V}a_0} a_0 | \psi(t) \rangle \frac{1}{\sqrt{V}} \quad (404)$$

выполним некоторые преобразования и для сокращения записи положим в дальнейшем $V = 1$. Вектор $|\psi(t)\rangle$ удовлетворяет уравнению

$$\frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} = (\hat{H}_0 + \hat{H}_a) |\psi(t)\rangle \quad (405)$$

в котором операторы диффузии

$$H_0 = -D \sum_{\mathbf{k}} k^2 a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} \quad (406)$$

и аннигиляции

$$H_a = \sum_{\mathbf{k}} \lambda_0 a_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}} - \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{q}} \lambda_0 a_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{k}_2 - \mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{k}_1} a_{\mathbf{k}_2} \quad (407)$$

не коммутируют. Как хорошо известно из квантовой теории, в этом случае удобно решать уравнение эволюции по теории возмущений в представлении взаимодействия.

Введем вектор состояния в представлении взаимодействия

$$|\psi_I(t)\rangle = e^{-\hat{H}_0 t} |\psi(t)\rangle, \quad (408)$$

который удовлетворяет уравнению

$$\frac{d|\psi_I(t)\rangle}{dt} = e^{-\hat{H}_0 t} \hat{H}_a e^{\hat{H}_0 t} |\psi_I(t)\rangle = \hat{H}_a(t) |\psi_I(t)\rangle \quad (409)$$

где мы ввели оператор аннигиляции в представлении взаимодействия $\hat{H}_a(t) \equiv e^{-\hat{H}_0 t} \hat{H}_a e^{\hat{H}_0 t}$. Это уравнение можно решать методом итераций:

$$\begin{aligned} |\psi_I(t)\rangle^{(0)} &= |\psi(0)\rangle, \quad |\psi_I(t)\rangle^{(1)} = \int_0^t H_a(t') dt' |\psi(0)\rangle \\ |\psi_I(t)\rangle^{(2)} &= \int_0^t H_a(t') dt' \int_0^{t'} H_a(t'') dt'' |\psi(0)\rangle \end{aligned} \quad (410)$$

и т. д.

Выберем в качестве начального состояние распределение Пуассона с плотностью числа частиц n_0 . Ему соответствует вектор состояния

$$|\psi(0)\rangle = \sum_{m=0}^{\infty} e^{-n_0} \frac{n_0^m}{m!} (a_0^\dagger)^m |0\rangle = e^{n_0(a_0^\dagger - 1)} |0\rangle. \quad (411)$$

Теперь удобно в уравнении (404), используя соотношения коммутации, перенести действие оператора e^{a_0} на вакуумное состояние $|0\rangle$. Легко убедиться, что для произвольной функции $F(a_{\mathbf{k}}, a_{\mathbf{q} \neq 0}^\dagger, a_0^\dagger)$ операторов рождения и уничтожения выполняется свойство

$$e^{a_0} F(a_{\mathbf{k}}, a_{\mathbf{q} \neq 0}^\dagger, a_0^\dagger) = F(a_{\mathbf{k}}, a_{\mathbf{q} \neq 0}^\dagger, a_0^\dagger + 1) e^{a_0} \quad (412)$$

Тогда оператор диффузии не изменится, а оператор аннигиляции в представлении взаимодействия примет вид

$$H_a = -2\lambda_0 \sum_{\mathbf{1}, \mathbf{2}, \mathbf{3}} a_1^\dagger a_2 a_3 \Delta(\mathbf{1} - \mathbf{2} - \mathbf{3}) - \lambda_0 \sum_{\mathbf{4}, \mathbf{5}, \mathbf{6}, \mathbf{7}} a_4^\dagger a_5^\dagger a_6 a_7 \Delta(\mathbf{4} + \mathbf{5} - \mathbf{6} - \mathbf{7}),$$

где для краткости волновые вектора обозначены числами, т. е. $\mathbf{1} \equiv \mathbf{k}_1$ и т. д. Чтобы не усложнять формулы, для H_a оставим прежнее обозначение.

В итоге получим следующее выражение для плотности числа частиц:

$$\begin{aligned} n(t) = \langle 0 | a_0 e^{-tD \sum_{\mathbf{k}} k^2 a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}}} & \left[1 + \int_0^t H_a(t') dt' + \right. \\ & \left. + \int_0^t H_a(t') dt' \int_0^{t'} H_a(t'') dt'' + \dots \right] e^{n_0 a_0^\dagger} | 0 \rangle \end{aligned} \quad (414)$$

где

$$H_a(t) = e^{tD \sum_{\mathbf{k}} k^2 a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}}} H_a e^{-tD \sum_{\mathbf{k}} k^2 a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}}} \quad (415)$$

при этом

$$a_{\mathbf{k}}^\dagger(t) = e^{tDk^2} a_{\mathbf{k}}^\dagger, \quad a_{\mathbf{k}}(t) = e^{-tDk^2} a_{\mathbf{k}} \quad (416)$$

Для начала рассмотрим вычисление плотности числа частиц с учетом только первого члена в операторе H_a (413). Это соответствует так называемому приближению древесных диаграмм (см. ниже). Тогда

$$\begin{aligned} n(t) = \langle 0 | a_0 e^{n_0 a_0^\dagger} | 0 \rangle + \\ + \langle 0 | a_0 \int_0^t dt' (-2\lambda_0) \sum_{\mathbf{1}, \mathbf{2}, \mathbf{3}} a_1^\dagger(t') a_2(t') a_3(t') \Delta(\mathbf{1} - \mathbf{2} - \mathbf{3}) e^{n_0 a_0^\dagger} | 0 \rangle + \\ + \langle 0 | a_0 \int_0^t dt' (-2\lambda_0) \sum_{\mathbf{1}, \mathbf{2}, \mathbf{3}} a_1^\dagger(t') a_2(t') a_3(t') \Delta(\mathbf{1} - \mathbf{2} - \mathbf{3}) \times \\ \times \int_0^{t'} dt'' (-2\lambda_0) \sum_{\mathbf{4}, \mathbf{5}, \mathbf{6}} a_4^\dagger(t'') a_5(t'') a_6(t'') \Delta(\mathbf{4} - \mathbf{5} - \mathbf{6}) e^{n_0 a_0^\dagger} | 0 \rangle + \dots \end{aligned} \quad (417)$$

Разлагая $e^{n_0 a_0^\dagger}$ по степеням n_0 , получаем:

$$\begin{aligned} n(t) = n_0 \langle 0 | a_0(t) a_0^\dagger(0) | 0 \rangle + \\ + (-2\lambda_0) n_0^2 \int_0^t dt' \langle 0 | a_0(t) a_0^\dagger(t') | 0 \rangle \langle 0 | a_0(t') a_0^\dagger(0) | 0 \rangle \langle 0 | a_0(t') a_0^\dagger(0) | 0 \rangle + \dots \end{aligned} \quad (418)$$

Этот ряд для $n(t)$ удобно представить в виде диаграмм, сопоставляя выражению $\langle 0|a_0(t)a_0^\dagger(t')|0\rangle$ прямую линию, а вершине, где соединяются линии, - множитель $(-2\lambda_0)$ и интегрирование по времени (рис. 7).

В аналитическом виде получается следующее интегральное уравнение:

$$n(t) = n_0 - 2\lambda_0 \int_0^t dt' n^2(t') \quad (419)$$

94 9. Методы квантовой теории для описания реакционной кинетики

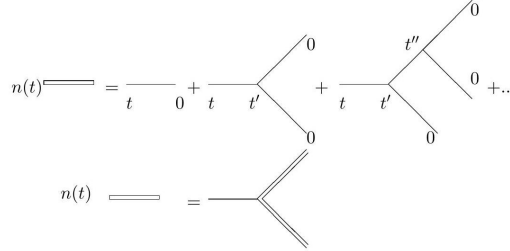


Рис. 7. Диаграммное представление для $n(t)$ в древесном приближении (верхний рисунок) и полученное в результате суммирования диаграмм на каждой из двух ветвей дерева уравнение для $n(t)$ (нижний рисунок)

Откуда получаем

$$\frac{dn(t)}{dt} = -2\lambda_0 n^2(t) \quad n(t) = \frac{n_0}{1 + 2\lambda_0 n_0 t} \sim \frac{1}{t} \quad \text{для} \quad t \gg 1/\lambda_0 n_0. \quad (420)$$

Учет второго члена в операторе H_a приводит к изменению ("перенормировке") вершины λ_0 , как это видно из диаграмм (рис. 8). Учет диаграмм, приведенных на рис. 8, соответствует приближению малой плотности частиц (детали см. в: [18]), что, как увидим ниже, также подтверждается результатами численного моделирования (рис. 9, 10).

Вводя обозначения

$$G_0(t - t', \mathbf{k}) = \langle 0|a_{\mathbf{k}}(t)a_{\mathbf{k}}^\dagger(t')|0\rangle = e^{-Dk^2(t-t')}$$

можно записать ряд для $\lambda(t)$ в аналитическом виде:

$$\lambda(t) = \lambda_0 + \lambda_0 \int_0^t 2 \sum_{\mathbf{k}} G_0(t - t', \mathbf{k}) G_0(t - t', -\mathbf{k}) \lambda(t') dt' + \dots \quad (421)$$

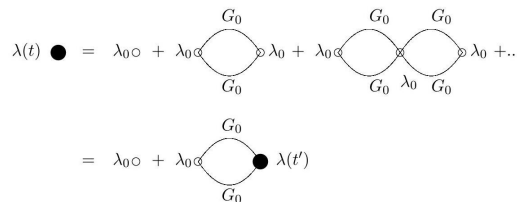


Рис. 8. Диаграммное представление для $\lambda(t)$ (верхний рисунок) и уравнение, полученное в результате суммирования (нижний рисунок)

где дополнительный множитель 2 перед суммой возникает из-за двух способов спаривания операторов $a_{\mathbf{k}}$ и $a_{\mathbf{k}}^\dagger$. Выполняя преобразование Лапласа

$$\lambda(E) = \int_0^\infty e^{-Et} \lambda(t) dt$$

и суммируя геометрическую прогрессию, получим

$$\lambda(E) = \frac{\lambda_0}{E} + \lambda(E) 2\lambda_0 \sum_{\mathbf{k}} G_0^2(E), \quad (422)$$

где

$$G_0^2(E) = (E + 2Dk^2)^{-1}. \quad (423)$$

Откуда

$$\lambda(E) = \frac{\lambda_0}{E \left(1 + 2\lambda_0 \sum_{\mathbf{k}} (E + 2Dk^2)^{-1}\right)}. \quad (424)$$

Выполняя обратное преобразование Лапласа

$$\lambda(t) = \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} e^{Et} \lambda(E) \frac{dE}{2\pi i},$$

найдем $\lambda(t)$ и подставим в уравнение для плотности числа частиц:

$$\frac{dn(t)}{dt} = -2\lambda(t)n^2(t). \quad (425)$$

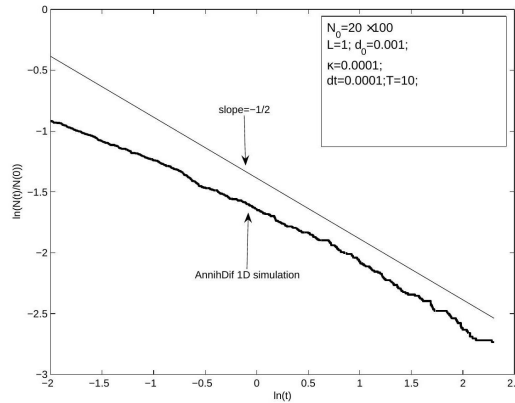


Рис. 9. Логарифмическая зависимость числа частиц от времени для одномерной задачи

Рассмотрим скорость убывания числа частиц при $t \rightarrow \infty$ (соответственно это означает, что основной вклад в $\lambda(E)$ дают значения $E \rightarrow 0$) для разных значений размерности пространства d . Для $d = 1$

$$\sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{E + 2Dk^2} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{E + 2Dk^2} = \frac{1}{2\sqrt{2DE}}$$

так что

$$\lambda(E) \sim \sqrt{\frac{D}{E}} \rightarrow \lambda(t) \sim \sqrt{\frac{D}{t}}, \quad (426)$$

и соответственно

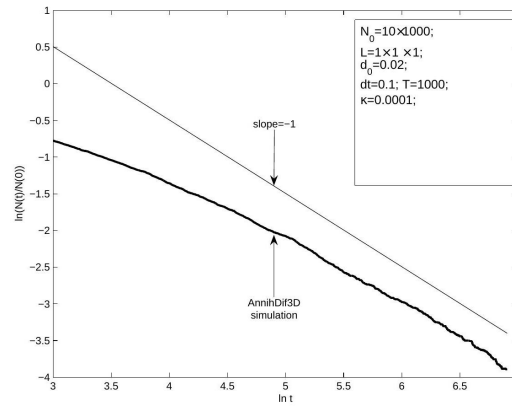


Рис. 10. Логарифмическая зависимость числа частиц от времени для трехмерной задачи

$$n(t) \sim \sqrt{\frac{1}{Dt}}. \quad (427)$$

Таким образом, в одномерном случае учет флуктуаций приводит к качественно другой зависимости скорости аннигиляции от времени. На рис. 9 приведена в логарифмическом масштабе зависимость числа частиц от времени, полученная численным моделированием одномерной задачи, а также прямая с наклоном $-1/2$. Видно приближение данных численного моделирования к теоретической зависимости по мере уменьшения плотности числа частиц. Для $d = 3$ имеем

$$\sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{E + 2Dk^2} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3k}{E + 2Dk^2} = \frac{k_{\max}}{D} \rightarrow \quad (428)$$

$$\lambda(E) \sim \frac{1}{E} \rightarrow \lambda(t) = \text{Const}$$

и, следовательно, получается зависимость $n(t) \sim 1/t$, как и в теории среднего поля.

На рис. 10 приведена в логарифмическом масштабе зависимость числа частиц от времени, полученная численным моделированием трехмерной задачи, а также прямая с наклоном -1 — ожидаемая теоретическая зависимость для малой плотности числа частиц.

В двух измерениях появляются лишь логарифмические поправки к этой зависимости.

22.4 XII Kinetics of Phase Transitions

22.4.1 §99. Kinetics of first-order phase transitions. Nucleation

The basic ideas of the thermodynamic theory of nucleus formation in a phase transition are as follows (SP 1, § 162).

The change from a metastable to a stable phase occurs as the result of fluctuations in a homogeneous medium, which form small quantities of a new phase, or nuclei. The energetically unfavourable process of creation of an interface, however, has the result that when the nucleus is below a certain size it is unstable and disappears again. Only nuclei whose size a is above a definite value a_{cr} (for a given state of the metastable phase) are stable; this is called the critical size, and nuclei of this size will be called critical nuclei. They are assumed to be macroscopic objects containing large numbers of molecules. The entire theory is therefore valid only for metastable states that are not too close to the limit of absolute instability of the phase; as this limit is approached, the critical size decreases to a value of the order of molecular dimensions.

With a purely thermodynamic approach, one can put only the problem of calculating the probability of occurrence in a medium of fluctuational nuclei of various sizes, the medium being regarded as in equilibrium. This is a point of fundamental importance. Since the state of the metastable phase does not actually correspond to complete statistical equilibrium, this treatment applies only to times much less than the critical nucleus formation time (reciprocal probability per unit time), after which the change to the new phase occurs in practice, and the metastable state ceases to exist. For the same reason, the thermodynamic calculation of the formation probability is feasible only for nuclei with size $a < a_{\text{cr}}$; larger nuclei develop into the new phase. That is, such large fluctuations are not among the group of microscopic states which correspond to the (metastable) macroscopic state under consideration.

Instead of the thermodynamic probability of nucleation, we shall refer to a quantity proportional to this, the "equilibrium" (in the sense mentioned) distribution function for nuclei of various sizes existing in the medium, denoted by $f_0(a)$; $f_0 da$ is the number of nuclei per unit volume of the medium with sizes in the range da . According to the thermodynamic theory of fluctuations,

$$f_0(a) \propto \exp \{-R_{\text{min}}(a)/T\}, \quad (99.1)$$

In SP 1, § 162, only nuclei of the new phase which have just this critical size were considered. where R_{min} is the minimum work needed to form a nucleus of a given size. This is made up of volume and surface parts, and for a spherical nucleus with radius a it is

$$R_{\text{min}} = -\frac{8\pi a^3 \alpha}{3a_{\text{cr}}} + 4\pi a^2 \alpha$$

where α is the surface tension coefficient and the critical radius a_{cr} is expressed in terms of the thermodynamic quantities for the two phases; see SP1, 162, Problem 2. The value $a = a_{\text{cr}}$ corresponds to the maximum of $R_{\text{min}}(a)$, and near it

$$R_{\text{min}} = \frac{4}{3}\pi\alpha a_{\text{cr}}^2 - 4\pi\alpha(a - a_{\text{cr}})^2. \quad (99.2)$$

The maximum of R_{min} corresponds to an exponentially sharp minimum of the distribution function. Neglecting the much slower variation with a of the coefficient of the exponential, we have

$$f_0(a) = f_0(a_{\text{cr}}) \exp \{4\pi\alpha(a - a_{\text{cr}})^2/T\}, \quad (99.3)$$

where [†]

$$f_0(a_{\text{cr}}) = \text{constant} \times \exp \{-4\pi\alpha a_{\text{cr}}^2/3T\}.$$

From the above discussion, the value $a = a_{\text{cr}}$ corresponds to the limit beyond which large quantities of the new phase begin to be formed. More precisely, we should refer not to a limit point $a = a_{\text{cr}}$ but to a critical range of values of a near that point, with width $\delta a \sim (T/4\pi\alpha)^{1/2}$. The fluctuational development of nuclei in this size range can still, with appreciable probability, throw them back into the subcritical range, but nuclei beyond the critical range will inevitably develop into a new phase.

Since the thermodynamic theory is limited to the stage before the actual phase transition, it cannot provide information about the course of this process, for instance the rate of the process. That would require a kinetic analysis of the development of the nuclei, which ultimately merge into the new phase. [‡]

Let $f(t, a)$ be the required "kinetic" size distribution function of the nuclei. The "elementary process" which changes the size of a nucleus is the attachment to it, or the loss by it, of one

molecule, and this is to be regarded as a small change, since in the present theory the nuclei are macroscopic objects. We may therefore describe the growth of the nuclei by a Fokker-Planck equation:

$$\partial f / \partial t = -\partial s / \partial a, \quad (99.4)$$

where s is the flux in "size space":

$$s = -B \partial f / \partial a + A f. \quad (99.5)$$

The quantity B is a "nuclear size diffusion coefficient"; A is connected with B by a relationship which follows from the fact that s is zero for the equilibrium distribution. With the latter in the form (99.1), and neglecting the slow variation of the coefficient of the exponential, we find

$$A = -B R'_{\min}(a) / T. \quad (99.6)$$

Let us now find the stationary solution corresponding to a continuous phasetransition process. Then $s = \text{constant}$, and this constant flux (in the direction of increasing size) is just the number of nuclei passing through the critical range per unit time and unit volume of the medium, i.e. it defines the rate of the process.

We can rewrite the expression (99.5) for the flux by expressing it, using (99.6), in terms of the ratio f/f_0 instead of f itself. Then the condition of constant flux becomes

$$-B f_0 \frac{\partial}{\partial a} (f/f_0) = s. \quad (99.7)$$

Hence

$$f/f_0 = -s \int \frac{da}{B f_0} + \text{constant}$$

The constant here, and s , are found from the boundary conditions for small and large a . The fluctuation probability increases rapidly with decreasing size, and small nuclei therefore have a high probability of occurrence. The stock of such nuclei may be regarded as made up so quickly that their number continues to have its equilibrium value, despite the constant depletion by the flux s . This is expressed by the boundary condition $f/f_0 \rightarrow 1$ as $a \rightarrow 0$. The boundary condition for large a can be established by noting that above the critical range the function f_0 defined by (90.1) (which is actually not valid there) increases without limit, whereas the true distribution function $f(a)$ of course remains finite. This situation is expressed by the condition $f/f_0 = 0$, imposed somewhere above the critical range; precisely where, is of no importance (see below), and we shall arbitrarily apply it as $a \rightarrow \infty$.[†]

The solution which satisfies both the above conditions is

$$f/f_0 = s \int_a^\infty da / B f_0 \quad (99.8)$$

and s is determined by

[†] The coefficient of the exponential in $f_0(a_{\text{cr}})$ cannot be expressed in terms of just the macroscopic properties of the phases. For a qualitative estimate, we may suppose that this factor is proportional to the particle number density N_1 in the main phase (1) and to the derivative dV/da , where N is the number of particles in a nucleus of the new phase (2). Putting $N_1 \sim 1/v_1$, $N \sim a_{\text{cf}}^3/v_2$, where v_1 and v_2 are the volumes per molecule in the two phases, we obtain as an estimate of the constant $a_{\text{cf}}^2/v_1 v_2$.

[‡] The theory given below is due to Ya. B. Zel'dovich (1942).

$$1/s = \int_0^\infty da/Bf_0 \quad (99.9)$$

The integrand has a sharp maximum at $a = a_{\text{cr}}$. Using the expression (99.3) near that point, we can extend the integration with respect to $a - a_{\text{cr}}$ in (99.9) from $-\infty$ to ∞ , regardless of precisely where (outside the critical range) the upper limit in (99.8) and (99.9) is taken, i.e. precisely where the boundary condition is imposed. The result is

$$s = 2\sqrt{(\alpha/T)B(a_{\text{cs}})f_0(a_{\text{cr}})} \quad (99.10)$$

This is the number of "viable" nuclei (i.e. those that have passed through the critical range) formed in stationary conditions per unit time and per unit volume of the metastable phase, expressed in terms of the equilibrium number of critical nuclei given by the thermodynamic theory.

For the distribution function $f(a)$ itself, formula (99.8) in the subcritical range gives simply $f(a) \approx f_0(a)$. Above the critical range, (99.8) tells us only that $f \ll f_0$, in accordance with the boundary condition stated. It is evident from the physical picture of the process that in this range the distribution function is constant: having reached that point, the nucleus becomes steadily larger, with practically no change in the reverse direction. Accordingly, we can here neglect the term containing the derivative $\partial f/\partial a$ in the flux (99.5), writing $s = Af$. From the significance of the flux s , the coefficient A acts as a velocity in size space, da/dt . The growth of a nucleus beyond the critical range, however, takes place in accordance with the macroscopic equations, by means of which the derivative da/dt can be independently determined:

$$A = (da/dt)_{\text{macro}} \quad (99.11)$$

the subscript indicating the result of such a calculation. [†]

From (99.6), we then find

$$\begin{aligned} B(a) &= -\frac{T}{R'_{\text{min}}(a)} \left(\frac{da}{dt} \right)_{\text{macro}} \\ &= \frac{T}{8\pi\alpha(a - a_{\text{cr}})} \left(\frac{da}{dt} \right)_{\text{macro}} \end{aligned} \quad (99.12)$$

Strictly speaking, the function $B(a)$ thus calculated pertains to the range $a > a_{\text{cr}}$, whereas we are interested in the value of $B(a_{\text{cr}})$ for substitution in (99.10). However, since $B(a)$ has no singularity at $a = a_{\text{cr}}$, the function just found can be used at that point also. As $a \rightarrow a_{\text{cr}}$, the derivative $(da/dt)_{\text{macro}}$ tends to zero (the nucleus is in-unstable-equilibrium); division by $a - a_{\text{cr}}$ gives a finite result.

Formula (99.12) makes it possible in principle to calculate the coefficient $B(a_{\text{cr}})$ and hence the rate of formation of nuclei, without using a microscopic treatment.

For example, in the case of boiling we have to apply the hydrodynamic equations to consider the growth of a vapour bubble in the liquid; for precipitation of a solute from a supersaturated solution, we have to deal with the growth of a precipitated grain as a result of the diffusion of the substance to it from the surrounding solution.

^{1†} Similar arguments have been used in solving a different problem (§ 24).

^{1†} The question may arise of the correspondence between (99.11) and the "microscopic" definition (21.4), according to which the rate $\Sigma \delta a/\delta t$ (summed over elementary growth events) is not A itself but the sum $\bar{A} = A + B'(a)$. But the derivative $B'(a)$ is small (outside the critical range) in comparison with the value (99.6), which includes the large factor R'_{man}/T , and must be omitted. Quantities of this order have already been neglected in deriving (99.6), when the coefficient of the exponential in (99.1) was regarded as constant.

PROBLEM

Determine the "size diffusion coefficient" for the precipitation of a substance from a super-saturated (but nevertheless weak) solution; the nuclei are assumed to be spherical.

Solution. The thermodynamic formulae are as follows. The critical radius at which a nucleus is precipitated from a supersaturated solution is

$$a_{\text{cr}} = 2\alpha v' / (\mu' - \mu'_0);$$

see SP 1, § 162. Problem 2. In the present case, μ and v' are the chemical potential and molecular volume of the substance of the nucleus, and μ' the chemical potential of the solute in solution: $\mu' = T \log c + \psi(P, T)$, where c is the concentration. With the concentration c_{0x} of the saturated solution above a plane surface of solute: $T \log c_{0x} + \psi = \mu'_0$, we have

$$\mu' - \mu'_0 = T \log (c/c_{0x}) \approx T (c - c_{0x}) / c_{0x};$$

the latter equation is valid for weak solutions. The critical radius is therefore

$$a_{\text{cr}} = 2\alpha v' c_{0x} / T (c - c_{0x}) \quad (1)$$

The formula

$$\begin{aligned} C_{0a} &= C_{0x} (1 + 2\alpha v' / Ta) \\ &= C_{0x} + (a_{\text{cl}} / a) (c - c_{0x}) \end{aligned} \quad (2)$$

gives the saturation concentration c_{0a} above a spherical solute surface with radius a . The substance reaches the nucleus as it grows, beyond the critical range, by diffusion from the surrounding solution. In a steady state, the spherically symmetric concentration distribution $c(r)$ round a nucleus of radius a is given by the solution of the diffusion equation

$$D \Delta c(r) = D \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r c(r) = \frac{\partial c(r)}{\partial I} \equiv 0$$

with the boundary conditions $c(\infty) = c$ (the given value of the concentration of the super-saturated solution) and $c(a) = c_0$. Hence

$$c(r) = c - (c - c_{0a}) a / r$$

and the diffusional flux towards the nucleus is

$$\begin{aligned} I &= 4\pi r^2 D dc/dr \\ &= 4\pi D a (c - c_a) \\ &= 4\pi D (c - c_a) (a - a_{\text{cr}}) \end{aligned}$$

in the last equation, formula (2) is used.

If the concentration is defined as the number of dissolved molecules per unit volume, then I is the number of molecules deposited on the surface of the nucleus per unit time. We have

$$\begin{aligned} (da/dt)_{\text{macro}} &= I v' / 4\pi a^2 \\ &= (D v' / a^2) (a - a_{\text{ct}}) (c - c_{0x}) \end{aligned}$$

and, from (99.12),

$$\begin{aligned} B(a_{\text{cr}}) &= T D v' (c - c_0) / 8\pi \alpha a_{\text{cr}}^2 \\ &= D v'^2 c_{0x} / 4\pi a_{\text{cr}}^3. \end{aligned}$$

22.4.2 §100. Kinetics of first-order phase transitions. Coalescence

The treatment in §99 of phase-transition kinetics relates only to the initial stage of the transition: the total volume of all nuclei of the new phase has to be so small that their formation and growth have no appreciable effect on the "degree of metastability" of the main phase, and the critical size of the nuclei, determined by the degree of metastability, may be regarded as a constant. In this stage there is a fluctuational formation of nuclei of the new phase, and the growth of each nucleus is independent of the behaviour of the others. We shall refer to the particular case of solute precipitation from a supersaturated solution; the degree of metastability is then the degree of supersaturation of the solution.

In the later stage when the supersaturation of the solution becomes very slight, the nature of the process is quite different. The fluctuational formation of new nuclei has now practically ceased, as the critical size is great. The increase in the critical size accompanying the steady decrease in the degree of supersaturation has the result that the smaller among the grains of the new phase already formed fall below the critical range and redissolve. Thus a decisive role at this stage is played by the "swallowing up" of small grains by large ones, which grow as the result of the dissolution of the small ones (coalescence). This stage will be discussed in the present section. It is assumed that the initial concentration of the solution is so small that the precipitated grains are far apart and their direct "interaction" may be neglected. †

We shall consider a solid solution in which the precipitated grains are at rest and grow only by diffusion from the surrounding solution. In order to illustrate the method and the basic qualitative features of the process, we shall also make a number of other simplifying assumptions, neglecting the elastic stresses round the precipitated grains, and assuming that these are spherical.

The equilibrium concentration of the solution at the surface of a grain with radius a is given by the thermodynamic formula

$$c_{0a} = c_{0\infty} (1 + 2\alpha v' / Ta), \quad (100.1)$$

where $c_{0\infty}$ is the concentration of a saturated solution above a plane surface of the solute, α the surface tension coefficient at the phase interface, v' the molecular volume of the solute; see §99, Problem. The concentration is defined in terms of the volume of the substance dissolved in unit volume of the solution. With this definition, the diffusive flux $i = D\partial c/\partial r$ at a grain surface is equal to the rate of

change of the grain radius:

$$da/dt = D[\partial c/\partial r]_{r=a}$$

where D is the solute diffusion coefficient. Because the concentration is assumed small, this rate is so small that the concentration distribution round the grain can be regarded as equal, at each instant, to the steady distribution $c(r)$ corresponding to the relevant value of a :

$$c(r) = c - (c - c_{0a}) a/r$$

where c is the mean concentration of the solution. Hence the diffusive flux $i(r) = Da(c - c_{0a})/r^2$ and, with (100.1).

$$\begin{aligned} i(a) &= da/dt \\ &= D(c - c_{0a})/a \\ &= \frac{D}{a} \left(\Delta - \frac{\sigma}{a} \right) \end{aligned}$$

¹† The theory given here is due to I. M. Lifshitz and V. V. Slezov (1958).

where the parameter $\sigma = 2\alpha v' c_{0x}/T$ and the quantity $\Delta = c - c_{0x}$ is the supersaturation of the solution. The quantity

$$a_{\text{cr}}(t) = \sigma/\Delta(t) \quad (100.2)$$

is the critical radius: when $a > a_{\text{cr}}$, the grain becomes larger ($da/dt > 0$), and when $a < a_{\text{cr}}$ it dissolves ($da/dt < 0$). In the following analysis, up to the final result, we shall measure time in units of $a_{\text{cr}}^3(0)/D\sigma$, where $a_{\text{cr}}(0)$ is the critical radius at the point where coalescence begins. Thus we have the equation

$$\frac{da}{dt} = \frac{a_{\text{cr}}^3(0)}{a} \left(\frac{1}{a_{\text{cr}}} - \frac{1}{a} \right) \quad (100.3)$$

Next, let $f(t, a)$ be the grain size distribution function normalized so that the integral

$$N(t) = \int_0^x f(t, a) da$$

is the number of grains per unit volume. Regarding $v_a = da/dt$ as the rate of movement of the grain in size space, we can write the continuity equation in that space as

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial a} (f v_a) = 0 \quad (100.4)$$

Lastly, the conservation of the total quantity of solute is expressed by

$$\Delta + q = \text{constant} \equiv Q, \quad q(t) = \frac{4}{3}\pi \int a^3 f(t, a) da \quad (100.5)$$

where Q is the total initial concentration and q the volume of precipitated grains per unit volume of the solution.

Equations (100.3)-(100.5) form a complete set of equations for the problem concerned. They can be transformed so as to involve variables that are more convenient for the analysis.

We use the dimensionless quantity

$$x(t) = a_{\text{cr}}(t)/a_{\text{cr}}(0) \quad (100.6)$$

As $t \rightarrow \infty$, the supersaturation $\Delta(t)$ tends to zero, and the critical radius correspondingly tends to infinity. Hence, as t varies from 0 to ∞ , the quantity

$$\tau = 3 \log x(t) \quad (100.7)$$

also varies monotonically from 0 to ∞ , and we shall take this as a new time variable. As the unknown function in (100.3) we take the ratio

$$u = a/a_{\text{cr}}(t) \quad (100.8)$$

The equation then becomes

$$du^3/d\tau = \gamma(u - 1) - u^3 \quad (100.9)$$

where

$$\gamma = \gamma(\tau) = dt/x^2 dx > 0 \quad (100.10)$$

Going on now to analyse the equations, we shall first show that as $\tau \rightarrow \infty$ the function $\gamma(\tau)$ must tend to a particular finite limit.

The right-hand side of (100.9) has a maximum at $u^2 = \frac{1}{3}\gamma$, where its value is $\gamma \left[\frac{2}{3}(3\gamma)^{1/2} - 1 \right]$. Thus, depending on the value of γ , the rate $du^3/d\tau$ as a function of u may have any of the three forms shown in Fig. 34. When $\gamma = \gamma_0 = 27/4$, the curve touches the abscissa axis at $u = u_0 = 3/2$.

Each point on the abscissa axis representing the state of a grain moves to the right or to the left, according to the sign of the derivative $du^3/d\tau$. When $\gamma > \gamma_0$, all points to the left of u_1 move to the left and disappear on reaching the origin. The points with $u > u_1$ move to the point u_2 , approaching it asymptotically from the right or from the left. This means that all grains with $u > u_1$, i.e. with radius $a > u_1 a_{cr}$, would reach asymptotically the size $a = a_{cr} u_2$, which tends to infinity with a_{cr} ; the total volume q of precipitated grains would thus also tend to infinity, so that the equation of conservation of matter (100.5) could not be satisfied. When $\gamma < \gamma_0$, all points move to the left and disappear on reaching the origin after a finite time; in this case, $q(T) \rightarrow 0$, and equation (100.5) again cannot be satisfied.

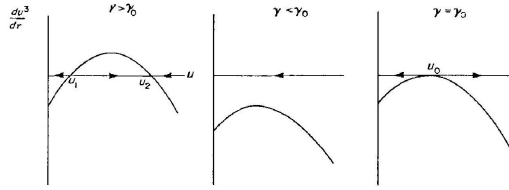


FIG. 34.

Thus the function $\gamma(t)$ must tend to the limit γ_0 and must do so from below: if it did so from above, or if $\gamma = \gamma_0$ exactly, all points with $u > u_0$, moving to the left, would still become "stuck" at $u = u_0$ (where $du^3/d\tau = 0$), and equation (100.5) could not be satisfied, as in the case $\gamma(\infty) > \gamma_0$. We must therefore have

$$\gamma(\tau) = \frac{27}{4} [1 - \epsilon^2(\tau)], \quad (100.11)$$

with $\epsilon \rightarrow 0$ as $\tau \rightarrow \infty$. The points approaching from the right pass more and more slowly through the "hold-up" point $u = u_0$. Their rate of passage is governed by the function $\epsilon(\tau)$, which must again be determined from the equation of motion (100.9) and the equation of conservation of matter (100.5).

Near the point $u = u_0$, equation (100.9), with γ from (100.11), is

$$\frac{du}{d\tau} = -\frac{2}{3} \left(u - \frac{3}{2} \right)^2 - \frac{1}{2} \epsilon^2.$$

With a new unknown function, the ratio $z = (u - \frac{3}{2})/\epsilon$ of two small quantities, we can write this equation as

$$\frac{3}{2\epsilon} \frac{dz}{d\tau} = -z^2 - \frac{3}{4} + \frac{3}{2} z \eta \quad \left(\eta = \frac{d(1/\epsilon)}{d\tau} \right). \quad (100.12)$$

Analysis of this, similar to that of (100.9), leads to the conclusion that as $\tau \rightarrow \infty$ the function $\eta(\tau)$ must tend asymptotically to a finite limit $\eta_0 = 2/\sqrt{3}$, the value for which the right-hand side of (100.12) as a function of z touches the abscissa axis at the hold-up point $z_0 = \sqrt{3}/2$. The asymptotic equation $\eta = \eta_0$ gives the limiting form

$$\epsilon(\tau) = \sqrt{3}/2\tau. \quad (100.13)$$

When $\tau^2 \gg 1$, the correlation term in (100.11) may be neglected. The equation $1/\gamma = x^2 dx/dt = 4/27$ then gives the limiting form of the time dependence of the critical radius:

$$x(t) = a_{\text{cr}}(t)/a_{\text{cr}}(0) = (4t/9)^{1/3}. \quad (100.14)$$

Since $\tau = \log x^3$, the condition for (100.14) to be applicable, expressed in terms of the actual time t , is $\log^2 t \gg 1$. It is noteworthy that, although the relative magnitude of the corrections to γ_0 decreases rapidly with increasing τ and the first approximation (100.14) becomes more and more nearly exact, the behaviour of the solution near the hold-up point is governed by just these corrections.

Let us now calculate the grain size distribution function. The distribution function in the variables u and τ is related to that in t and a by

$$\varphi(\tau, u)du = f(t, a)da, \quad f = \varphi/a_{\text{cr}} \quad (100.15)$$

The continuity equation for this function is

$$\frac{\partial \varphi}{\partial \tau} + \frac{\partial}{\partial u} (v_u \varphi) = 0, \quad v_u = du/d\tau. \quad (100.16)$$

The rate v_u is given by (100.9), with $\gamma = 27/4$, everywhere except in a neighbourhood ($\sim \epsilon$) of u_0 :

$$v_u = \frac{du}{d\tau} = -\frac{1}{3u^2} \left(u - \frac{3}{2}\right)^2 (u + 3) \quad (100.17)$$

The solution of equation (100.16) has the form

$$\varphi(\tau, u) = \chi[\tau - \tau(u)] / -v_u, \quad \tau(u) = \int_0^u du/v_u \quad (100.18)$$

where χ is a function to be determined.

We have seen that all points representing grains move from right to left on the u -axis, pass through the neighbourhood of the hold-up point, and spend a longer time there if they arrive later. This neighbourhood thus acts as a sink for points with $u > u_0$ and as a source for the range $u < u_0$.

The distribution function to the right of u_0 , as $\tau \rightarrow \infty$, is determined by the points arriving from infinity, which correspond to grains in the "tail" of their initial ($\tau = 0$) distribution. Since the number of grains in that distribution of course decreases rapidly (in practice exponentially) with increasing size, the distribution function in the range $u > u_0$ (outside the immediate neighbourhood of u_0) tends to zero as $\tau \rightarrow \infty$.

In the equation of conservation of matter (100.5), the term $\Delta(\tau) \rightarrow 0$ as $\tau \rightarrow \infty$. Expressing the integral q in terms of the variables τ and u , with $a^3 = u^3 x^3 a_{\text{cr}}^3(0) = u^3 e^\tau a_{\text{cr}}^3(0)$, we find

$$\kappa e^\tau \int_0^u u^3 \varphi(\tau, u) du = 1, \quad \kappa = 4\pi a_{\text{cr}}^3(0)/3Q \quad (100.19)$$

here φ is to be substituted from (100.18), with v_u , from (100.17). [†] It is immediately evident that the expression on the left of (100.19) can be independent of τ only if χ has the form

$$\chi[\tau - \tau(u)] = A e^{-\tau + \tau(u)}.$$

The function $\tau(u)$ is calculated by elementary integration, and the result is

$$\varphi(\tau, u) = A e^{-\tau} P(u), \quad (100.20)$$

^{1†} We shall not pause to prove that the relative contribution to the integral from the neighbourhood of u_0 , where (100.17) is not valid, tends to zero as $\tau \rightarrow \infty$.

where

$$\begin{aligned} P(u) &= \frac{3^4 e}{2^{5/3}} \frac{u^2 \exp[-1/(1-\frac{2}{3}u)]}{(u+3)^{7/3} (\frac{3}{2}-u)^{1/3}}, & u < \frac{3}{2}, \\ P(u) &= 0, & u > \frac{3}{2}. \end{aligned} \quad (100.21)$$

The constant A is determined by substituting (100.20) back into (100.19); numerical evaluation of the resulting integral gives $\hat{A} = 0.9/\kappa$. The function $P(u)$ is necessarily normalized to unity:

$$\int_0^{u_0} P(u) du = \int_0^{32} \frac{e^{\tau(u)}}{-v_u} du = - \int_0^{-\infty} e^{\tau} d\tau = 1$$

The number of grains per unit volume is therefore

$$N = \int_0^{u_0} \varphi(\tau, u) du = A e^{-\tau} = 9A/4t \quad (100.22)$$

It is easy to find also the value $\bar{u}$ averaged over the distribution (100.21). To do so, we consider the integral

$$\int_0^{u_0} P(u)(u-1) du = \int_0^{u_0} e^{\tau(u)}(u-1) \frac{du}{-v_u} = \int_{-\infty}^0 e^{\tau} [u(\tau) - 1] d\tau$$

Substitution of $u(\tau) - 1$ from (100.9) gives

$$\frac{4}{27} \int_{-\infty}^0 e^{\tau} \left[u^3(\tau) + \frac{du^3(\tau)}{d\tau} \right] d\tau = \frac{4}{27} [u^3(\tau) e^{\tau}]_{-\infty}^0 = 0$$

Thus

$$\bar{u} = \int_0^{u_0} P(u) u du = \int_0^{u_0} P(u) du = 1$$

i.e. $\bar{a} = a_{\text{cr}}(t)$, the mean size being equal to the critical size.

We can assemble the above formulae and rewrite the results in terms of the original variables—the grain radius a and the dimensional time t . The mean grain radius increases asymptotically with time according to

$$\bar{a} = (4\sigma Dt/9)^{1/3}. \quad (100.23)$$

The grain size distribution is given at any time by (100.21): the number of grains whose radius is in the range da is $P(a/\bar{a})da/\bar{a}$. The function $P(u)$ is non-zero only when $u < \frac{3}{2}$, and is shown graphically in Fig. 35. The asymptotic distribution is independent of the initial distribution at the start of coalescence. The total number of grains per unit volume decreases with time according to

$$N(t) = 0.5Q/D\sigma t. \quad (100.24)$$

The supersaturation of the solution tends to zero:

$$\Delta(t) = (9\sigma^2/Dt)^{1/3}. \quad (100.25)$$

To see the significance of these relations, note that in the above treatment the total volume of the solution is regarded as infinite, and the total amount of solute is therefore infinite also. In a finite volume the process is of course complete after a finite time, when the whole of the solute has been precipitated into one mass.

22.4.3 §101. Relaxation of the order parameter near a second-order phase transition

It is well known that the change in state of a body in a second-order phase transition (phase transition of the second kind) is described by the order parameter η , which is non-zero on one side of the transition point (in the "unsymmetrical" phase) and zero on the other side (in the "symmetrical" phase). The discussion in SP 1, Chapter XIV, related to the properties of bodies in thermodynamic equili-

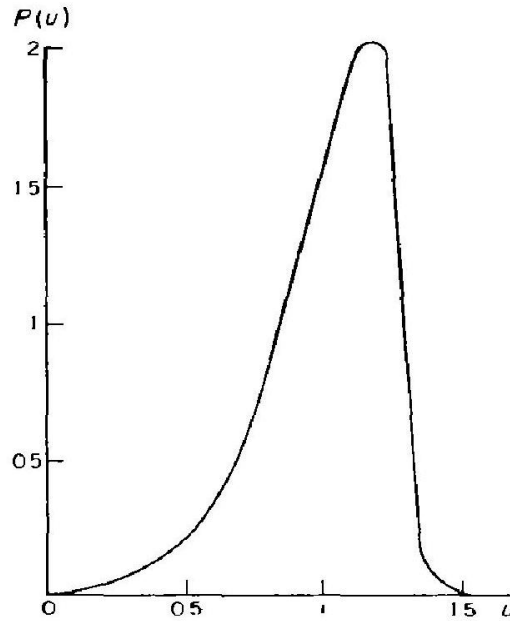


FIG. 35.

rium near transition points. Let us consider the relaxation of the order parameter in a system not in equilibrium.

The equilibrium value of the order parameter, denoted here by $\bar{\eta}$, is determined by minimizing the corresponding thermodynamic potential. In order to deal with cases of spatial homogeneity and inhomogeneity, we shall use the potential Ω , a function of the temperature T and the chemical potential μ (for a given total volume of the body); cf. SP 1, § 146.

In a spatially homogeneous body, the value of η is determined by the minimum of $\Omega(T, \mu, \eta)$ (the thermodynamic potential per unit volume) as a function of η with given T and μ :

$$\partial\Omega/\partial\eta = 0. \quad (101.1)$$

If this condition is not satisfied, a relaxation process occurs, in which η varies with time and tends to $\bar{\eta}$. In a state not far from equilibrium, i.e. when $\partial\Omega/\partial\eta$ is small but not zero, the relaxation rate (the derivative $d\eta/dt$) is also small. In the Landau theory, where fluctuations of the order parameter are neglected, we must suppose that the relation between these two derivatives amounts to a simple proportionality:

$$d\eta/dt = -\gamma\partial\Omega/\partial\eta, \quad (101.2)$$

with a constant coefficient γ (L. D. Landau and I. M. Khalatnikov, 1954).

In the Landau theory, the thermodynamic potential near the transition point has the form

$$\Omega = \Omega_0(T, \mu) + (T - T_1)\alpha\eta^2 + b\eta^4, \quad (101.3)$$

with a positive coefficient b . If the unsymmetrical phase corresponds to $T < T_c$, then $\alpha > 0$ also; see SP 1 (146.3). The equilibrium value of the order parameter in the unsymmetrical phase, i.e. the solution of equation (101.1), is

$$\bar{\eta} = [\alpha (T_c - T) / 2b]^{1/2}. \quad (101.4)$$

The relaxation equation (101.2) becomes

$$d\eta/dt = -2\gamma [(T - T_c) \alpha \eta + 2b\eta^3]$$

or linearizing with respect to the small difference $\delta\eta = \eta - \bar{\eta}$,

$$d\delta\eta/dt = -\delta\eta/\tau_0 \quad (101.5)$$

where

$$\tau_0 = 1/4\gamma\alpha (T_c - T), \quad T < T_c. \quad (101.6)$$

As $t \rightarrow \infty$, the difference $\delta\eta$ must tend to zero; hence we must have $\tau_0 > 0$, and therefore $\gamma > 0$.

The relaxation in the range $T > T_1$ is treated similarly. Here $\bar{\eta} = 0$, and the linearized expression for the derivative is

$$\partial\Omega/\partial\eta = -2\alpha (T - T_c) \delta\eta$$

Accordingly, (101.6) is replaced by

$$\tau_0 = 1/2\gamma\alpha (T - T_c), \quad T > T_c. \quad (101.7)$$

The quantity τ_0 is the relaxation time for the order parameter. We see that it tends to infinity as $T \rightarrow T_c$. This is of fundamental importance for the whole theory of phase transitions. As already noted in SP 1, § 143, it ensures the existence of macroscopic states corresponding to incomplete equilibrium for given non-equilibrium values of η . The theory given in §§ 101 and 102, which treats the relaxation of the order parameter independently of that of other macroscopic characteristics of the body, depends on this property for its significance.

In a spatially inhomogeneous system, we have to consider the total thermodynamic potential, given by the integral

$$\Omega_1 = \int \{ \Omega_0 + \alpha (T - T_c) \eta^2 + b\eta^4 + g(\nabla\eta)^2 \} dV \quad (101.8)$$

see SP1 (146.5). The corresponding equilibrium condition is found by varying the integral with respect to η and equating the variation to zero. Integrating by parts in the gradient term, we get as the condition of equilibrium

$$2\alpha (T - T_c) \eta + 4b\eta^3 - 2g\Delta\eta \approx \delta\eta/\gamma\tau_0 - 2g\Delta\delta\eta = 0$$

we have taken the particular case of the unsymmetrical phase with $T < T_c$. Correspondingly, there is an additional term in the relaxation equation:

$$\frac{\partial\delta\eta}{\partial t} = - \left\{ \frac{\delta\eta}{\tau_0} - 2\gamma g\Delta\delta\eta \right\}. \quad (101.9)$$

For each of the spatial Fourier components of the function $\delta\eta(t, r)$, this gives

$$\frac{d\delta\eta_k}{dt} = -\frac{\delta\eta_k}{\tau_k}, \quad \frac{1}{\tau_k} = \frac{1}{\tau_0} + 2\gamma gk^2 \quad (101.10)$$

We see that the relaxation time for components with $\mathbf{k} \neq 0$ remains finite as $T \mapsto T_c$, but increases with decreasing k .

Lastly, if we include in Ω the term $-\eta h$ which describes the effect of an external field on the transition (see SP 1 (146.5)), the relaxation equation becomes

$$\frac{\partial \delta \eta}{\partial t} = -\frac{\delta \eta}{\tau_0} + 2\gamma g \Delta \delta \eta + \gamma h. \quad (101.11)$$

If the field is assumed periodic,

$$h \propto e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)},$$

we then obtain

$$\delta \eta_{\mathbf{k}} = \chi(\omega, \mathbf{k})/h.$$

with the generalized susceptibility

$$\chi(\omega, \mathbf{k}) = \gamma / (\tau_k^{-1} - i\omega). \quad (101.12)$$

This expression has a pole at $\omega = -i\tau_k^{-1}$, in accordance with the general statement made at the end of §91. When $\omega = 0$ and $\mathbf{k} = 0$, it reduces to $\chi(0, 0) = 1/4\alpha (T_c - T)$, in agreement with SP 1 (144.8).

According to the fluctuation-dissipation theorem, the generalized susceptibility (101.12) determines the spectral correlation function of the fluctuations of the order parameter by the formula (in the classical limit $\hbar\omega \ll T$)

$$(\delta \eta^2)_{\omega k} = (2T/\omega) \operatorname{Im} \chi(\omega, k) = 2\gamma T / (\omega^2 + \tau_k^{-2}). \quad (101.13)$$

This is the space-time Fourier component of the correlation function $\langle \delta \eta(0, 0) \delta \eta(t, \mathbf{r}) \rangle$; the mean values of the products of Fourier components of the fluctuations are related to $(\delta \eta^2)_{\omega k}$ by

$$\langle \delta \eta_{\omega k} \delta \eta_{\omega' k'} \rangle = (2\pi)^4 \delta(\omega + \omega') \delta(\mathbf{k} + \mathbf{k}') (\delta \eta^2)_{\omega k}$$

Integration of (101.13) over $d\omega/2\pi$ gives the spatial Fourier component of the single-time correlation function $\langle \delta \eta(0, 0) \delta \eta(0, \mathbf{r}) \rangle$:[†]

$$\begin{aligned} (\delta \eta^2)_k &= \int (\delta \eta^2)_{\omega k} d\omega/2\pi \\ &= T / [2gk^2 + 4\alpha (T_c - T)]. \end{aligned} \quad (101.14)$$

22.4.4 §102. Dynamical scale invariance

The theory in § 101 does not take account of fluctuations of the order parameter. Its applicability is therefore restricted by the same conditions as for the Landau thermodynamic theory of phase transitions. These conditions are not satisfied in a neighbourhood of the transition point, the "fluctuation" region.

In this region, the kinetic properties of the body, like the purely thermodynamic properties (see SP 1, § 148), can be described by a set of critical indices (or critical

exponents) which specify the manner of variation of quantities as the transition point is approached. It proves possible to derive certain relations between these indices by extending

[†] In comparing (101.14) with SP 1 (146.8), it must be remembered that the latter formula relates to components in the expansion as a Fourier series in a finite volume V , not as a Fourier integral.

to include kinetic effects the hypothesis of scale invariance formulated for the thermodynamic properties in SP 1, § 149; this generalization is termed dynamical scale invariance.

The nature of the singularity of the thermodynamic quantities at the transition point depends on the number of components of the order parameter describing the transition, and on the structure of the effective Hamiltonian formed from them (see SP 1, § 147). For the kinetic quantities, the range of possible cases become more various because of the different possible forms of the "equations of motion" describing the relaxation. Let us first consider the simplest case, that of an order parameter having only one component (B. I. Halperin and P. C. Hohenberg 1969). †

A way to determine the relaxation behaviour that is possible in principle, but not in practice, is to calculate the exact (including fluctuations) generalized susceptibility $\chi(\omega, k; T)$ for the order parameter η under the action of the external field. The time variation of η during the relaxation is governed (as was explained in §91) by the singularities of χ as a function of the complex variable ω . If the singularity nearest the real axis is the simple pole at $\omega = -i\tau^{-1}(k; T)$ on the imaginary axis, each Fourier component of the order parameter decays exponentially, with relaxation time $\tau(k; T)$. As well as the critical indices which determine the behaviour of the thermodynamic quantities, we use two indices y and z which describe the function $\chi(\omega, k; T)$:

$$\begin{aligned} \tau &\propto |T - T_c|^{-y} & \text{when } k = 0, \\ \tau &\propto k^{-z} & \text{when } T = T_c, \end{aligned} \quad (102.2)$$

with $y > 0, z > 0$, since the relaxation time becomes infinite for $k = 0, T = T_c$.

It is plausible to assume that, near a second-order phase transition (in the fluctuation range), the relaxation time is independent of the temperature if it is measured in units of $\tau_0 \equiv \tau(0; T)$ and the lengths $1/k$ are measured in units of $r_c(T)$, the correlation radius for fluctuations of the order parameter. Thus $\tau(k; T)$ must take the form

$$\tau(k; T) = |T - T_c|^{-y} f(kr_c), \quad (102.3)$$

where f depends on the temperature only through $r_c(T)$ in the product kr_c , and $f(0) = \text{constant}$.

Since $r_c \rightarrow \infty$ when $T \rightarrow T_c$, in accordance with the definition of the critical index z we must have $f(\xi) \propto \xi^{-z}$ as $\xi \rightarrow \infty$. The temperature dependence of τ can then be separated as the product

$$|T - T_c|^{-\nu} |T - T_c|^{z\nu}$$

where ν is the critical index for the correlation radius: †

$$r_c \propto |T - T_c|^{-\nu}. \quad (102.4)$$

But τ must remain finite as $T \rightarrow T_c$ (with $k \neq 0$). Hence it follows that we must have

$$y = z\nu. \quad (102.5)$$

Thus the assumption of scale invariance enables us to relate the two indices in (102.1) and (102.2).

As in the static case, there is good reason to suppose that the critical indices are the same on both sides of the transition point. This is because the spatial inhomogeneity ($k \neq 0$)

¹† This is the case, for instance, in the relaxation of the magnitude of the magnetization vector in a ferromagnet near its Curie point, where strong relativistic interactions fix the crystallographic direction of the vector.

blurs the phase transition, in the sense that it eliminates the singularities of all quantities at $T = T_c$, in this respect, the inhomogeneity influences the phase transition in the same way as an external field. In other words, the point $T = T_c$ is no longer distinctive, so that there is no reason to expect a difference between the values of z as T tends to T_c from above and from below. By virtue of the relation (102.5), the same is then true of the index y .

We can similarly relate z to the other critical indices. Let us consider, for instance, the dependence of the susceptibility χ on ω when $k = 0$, at the point $T = T_c$. According to scale invariance, the function $\chi(\omega, k; T_c)$ may be put in the form

$$\chi = |T - T_c|^{-\gamma} f(\omega\tau_0, kr_c), \quad f(0, 0) = \text{constant},$$

where γ is the critical index for the susceptibility when $k = 0$ and $\omega = 0$. For $k = 0$ and $T \rightarrow T_c$, the susceptibility must tend to a finite limit (if $\omega \neq 0$). Since $\tau_0 \propto |T - T_c|^{-zv}$, we find that this implies

$$f(\xi, 0) \propto \xi^{-\gamma/vz} \quad \text{as} \quad \xi \rightarrow \infty$$

The required dependence of χ on ω is therefore

$$\chi \propto \omega^{-\gamma/kz} \quad \text{for } k = 0, T = T_c. \quad (102.6)$$

In the case considered, then, the demands of scale invariance enable us to establish a relation between the kinetic and thermodynamic critical indices, but not to determine the former entirely from the latter.

22.4.5 §103. Relaxation in liquid helium near the λ -point

Let us now consider "degenerate" systems in which the order parameter has n components η_i but the effective Hamiltonian depends (in a homogeneous system)

only on the sum of the squares of these components. That is, if the set of the η_i is regarded as an n -dimensional vector, the effective Hamiltonian is independent of the direction of the vector.

A typical example is a purely exchange ferromagnet, whose energy is independent of the direction of the magnetization vector. Another example is a superfluid (liquid helium), in which the order parameter is represented by the condensate wave function

$$\Xi = \sqrt{n_0} e^{r\Phi} : \quad (103.1)$$

see SP 2, §§26 and 27. This complex quantity is a set of two independent quantities, but the energy of a homogeneous liquid depends only on the squared modulus $|\Xi|^2 = n_0$, the density of the condensate.

The specific properties of degenerate systems are due to the presence in their vibrational spectra of a soft mode, a branch which results from variations in the direction of the "order parameter vector"; the frequency of these is zero at the phase transition point. Their dispersion relation can be found from the macroscopic equations of motion, and must satisfy the requirements of scale invariance. As we shall see, this allows the kinetic critical indices to be expressed entirely in terms of the thermodynamic ones. We shall do this for the case of liquid helium (R. A. Ferrell, N. Menyhárd, H. Schmidt, F. Schwabl and P. Szépfalusy 1967).

In this case, the soft mode is second sound. Near the transition point, it consists of combined oscillations of the superfluid velocity v_s and the entropy; the normal velocity oscillation

¹† The notation for the critical indices of the thermodynamic quantities here and below is the same as in SP 1, § 148.

amplitude in second sound is $v_n \sim v_s \rho_s / \rho_n$, and near the phase transition point (the λ -point) it is small, like ρ_s . The superfluid velocity is related to the phase of the condensate wave function, $v_s = \hbar \nabla \Phi / m$, so that oscillations of v_s imply oscillations of the phase, i.e. of the direction of the order parameter vector. The dispersion relation for these oscillations is

$$\omega = u_2 k \quad (103.2)$$

where

$$u_2 = \sqrt{(TS^2 \rho_s / C_p \rho_n)} \approx \sqrt{(T_\lambda S_\lambda^2 \rho_s / C_p \rho)} \quad (103.3)$$

is the speed of second sound (S being the entropy and C_p the specific heat per unit mass of the liquid): near the λ -point, T and S may be replaced by their values T_λ and S_λ at that point, and ρ_n (the density of the normal component of the liquid) by the total density ρ .^{*}

† The speeds of first and second sound in liquid helium are calculated (see *FM*, 8130) as the roots of the dispersion relation

$$u^4 - u^2 \left[\left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_S + \frac{\rho_s T S^2}{\rho_n C_v} \right] + \frac{\rho_s T S^2}{\rho_n C_p} \left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_S = 0$$

Outside the immediate neighbourhood of the λ -point, the thermal expansion coefficient is small, and therefore so is the difference $C_p - C_v$, so that we can put $C_p \approx C_v$. As $T \rightarrow T_\lambda$, C_p becomes noticeably different from C_v , but $\rho_s \rightarrow 0$, and we then arrive at (103.3).

As $T \rightarrow T_\lambda$, the density ρ_s tends to zero according to

$$\rho_s \propto (T_\lambda - T)^{(2-\alpha)/3} \quad (103.4)$$

where α is the critical index for the specific heat:

$$C_p \propto |T_\lambda - T|^{-\alpha} : \quad (103.5)$$

see SP 2 (28.4). The way in which u_2 tends to zero depends on the sign of α . If $\alpha > 0$, so that $C_p \rightarrow \infty$, we have

$$u_2 \propto (T_\lambda - T)^{(1+\alpha)/3}, \quad \alpha > 0.$$

If $\alpha < 0$, C_p tends to a finite limit (the critical index defines the behaviour of only the singular part of the specific heat near the transition point); then

$$u_2 \propto (T_\lambda - T)^{(2-\alpha)/6}, \quad \alpha < 0. \quad (103.6)$$

We shall suppose here that $\alpha < 0$, as in fact seems to be true for liquid helium ($\alpha \approx -0.02$).

The damping of second sound is governed by the imaginary part of the frequency. Far below the λ -point, this imaginary part is small, but it increases as the λ -point is approached, and in its immediate neighbourhood ($kr_c \sim 1$) becomes of the order of unity ($\text{im } \omega \sim |\omega|$). At a sufficient distance above the λ -point, we have an ordinary damped thermal wave (the solution of the thermal conduction equation), with the dispersion relation

$$\omega = i\kappa k^2 / \rho C_p \quad (103.7)$$

where κ is the thermal conductivity.

We now apply the hypothesis of scale invariance, according to which the dispersion relation near the λ -point must have the form

$$\omega = k^z f(kr_c)$$

This may also be written as [†]

$$\omega = k^z f\left(\frac{T - T_\lambda}{k^{1/\nu}}\right), \quad (103.8)$$

with a different function f , ν being the critical index for the correlation radius.

The validity of the dispersion relations (103.2) and (103.7) is not restricted by any condition of distance from the λ -point, but at a given temperature it is limited by

the condition $kr_c \ll 1$: the wavelength must be much greater than the correlation radius, since otherwise the macroscopic equations on which these relations are based cease to be valid.

Let us first consider temperatures below the transition point. The requirement that for $kr_c \ll 1$ the dispersion relation be linear in k determines the limiting form of $f(\xi)$ in (103.8):

$$f(\xi) \propto (-\xi)^{v(x-1)} \quad \text{as} \quad \xi \rightarrow -\infty.$$

The temperature dependence of the dispersion relation is found similarly:

$$\omega \propto k (T_\lambda - T)^{\nu(z-1)}. \quad (103.9)$$

Comparison of this with (103.6) gives

$$\nu(z-1) = (2-\alpha)/6$$

The critical indices ν and α are related by $3\nu = 2 - \alpha$ (see SP 1 (149.2)); hence [†]

$$z = 3/2 \quad (103.10)$$

As $T \rightarrow T_\lambda$, the frequency must tend to a finite limit, and therefore $f(0) = \text{constant}$. Thus the dispersion relation for second sound at the λ -point itself is

$$\omega \propto k^z \quad (103.11)$$

The imaginary part of ω is of the same order of magnitude as the real part. When $T \neq T_\lambda$, the dispersion relation (103.11) is valid for short waves such that $kr_c \gg 1$.

Lastly, let us consider the temperature range $T > T_\lambda$. Here, when $kr_c \ll 1$, ω must be a quadratic function of k . This implies that

$$f(\xi) \propto \xi^{v(z-2)} \quad \text{as} \quad \xi \rightarrow +\infty.$$

Then

$$\omega \propto k^2 (T - T_\lambda)^{\nu(z-2)}.$$

Comparison with (103.7), expressing ν in terms of α , gives the temperature dependence of the thermal conductivity:

$$\kappa \propto (T - T_\lambda)^{-(2-\alpha)/6}. \quad (103.12)$$

This tends to infinity as $T \rightarrow T_\lambda$, approximately as $(T - T_\lambda)^{-1/3}$.

Second sound involves oscillations of the phase Φ of the condensate wave function. Hence $1/\text{im}\omega$ also represents a phase relaxation time. When $k \rightarrow 0$ it of

^{††} These relations must be valid in the fluctuation region, which means that the inequality $|T - T_\lambda| < T_\lambda$ must always be satisfied. There is evidence, however, that in liquid helium this inequality must actually be satisfied with plenty to spare, implying that the theory should involve some small numerical parameter.

$$\text{flf } \alpha < 0, z = 3/(2 - \alpha)$$

course tends to infinity: in a homogeneous liquid, the change in phase does not lead to a change in energy, and phase relaxation is therefore not possible.

The relaxation time for $|\Xi| = \sqrt{n_0}$, the condensate density, is not in general the same as the phase relaxation time. However, from the sense of scale invariance we can say that the two times agree in order of magnitude when $kr_c \sim 1$. According to (103.9), this time is

$$\tau \sim \frac{1}{\omega(1/r_c)} \propto r_c (T_\lambda - T)^{-\nu(x-1)} \propto (T_\lambda - T)^{-\nu z}$$

With z from (103.10),

$$\tau \propto (T_\lambda - T)^{-1+\alpha/2}. \quad (103.13)$$

The relaxation time for the condensate density remains finite as $k \rightarrow 0$, and does not tend to infinity like the phase relaxation time. The temperature dependence (103.13) of the condensate density relaxation therefore remains valid when $k = 0$ (V. L. Pokrovskiĭ and I. M. Khalatnikov 1969). †

22.5 Other Kinetics of Phase Transitions

(specific models are here)

22.5.1 Theory of Boiling Water in a Cattle (???)

(??? I'll understand it some day)

23 Kinetics of Biological and Living Systems

(I'll study it later, a very special topic)

24 Exact solutions for the statistics of extrema of some random 1D landscapes, Application to the equilibrium and the dynamics of the toy model by Doussal, Monthus

Abstract

The real-space renormalization group (RSRG) method introduced previously for the Brownian landscape is generalized to obtain the joint probability distribution of the subset of the important extrema at large scales of other one-dimensional landscapes. For a large class of models we give exact solutions obtained either by the use of constrained path-integrals in the continuum limit, or by solving the RSRG equations via an Ansatz which leads to the Liouville equation. We apply in particular our results to the toy model energy landscape, which consists in a quadratic potential plus a Brownian potential, which describes, among others, the energy of a single domain wall in a 1D random field Ising model

[†]If $\alpha > 0$, we should obtain $\pi \propto (T_A - T)^{-1}$, in exact agreement with the result (101.6) of the Landau theory. This agreement, however, is to some extent accidental.

(RFIM) in the presence of a field gradient. The measure of the renormalized landscape is obtained explicitly in terms of Airy functions, and allows to study in details the Boltzmann equilibrium of a particle at low temperature as well as its non-equilibrium dynamics. For the equilibrium, we give results for the statistics of the absolute minimum which dominates at zero temperature, and for the configurations with nearly degenerate minima which govern the thermal fluctuations at very low-temperature. For the dynamics, we compute the distribution over samples of the equilibration time, or equivalently the distribution of the largest barrier in the system. We also study the properties of the rare configurations presenting an anomalously large equilibration time which govern the long-time dynamics. We compute the disorder averaged diffusion front, which interpolates between the Kesten distribution of the Sinai model at short rescaled time and the reaching of equilibrium at long rescaled time. Finally, the method allows to describe the full coarsening (i.e. many domain walls) of the 1D RFIM in a field gradient as well as its equilibrium.

24.1 Introduction

24.1.1 Overview

Disordered systems [1, 2] are usually characterized by a complicated energy (or free energy) landscape, with many local minima representing metastable states, separated by saddles and barriers which govern the dynamics. In general, obtaining analytical information on the statistics of large scale extrema and saddles of a random energy landscape $U(x)$ is an extremely hard task. In one dimension however, the situation is simpler since one has to deal with an alternating sequence of minima and maxima, and there is hope for analytical progress. Recently, the large scale extrema of the pure Brownian landscape and of the biased Brownian landscape have been studied with a powerful real space renormalization technique [3, 4]. There the interest was in the non-equilibrium Arrhenius dynamics of a particle in such a landscape, the so-called Sinai model [5, 6, 7, 8]. At large time this dynamics is dominated by jumps between deep minima. The renormalization procedure thus consists in erasing iteratively the small barriers in the landscape, and retaining only the large scale, large energy features which control the large time dynamics. This procedure yields the asymptotically exact large time dynamics in the case of the Sinai model, and allows to obtain a host of exact results [3, 4]. This real space renormalization technique has also been used in other one dimensional models, such as quantum spin chains [11, 12], reaction diffusion with disorder [10] and the random field Ising model [9], with the same fixed points associated to the pure or to the biased Brownian landscape. For the coarsening of pure 1D Φ^4 model at zero temperature from a random initial condition [13], another fixed point was found which corresponds to the successive elimination of smallest domains, the only variable there being the length. A question is then whether other energy landscapes can be studied using similar techniques.

Where this theory is needed?

(????????? I want to have an explicit answer!!)

24.1.2 Definition and properties of the toy model

A one-dimensional energy landscape of interest is the so-called “toy model” defined by the Hamiltonian

$$U_{\text{toy}}(x) = \frac{\mu}{2}x^2 + V(x) \quad (24.1)$$

where the random potential $V(x)$ is a Brownian motion with correlations

$$\overline{(V(x) - V(y))^2} = 2|x - y| \quad (24.2)$$

Here we have defined the model directly in the continuum limit, but the universality class contains all models with a small scale cutoff and the above behavior (24.2) at large scale. This model has been introduced by Villain *et al.* as a zero-dimensional toy-model for an interface in the random field Ising model [14]. Let us briefly review previous studies of this model and explain some motivations to reexamine this model.

Equilibrium: Imry-Ma argument and ‘statistical tilt symmetry’

For a single particle, the Boltzmann equilibrium problem at temperature T is defined by the partition function $Z = \int dx e^{-U_{\text{toy}}(x)/T}$. Although it seems very simple at first sight, it is an interesting example of disordered system. Because of the quadratic well, the typical position of the particle is finite, but it fluctuates in a non trivial way from sample to sample. An Imry-Ma argument gives the following scaling for the typical scale of the absolute minimum

$$x \sim \left(\overline{\langle x^2 \rangle_{T=0}} \right)^{1/2} = C\mu^{-2/3} \quad (24.3)$$

where we denote by the brackets $\langle . \rangle$ the thermal Boltzmann measure with potential (24.1) and by an overbar the average over the random potential (24.2). The amplitude C will be computed here. Usual methods such as perturbation expansion (even summing all terms) [15] or iteration method [16] completely fail to recover (24.3). A Larkin type perturbation [17] with a small scale cutoff also predicts $x \sim (1/\mu)$ instead of (24.3). Within replica variational *approximations* of the present model (or within the solvable mean field limit of large embedding space dimension $N \rightarrow \infty$, see below) this is cured at the price of spontaneous replica symmetry breaking (RSB) [22, 31]. RSB is of course not expected to occur in the present exact model (24.1 - 24.2) (see Ref. [34] for discussion of the cases where RSB may occur in a one dimensional model).

The toy model also possesses the ‘statistical tilt symmetry’ as other random field models [18] or the directed polymer model [19, 20], which imply exact remarkable identities [18] between the disorder averages of the thermal cumulants of the position at any temperature, as a consequence from the statistical translation invariance of the random potential. These exact identities can be summarized by [18]

$$\overline{\ln \langle e^{-\lambda x} \rangle} = T \frac{\lambda^2}{2\mu} \quad (24.4)$$

which is simply quadratic in λ , so that the second cumulant reads

$$\overline{\langle x^2 \rangle} - \langle x \rangle^2 = \frac{T}{\mu} \quad (24.5)$$

and the disorder-average of all thermal cumulants of order greater than two vanish! As emphasized in [18], in the low temperature regime, the result (24.5) implies that the thermal fluctuations of the toy model are related to the presence of metastable states in rare disordered samples.

Non-equilibrium dynamics: between Sinai and approach of equilibrium

An Arrhenius dynamics can be defined for the toy model, and provided μ is small so that barriers can be large, one can ask about universal long time properties. This was studied for

the special case $\mu = 0$ where one recovers the Sinai model [3, 4]. The dynamics for small but finite μ is interesting for several physical systems of the random field type, and has not been studied up to now, to our knowledge. Physically, one expects the diffusion to interpolate between a Sinai-type diffusion at short rescaled time and the approach of equilibrium at long rescaled time.

24.1.3 Applications of the toy model

Directed polymers in random media

The toy model has also attracted a lot of attention in connection with the problem of D -dimensional manifolds in $(N + D)$ random media, where it plays the role of a prototype model since it represents the simplest case $D = 0$ and $N = 1$ [21, 22]. It has been moreover argued in [23, 24] that the toy model actually describes the statistics of the end-point of a random polymer of length L in $(1 + 1)$ with delta correlated noise in the limit L large with the correspondence $\mu = 1/L$. It was found numerically in [25] that the correlation of the effective random potential for the directed polymer model behaves as (24.2) only at short distances but saturates at large distances. This analysis has been confirmed by a scaling argument in [19] and was finally rigorously proven in [26] where the full statistics of the effective potential was exactly computed to be an “Airy process”, defined there. Thus the approximation of end-point of the directed polymer in $(1 + 1)$ by the toy model is valid only locally.

Burgers turbulence

The toy model is related to the statistical properties of a velocity field $v(x, t)$ evolving according to the Burgers equation [27, 28]

$$\partial_t v(x, t) + v(x, t) \partial_x v(x, t) = \nu \partial_x^2 v(x, t) \quad (24.6)$$

This equation can be solved via the Hopf-Cole transformation as

$$v(x, t) = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} dy \left(\frac{x-y}{t} \right) e^{-\frac{1}{2\nu} \left(\frac{(x-y)^2}{2t} + \phi(y) \right)}}{\int_{-\infty}^{+\infty} dy e^{-\frac{1}{2\nu} \left(\frac{(x-y)^2}{2t} + \phi(y) \right)}} \quad (24.7)$$

where $\phi(y) = \int_0^y dy' v(y', 0)$ is a Brownian motion in the case where the initial velocity field $v(y', t = 0)$ is a white noise process. In the inviscid limit $\nu \rightarrow 0$, the integrals are dominated by the saddle

$$\xi(x, t) = \min_y \left(\frac{(x - y)^2}{2t} + \phi(y) \right) \quad (24.8)$$

which gives

$$v(x, t) = \frac{x - \xi(x, t)}{t} \quad (24.9)$$

The velocity distribution and the statistical properties of shocks (which appear at the points x where there are two degenerate minima in (24.8)) are thus directly related to the properties of minima of the toy model (24.1) with the correspondence $\mu = 1/t$.

Deterministic KPZ equation

The toy model is also related to the relaxation of an interface evolving according to the deterministic KPZ equation [29, 30]

$$\partial_t h(x, t) = \nu \partial_x^2 h + \frac{\lambda}{2} (\partial_x h(x, t))^2 \quad (24.10)$$

from a random initial condition $h(y, t = 0)$ which is a white noise in y . Indeed, the mapping [29, 30]

$$v(x, t) = -\lambda \partial_x h(x, t) \quad (24.11)$$

transforms the deterministic KPZ equation (24.10) into the burgers equation (24.6), leading to

$$h(x, t) = \frac{2\nu}{\lambda} \ln \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dy}{\sqrt{4\pi\nu t}} e^{-\frac{1}{2\nu} \left(\frac{(x-y)^2}{2t} + \lambda h(y, 0) \right)} \quad (24.12)$$

Again in the limit $\nu \rightarrow 0$ where the saddle method yields (24.9), the profile $h(x, t)$ is made of parabolic segments joined together by cusps corresponding to the shocks of the Burgers equation (see for instance Fig.1 in [29]).

Coarsening and equilibrium in some random field Ising model

For definiteness, we will consider in the following an Ising spin chain, but one can study not only spin systems, but also for instance liquid helium meniscus on a rough substrate [33], which does also see random field disorder, and can in principle be probed in confined, quasi one dimensional geometry.

Let us consider as in [9] the 1D random field Ising system of Hamiltonian

$$H = -J \sum_{k=1}^{N-1} S_k S_{k+1} - \sum_{k=1}^N h_k S_k \quad (24.13)$$

with spins $S_k = \pm 1$, and study its equilibrium and its low temperature Glauber dynamics. In the domain wall representation, two types of domains walls A , $(+|-)$, and B , $(-|+)$, in numbers N_A and N_B , alternate at positions a_α , b_α , respectively, and the Hamiltonian can be rewritten as

$$H = H_{ref} + 2J(N_A + N_B) - \sum_{\alpha=1}^{N_A} U(a_\alpha) + \sum_{\alpha=1}^{N_B} U(b_\alpha) \quad (24.14)$$

with $|N_A - N_B| < 1$. The potential felt by domains walls of type B is

$$U(k) = 2 \sum_{j=1}^k h_j \quad (24.15)$$

while domain walls A feel potential $-U(k)$. The dynamics proceeds by diffusion and annihilation of domains of opposite types.

In [9], the zero field $\overline{h_k} = 0$ and the uniform applied field $\overline{h_k} = H$ situations have been studied. The toy model corresponds to the other interesting case

$$\overline{h_k} = kh \quad (24.16)$$

$$\overline{h_k^2} - \overline{h_k}^2 = g \quad (24.17)$$

representing a *field gradient* with zero net applied field (such gradients are easy to produce experimentally). Indeed, it is easy to see that defining the scaled length $x = 2gk$, each domain wall B sees the toy model energy landscape $U(k) = U_{toy}(x)$ with $U_{toy}(x)$ defined in (24.1) in terms of a unit Brownian and

$$\mu = \frac{h}{2g^2} \quad (24.18)$$

For a positive field gradient ($h > 0$), the domain walls of type B ($-|+$) will be attracted towards the minima of $U_{toy}(x)$, and will thus be confined in the neighborhood of the point $x = 0$ where the applied field vanishes, whereas the domain walls of type A ($+|-$) will be attracted by the local maxima of $U_{toy}(x)$ or will be expelled towards the boundaries.

The equilibrium of the toy model considered above and its dynamics involving only one particle corresponds to a *single* domain wall B . If the field gradient is $h > 0$ and if the system is initially prepared with the “natural” boundary conditions, namely spin far on the left are $(-)$, far on the right $(+)$ and with a *single* domain wall of type B in between, it remains such, until equilibration time $T \ln t_{eq0} = 2J$ (or $T \ln t_{eq0} = J$ if domains can be created at boundaries). During that window of time the domain wall diffuses in the toy model landscape and reaches thermal equilibrium at time t_{eq} , a time scale which can be much smaller than t_{eq0} if J is sufficiently large. Another interesting situation corresponds to *unstable* single domain wall dynamics and is obtained if the field gradient is applied against these boundary conditions, e.g. a single A domain initially. The domain is then expelled towards either side after a time t_{exp} which again can be well before t_{eq0} if J is sufficiently large.

Finally, the full, many domain coarsening can be studied and is expected to exhibit a large degree of universality in the small h , large Imry Ma length $4J^2/g$, small temperature $T \ll J$, large time limit as in [9]. It is interesting to study because of the competition between the disorder which tends to slow the coarsening and the field gradient which tend to accelerate the process.

24.1.4 Goal and Results

To summarize, the toy model (24.1) is thus interesting from several points of view. For the statics, it is directly related to more complex problems (directed polymer, burgers turbulence and KPZ equation) in some particular limits, as described above; on the other hand, it represents in itself a ‘toy’ disordered system that presents many properties of more complex models, such as the presence of metastable states and the identities of the statistical tilt symmetry.

Up to now, the landscape $U(x)$ of the toy model has been characterized by two kinds of approach. There has been on one side some studies on the absolute minimum of the toy model, either in probability theory [37] and in the context of the Burgers equation [28], and on the other side a study [32] on the statistics of all extrema of the model (24.1), but that does not distinguish between the important ones (the deep ones) and the large number of unimportant small scale extrema, nor does it yield any information on joint distributions. None of these studies addresses the question of the joint distributions in energy and position of the set of all deep extrema, neither the one relevant for the statics (several minima) and even less the one relevant for the dynamics (maxima, minima and barriers).

The goal of this paper is to show that the renormalization method can be generalized to solve a broader class of one dimensional landscape than the previously solved Brownian landscape [12, 4] and that it is of deeper fundamental interest as an alternative to more conventional probability theory techniques. The class explicitly solved here includes the toy model (24.1) landscape. We formulate the RSRG for a general one-dimensional landscape as an exact method to obtain the joint probability distribution, in total number, position and value of energy on the subset of the

important deep extrema. More precisely, the renormalized landscape at scale Γ is defined by the subset of extrema of the initial landscape which have survived after the erasing of all barriers smaller than Γ . This is equivalent to require that in a segment between a maximum $U(M)$ and the next minimum $U(m)$ of the renormalized landscape, any two points (x, y) with $M < x < y < m$ must satisfy the constraint that the energy difference $U(y) - U(x)$ is smaller than Γ (and the symmetrical condition for a segment between a minimum and the next maximum). The joint probability distribution of this subset of important extrema contains a tremendous amount of information, including in particular the distribution of absolute extrema, of secondary extrema, of largest barriers etc... Of course the general case is intractable analytically, but our aim is to identify solvable models and universality classes, given by some continuum limits.

To be more specific, we will consider the continuum models where the potential $U(x)$ is a stochastic process defined by the Langevin equation

$$\frac{dU(x)}{dx} = F[U(x), x] + \eta(x) \quad (24.19)$$

$\eta(x)$ being a delta correlated white noise. The toy model (24.1) corresponds to the case where the force doesn't depend on $U(x)$ and is linear in x

$$F[U(x), x] = F[x] = \mu x \quad (24.20)$$

Another cases of interest are the stationary landscapes, where the force in the Langevin equation (24.19) is independent of the space x

$$F[U, x] = F[U] = -\frac{dW[U]}{dU} \quad (24.21)$$

The case $F[U] = 0$ is the pure Brownian landscape, and the case $F[U] = F > 0$ is the biased Brownian landscape. These are the only two cases where the RSRG has been applied up to now [12, 4], but we will show here that it generalizes to include any $F[U]$. Note that solving the landscape problem here also amounts to solve the problem of the joint distribution of extremal points in the trajectory of a particle in a one dimensional force field F where x is interpreted as "time" and U as the position of the particle. For all cases (24.19), the Markovian character of the Langevin equation implies that the landscape measure can be written as product of blocks measures which satisfy closed real space renormalization equations. For the specific cases of the toy model (24.20) and of stationary landscapes (24.21), we obtain here explicit expressions for the blocks measures. This is achieved by two complementary methods very different in spirit. On one hand, for the above continuum models we are able to directly compute the blocks using some constrained path integrals. On the other hand, we can also start from the RSRG equations for the blocks and assume some Ansatz which solves these equations and obtain, interestingly via the Liouville equation, analytical forms for the blocks. As is customary in searching for RG fixed points, this can be done without specifying the initial landscape, and as a result the solutions look a priori more general. We show that these do contain the universality classes corresponding to (24.19), with a result which coincide exactly with one obtained by the direct path integral method. Our study thus makes more precise the interesting relations between the powerful RSRG method and more conventional probabilistic approach using stochastic calculus.

For the case of the toy model, the full solution for the joint probability measure of the renormalized landscape is obtained in this way explicitly in terms of Airy functions. We then use this exact measure of the renormalized landscape to study in details the equilibrium and the non-equilibrium dynamics of the toy model (24.1) and give some results for the RFIM in a field gradient.

For the equilibrium, we study the statistical properties of the absolute minimum which dominates at zero temperature. We obtain simple exact expressions for the moments of the

position of a single particle at equilibrium and compare with the results of approximate methods, namely the gaussian variational replica study [22, 31] and of the vector breaking of replica symmetry [38]. We also compute the properties of configurations with nearly degenerate minima which govern the thermal fluctuations at very low-temperature, and we prove that the rare configurations presenting two nearly degenerate minima do not only give a finite contribution to (24.5), but actually are entirely responsible of the full result (24.5).

For the dynamics of a single particle in the toy energy landscape (e.g. a single RFIM domain wall), we compute the distribution over samples of the equilibration time t_{eq} or equivalently the distribution of the largest barrier $\Gamma_{eq} = T \ln t_{eq}$ in the system. Our results are expressed in terms of the dimensionless scaling parameter

$$\gamma_{eq} = \left(\frac{\mu}{2}\right)^{1/3} T \ln t_{eq} \quad (24.22)$$

and we give in particular the two asymptotic behaviors of the distribution for γ_{eq} small and large. We characterize the rare configurations presenting an anomalously large equilibration time which govern the long-time dynamics. We also compute local properties of the renormalized landscape, such as the probability density of a minimum at scale $\Gamma = T \ln t$, and the disorder averaged diffusion front for a single particle, which interpolates between the Kesten distribution of the Sinai model at short rescaled time and the reaching of equilibrium at long rescaled time.

These quantities can be translated into results for observables of the RFIM in a field gradient, assuming convergence to the full state where each maximum of the renormalized landscape contains an A domain and each minimum a B domain. This convergence was proved in [9] and also holds here in range of parameters of interest (small μ , large time t) and with a random initial condition. As time $\Gamma = T \ln t$ increases, decimations occur corresponding to pairs of $A - B$ domains annihilating. Thus initially, many domain coarsening take place. Depending on the scaling parameter:

$$\gamma_{eq0} = 2J \left(\frac{\mu}{2}\right)^{1/3} \quad (24.23)$$

the equilibrium state, reached at time $T \ln t_{eq0} = 2J$ will contain either a single domain wall B (for $\gamma_{eq0} \rightarrow +\infty$) or several additional pairs $A - B$ (infinitely many as $\gamma_{eq0} \rightarrow 0$). The behaviors of the sample to sample probabilities that a single domain wall B remains is obtained. A formal solution for the total magnetization is easily written, and an explicit calculation is performed for large γ_{eq0} where a single domain wall remains. Indeed in that limit the total magnetization is simply $M = 2x_B$ where x_B is the absolute minimum of the toy landscape.

The paper is organized as follows. The Section 24.2 is devoted to the general definitions and properties of the renormalization procedure for an arbitrary one-dimensional landscape. In Section 24.3, we compute the probability measure of the renormalized landscape for a large class of models. We then study in details the toy model: we construct the probability measure for the renormalized landscape in Section 24.4, we study its equilibrium properties in Section 24.5, and the non-equilibrium dynamics in Section 24.6. Some results for the RFIM in a field gradient are also discussed in Section 24.6. The Section 24.8 contains our results for the case of stationary landscapes. Finally, to facilitate reading of the paper, we give the more detailed definitions and derivations in the several appendices.

24.2 Renormalization procedure for an arbitrary 1D landscape

This section contains the precise definitions of the measure for the initial landscape and for the renormalized landscape. The probability measure of the renormalized landscape satisfies by construction a set of RG equations for the joint distribution of extrema.

24.2.1 Initial landscape

The general model studied in this paper is the following. We consider one dimensional random landscapes $U(x)$ which for definiteness in this section are continuous in the energy U , discrete in space x and defined on a finite interval $x = 1, 2, \dots, N$. A realization of the random landscape is thus simply given by a set of random variables U_x , $x = 1, 2, \dots, N$ and the original problem is defined by some probability measure noted

$$\mathcal{P}[U]DU \equiv \mathcal{P}(U_1, \dots, U_N) dU_1 \dots dU_N \quad (24.24)$$

The normalization with the fixed boundary conditions $U(x_1 = x_L) = U_L$ and $U(x_N = x_R) = U_R$ reads

$$Z(U_L, x_L; U_R, x_R) = \int \mathcal{P}(U_L, U_2, \dots, U_{N-1}, U_R) dU_2 \dots dU_{N-1} \quad (24.25)$$

We are interested in the statistics of the extrema of this landscape. For definiteness, we choose here the convention that there are infinite potential outside the interval, i.e. $U(x = 1^-) = U(x = N^+) = +\infty$, and that $N = 2K - 1$ is odd. We then define the probability $N_{\text{init}}^{(2n)}(U_L; u_1, x_1; \dots, u_{2n-1}, x_{2n-1}; U_R, U_R)$ that the initial landscape has n local minima situated at positions $x_1, x_3, \dots, x_{2n-1}$ with the potentials $u_1, \dots, u_{2n-1}$ and $(n-1)$ local maxima situated at positions $x_2, x_4, \dots, x_{2n-2}$ with potentials $u_2, \dots, u_{2n-2}$. They are of course alternated $x_1 < x_2 < x_3 < x_4 < \dots < x_{2n-1}$ and the values $x_1 = x_L$ and $x_{2n-1} = x_R = 2K - 1$ are allowed. An explicit and more precise definition of these objects is given in Appendix 24.9.1, with a derivation of their normalization property

$$\begin{aligned} Z(U_L, x_L; U_R, x_R) = & \sum_{n=1}^K \int du_1 du_2 \dots du_{2n-1} \theta(U_L - u_1) \theta(U_R - u_{2n-1}) \cdot \\ & \cdot \prod_{i=1, n-1} \theta(u_{2i} - u_{2i-1}) \theta(u_{2i} - u_{2i+1}) \\ & \sum_{x_L \leq x_1 < x_2 < x_3 < x_{2n-1} \leq x_R} N_{\text{init}}^{(2n)}(U_L, x_L; u_1, x_1; \dots, u_{2n-1}, x_{2n-1}; U_R, x_R) \end{aligned} \quad (24.26)$$

The objects $N_{\text{init}}^{(2n)}$ are usually extremely complicated and contain a lot of irrelevant information. To single out the important, deep extrema we now define the renormalized landscape where all small barriers have been eliminated.

24.2.2 Construction of the renormalized landscape

The renormalized landscape at scale Γ is defined by the list of positions and energies of a subset S_Γ of extrema of the initial landscape. For $\Gamma = 0$, S_0 is the set of all extrema of the initial landscape. For $\Gamma > 0$ it is the subset of extrema that survive when all barriers smaller than Γ in the system have been erased. This is shown in Fig 1. This subset S_Γ is again made of alternating minima and maxima. It is convenient to call descending bonds the segments between a maximum and the next minimum both in S_Γ (and respectively ascending bonds the segments between a minimum and the next maximum). The constraint obeyed by the subset is that any two points (i, j) on a bond $[x, y]$ with $x < i < j < y$ must satisfy that their energy difference $U_j - U_i$ is smaller than Γ if the bond is descending, and symmetrically, the energy difference $U_i - U_j$ must be smaller than Γ if the bond is ascending.

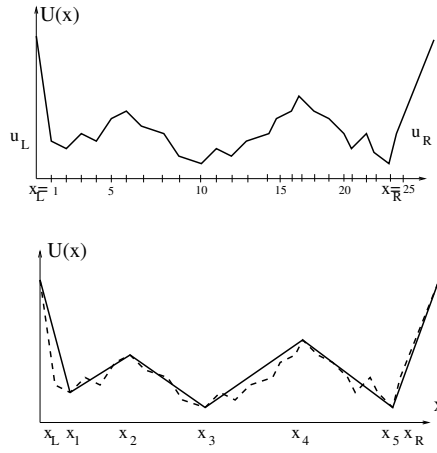


Figure 24.1: *top* One realization of the initial random landscape $U(x)$ drawn from the probability distribution $\mathcal{P}[U]$ with $N = 25$. It contributes to $N_{\text{init}}^{(2n)}(x_L, u_L; u_1, x_1; \dots u_{2n-1}, x_{2n-1}; x_R, u_R)$ with $n = 6$ and $(x_1, \dots, x_{11}) = (2, 3, 4, 6, 10, 11, 12, 17, 21, 22, 24)$ since only $2n - 1 = 11$ points of the initial landscape are actually extrema. *bottom* The corresponding realization of the renormalized landscape where all barriers smaller than some given Γ have been removed. It contributes to $N_{\Gamma}^{(2n')}(x_L, u_L; u_1, x_1; \dots u_{2n'-1}, x_{2n'-1}; x_R, u_R)$ with $n' = 3$. As in the top figure, the straight lines are drawn only for convenience, the landscape being defined solely by the set of (x_i, u_i) , $i = 1, \dots, 2n' - 1 = 5$ of remaining extrema, together with the right and left boundary points.

The main object of interest is the probability measure of the renormalized landscape. We consider the probability $N_{\Gamma}(x_L, u_L; u_1, x_1; \dots u_{2n-1}, x_{2n-1}; x_R, u_R)$ that the renormalized landscape has n local minima situated at positions $x_1, x_3, \dots, x_{2n-1}$ with the potentials $u_1, \dots, u_{2n-1}$ and $(n - 1)$ local maxima situated at positions $x_2, x_4, \dots, x_{2n-2}$ with potentials $u_2, \dots, u_{2n-2}$. Again, more precise and explicit definitions are given in Appendix 24.9.1, with a derivation of the normalization

$$Z(U_L, x_L; U_R, x_R) = \sum_{n=1}^K \int du_1 \dots du_{2n-1} \theta(U_L - u_1) \theta(U_R - u_{2n-1}) \prod_{i=1, n-1} \theta(u_{2i} - u_{2i-1} - \Gamma) \theta(u_{2i} - u_{2i+1} - \Gamma) \sum_{x_L \leq x_1 < x_2 < x_3 < \dots < x_{2n-1} \leq x_R} N_{\Gamma}^{(2n)}(U_L, x_L; u_1, x_1; \dots u_{2n-1}, x_{2n-1}; U_R, x_R) \quad (24.27)$$

The normalization of the measure for the renormalized landscape thus coincides with the normalization of the measure for the initial landscape (24.25, 24.26).

The $N_{\Gamma}^{(2n)}$ satisfy the RG equation (see Appendix 24.9.1)

$$\begin{aligned}
& \partial_\Gamma N_\Gamma^{(2n)}(x_L, u_L; u_1, x_1; \dots u_{2n-1}, x_{2n-1}; x_R, u_R) \\
= & \int_{x_L}^{x_1} dy_1 \int_{y_1}^{x_1} dy_2 \int_{u_1}^{+\infty} du' N_\Gamma^{(2n+2)}(x_L, u_L; u', y_1; u' + \Gamma, y_2; u_1, x_1; \dots u_{2n-1}, x_{2n-1}; x_R, u_R) \\
& + \sum_{i=1}^{n-1} \int_{x_{2i}}^{x_{2i+1}} dy_1 \int_{y_1}^{x_{2i+1}} dy_2 \int_{u_{2i+1}}^{u_{2i+1}-\Gamma} du' \\
& \quad N_\Gamma^{(2n+2)}(x_L, u_L; \dots; u_{2i}, x_{2i}; u', y_1; u' + \Gamma, y_2; u_{2i+1}, x_{2i+1}; \dots; x_R, u_R) \\
& + \sum_{i=1}^{n-1} \int_{x_{2i-1}}^{x_{2i}} dy_1 \int_{y_1}^{x_{2i}} dy_2 \int_{u_{2i-1}}^{u_{2i}-\Gamma} du' \\
& \quad N_\Gamma^{(2n+2)}(x_L, u_L; \dots; u_{2i-1}, x_{2i-1}; u' + \Gamma, y_1; u', y_2; u_{2i}, x_{2i}; \dots; x_R, u_R) \\
& + \int_{x_{2n-1}}^{x_R} dy_1 \int_{y_1}^{x_R} dy_2 \int_{u_{2n-1}}^{+\infty} du' \\
& \quad N_\Gamma^{(2n+2)}(x_L, u_L; u_1, x_1; \dots u_{2n-1}, x_{2n-1}; u' + \Gamma, y_1; u', y_2; x_R, u_R)
\end{aligned} \tag{24.28}$$

where, for convenience and future applications to continuum limits, we have used the integral symbol instead of the sum, i.e. $\int_y^x dz$ instead of $\sum_{z=y+1}^{x-1}$. These RSRG equation describe the decimation upon increasing Γ and are thus a generalization to an arbitrary landscape of the standard RSRG equations considered in the case of a Brownian landscape (see the formulae (197) and the figure 8 in Ref [4]). It simply expresses that as Γ is increased, pairs of extrema separated by an energy barrier Γ are eliminated. Each term in (24.28) corresponds to possible positions of this pair, as represented in Fig 24.2, the first and last one corresponding to edge bonds.

The aim of this paper is to find solvable cases where analytical solutions of (24.28) are possible. The general case with arbitrary correlations in the original landscape can only be studied by numerical implementations of the decimation procedure. This has been done, for instance, in the case of a logarithmically correlated landscape in [35]. However, for the initial landscapes that are defined by an initial local measure, we expect that the measure for the renormalized landscape can be decomposed as a product of blocks associated to bonds as we now describe.

24.2.3 Markovian landscapes and Block-product measures

From now on, we will consider “Markovian landscapes”, corresponding to the cases where the probability measure of the initial landscape (24.24) is a product of block measures of the form:

$$\mathcal{P}[U] = \Phi_0(U_1) \Phi_N(U_N) \prod_{i=1}^{N-1} \exp(-S_i[U_{i+1}, U_i]) \tag{24.29}$$

It follows immediately that the probabilities of the renormalized landscape can be written as a product of block probabilities which depend only on the endpoints of the bonds block, all the information inside the bonds have been in a sense integrated out (24.284):

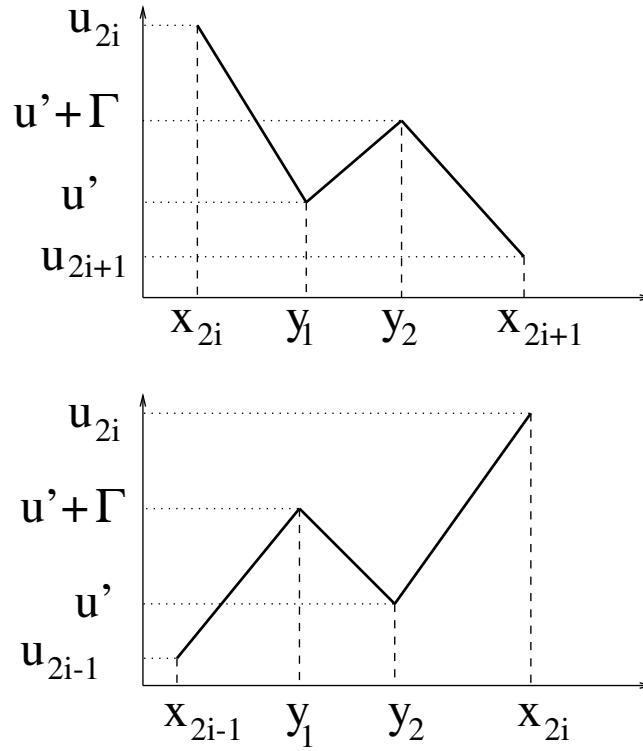


Figure 24.2: Terms in the RSRG equation (24.28) corresponding to the elimination of two local extrema separated by a potential difference Γ , for a descending bond (top) and ascending (bottom) respectively

$$N_{\Gamma}^{(2n)}(x_L, u_L; u_1, x_1; \dots u_{2n-1}, x_{2n-1}; x_R, u_R) = E_{\Gamma}^{+}(x_L, u_L; u_1, x_1) B_{\Gamma}^{-}(u_1, x_1; u_2, x_2) B_{\Gamma}^{+}(u_2, x_2; u_3, x_3) \dots B_{\Gamma}^{+}(u_{2n-2}, x_{2n-2}; u_{2n-1}, x_{2n-1}) E_{\Gamma}^{-}(u_{2n-1}, x_{2n-1}; x_R, u_R) \quad (24.30)$$

Note that the blocks $B_{\Gamma}^{\pm}(u_2, x_2; u_3, x_3)$ themselves do not in general satisfy any normalization. The only constraint is the global normalization:

$$Z(u_L, x_L; u_R, x_R) = \sum_{n=1}^K \text{Tr}(E^{+}(B^{-} B^{+})^{n-1} E^{-}) \quad (24.31)$$

where we have used an obvious matrix notation with respect to (x, u) . Each term in this sum, $N^{(2n)} = \text{Tr}(E^{+}(B^{-} B^{+})^{n-1} E^{-})$, represents the probability that the renormalized landscape has exactly $(2n - 1)$ extrema.

The insertion of the decoupled form (24.30) into the RSRG equation (24.28) yields the

following RG equations for the block measures

$$\begin{aligned} & \partial_{\Gamma} E_{\Gamma}^{+}(x_L, u_L; u, x) \\ = & \int_{x_L}^x dy_1 \int_{y_1}^x dy_2 \int_u^{+\infty} du' E_{\Gamma}^{+}(x_L, u_L; u', y_1) B_{\Gamma}^{-}(u', y_1; u' + \Gamma, y_2) B_{\Gamma}^{+}(u' + \Gamma, y_2; u, x) \end{aligned} \quad (24.32)$$

$$\begin{aligned} & \partial_{\Gamma} B_{\Gamma}^{-}(u, x; u'', x'') \\ = & \int_x^{x''} dy_1 \int_{y_1}^{x''} dy_2 \int_u^{u'' - \Gamma} du' B_{\Gamma}^{-}(u, x; u' + \Gamma, y_1) B_{\Gamma}^{+}(u' + \Gamma, y_1; u', y_2) B_{\Gamma}^{-}(u', y_2; u'', x'') \end{aligned} \quad (24.33)$$

$$\begin{aligned} & \partial_{\Gamma} B_{\Gamma}^{+}(u, x; u'', x'') \\ = & \int_x^{x''} dy_1 \int_{y_1}^{x''} dy_2 \int_{u''}^{u - \Gamma} du' B_{\Gamma}^{+}(u, x; u', y_1) B_{\Gamma}^{-}(u', y_1; u' + \Gamma, y_2) B_{\Gamma}^{+}(u' + \Gamma, y_2; u'', x'') \end{aligned} \quad (24.34)$$

$$\begin{aligned} & \partial_{\Gamma} E_{\Gamma}^{-}(u, x; x_R, u_R) \\ = & \int_{x_L}^x dy_1 \int_{y_1}^x dy_2 \int_u^{+\infty} du' B_{\Gamma}^{-}(u, x; u' + \Gamma, y_1) B_{\Gamma}^{+}(u' + \Gamma, y_1; u', y_2) E_{\Gamma}^{-}(u', y_2; x_R, u_R) \end{aligned} \quad (24.35)$$

Again note that the factorized form and these RG equations hold either for discrete space (with the abovementioned correspondence between the integral symbol and the sum) as well as in the continuum limit where the space cutoff goes to zero.

24.3 Explicit Solutions for a class of models

24.3.1 Soluble models

To be more specific we now consider the continuum models of Markovian landscapes where the potential $U(x)$ is a stochastic process defined by the Langevin equation (24.19). This process corresponds to functional integration with the Fokker-Planck measure

$$\mathcal{P}[U] \sim \exp\left(-\int dx \frac{1}{4} \left(\frac{dU(x)}{dx} - F[U(x), x]\right)^2 + \frac{1}{2} \partial_U F[U(x), x]\right) \quad (24.36)$$

In the following, we will give an explicit solution for the landscape renormalization for all the cases where *the Fokker-Planck measure can be rewritten as a Schrodinger measure*

$$\mathcal{P}[U] \sim \exp\left(-\int dx \frac{1}{4} \left(\frac{dU(x)}{dx}\right)^2 + V[U(x)]\right) \quad (24.37)$$

up to boundaries terms. The two important cases are the toy model defined in (24.1) and the stationary landscapes (24.21).

Toy model

The toy model (24.1) corresponds to the case where the force in the Langevin equation (24.19) is given by (24.20). The Fokker-Planck measure for the toy model can be rewritten as a Schrodinger measure up to boundary terms as follows

$$\exp\left(-\int_{x_1}^{x_2} dx \frac{1}{4} \left(\frac{dU}{dx} - \mu x\right)^2\right) = e^{h(u_1, x_1) - h(u_2, x_2)} \exp\left(-\int_{x_1}^{x_2} dx \frac{1}{4} \left(\frac{dU}{dx}\right)^2 + \frac{1}{2} \mu U\right) \quad (24.38)$$

where the boundary terms reads

$$h(u, x) = -\frac{\mu}{2}xu + \frac{\mu^2}{12}x^3 \quad (24.39)$$

The associated Schrodinger potential is linear in U

$$V[U] = \frac{1}{2}\mu U \quad (24.40)$$

Stationary landscapes

The stationary landscapes correspond to the cases where the force in the Langevin equation (24.19) is independent of space (24.21). The transformation from Fokker-Planck measure to Schrodinger measure up to boundary terms is as follows:

$$\begin{aligned} & \exp\left(-\int_{x_1}^{x_2} dx \frac{1}{4}\left(\frac{dU}{dx} - F[U]\right)^2 + \frac{1}{2}F'[U]\right) \\ &= e^{\frac{1}{2}(W[U(x_1)] - W[U(x_2)])} \exp\left(-\int_{x_1}^{x_2} dx \frac{1}{4}\left(\frac{dU}{dx}\right)^2 + \frac{1}{4}F[U]^2 + \frac{1}{2}F'[U]\right) \end{aligned} \quad (24.41)$$

The associated Schrodinger potential reads

$$V[U] = \frac{1}{4}F[U]^2 + \frac{1}{2}F'[U] = \frac{1}{4}W'[U]^2 - \frac{1}{2}W''[U] \quad (24.42)$$

24.3.2 Properties of the blocks for a Schrodinger measure

For a Schrodinger measure (24.37), the important simplification comes from the translation invariance of the blocks

$$B_{\Gamma}^{\pm}(u, x; u'', x'') = B_{\Gamma}^{\pm}(u; u''; x'' - x) \quad (24.43)$$

$$E_{\Gamma}^{+}(u_L, x_L; u, x) = E_{\Gamma}^{+}(u_L, u, x - x_L) \quad (24.44)$$

$$E_{\Gamma}^{-}(u, x; u_R, x_R) = E_{\Gamma}^{-}(u, u_R, x_R - x) \quad (24.45)$$

which will allow us to obtain explicit expressions for the Laplace transforms

$$\begin{aligned} B_{\Gamma}^{\pm}(u; u''; p) &= \int_0^{+\infty} dx B_{\Gamma}^{\pm}(u; u''; x) \\ E_{\Gamma}^{\pm}(u; u''; p) &= \int_0^{+\infty} dx E_{\Gamma}^{\pm}(u; u''; x) \end{aligned} \quad (24.46)$$

The symmetry $x \rightarrow -x$ moreover implies:

$$B_{\Gamma}^{+}(u, x; u'', x'') = B_{\Gamma}^{-}(u, -x; u'', -x'') \quad (24.47)$$

so that in Laplace we have the simple relations

$$B_{\Gamma}^{+}(u; u''; p) = B_{\Gamma}^{-}(u''; u; p) \quad (24.48)$$

$$E_{\Gamma}^{+}(u; u''; p) = E_{\Gamma}^{-}(u''; u; p) \quad (24.49)$$

To determine these functions, we now present two methods which are rather different in spirit and complementary.

24.3.3 Explicit solution via a path-integral approach

For the Schrodinger measure, the block B_Γ^- can be represented by a path-integral

$$B_\Gamma^-(u_0, x_0; u, x) = \int_{U_{x_0}=u_0}^{U_x=u} DU \exp - \int_{x_0}^x dy \left(\frac{1}{4} \left(\frac{dU}{dy} \right)^2 + V[U] \right) \Theta_\Gamma^-(x_0, x; U) \quad (24.50)$$

which is defined for $u \geq u_0 + \Gamma$ and where the symbol $\Theta_\Gamma^-(x_0, x; U)$ constraints the paths to remain in the interval $]u_0, u[$ for $x_0 < y < x$ and to not perform any returns of more than Γ . As shown in Appendix (24.9.3), this constrained path-integral can be expressed in Laplace transform with respect to $(x - x_0)$ as

$$B_\Gamma^-(u_0, u, p) \equiv \int_{x_0}^{+\infty} dx e^{-px} B_\Gamma^-(u_0, x_0; u, x) = \quad (24.51)$$

$$= \frac{1}{K(u_0, u_0 + \Gamma, p)} \exp \left(- \int_{u_0 + \Gamma}^u du' \partial_2 \ln K(u' - \Gamma, u', p) \right) \quad (24.52)$$

$$= \frac{1}{K(u - \Gamma, u, p)} \exp \left(\int_{u_0}^{u - \Gamma} dv \partial_1 \ln K(v, v + \Gamma, p) \right) \quad (24.53)$$

(the two expressions are equivalent via an integration by part) in terms of the function

$$K(u, v, p) = \frac{1}{w(p)} (\phi_1(u, p) \phi_2(v, p) - \phi_2(u, p) \phi_1(v, p)) \quad (24.54)$$

where $\phi_1(u, p)$ and $\phi_2(u, p)$ are two linearly independent solutions of the equation

$$\partial_u^2 F - V(u)F = pF \quad (24.55)$$

of wronskian) independent of u)

$$w(p) = \phi_1(u, p) \phi_2'(u, p) - \phi_2(u, p) \phi_1'(u, p) \quad (24.56)$$

Similarly for the edges, the final result reads (see Appendix 24.9.3)

$$E_\Gamma^-(u, u_R, p) = \exp \left(\int_u^{u_R} \partial_1 \ln K(u', u' + \Gamma, p) du' \right) \quad (24.57)$$

24.3.4 Explicit solution from the RSRG equations

The RG equations for the blocks B (24.35) are simpler in Laplace variables:

$$\partial_\Gamma B_\Gamma^-(u; u''; p) = \int_u^{u'' - \Gamma} du' B_\Gamma^-(u; u' + \Gamma; p) B_\Gamma^+(u' + \Gamma; u'; p) B_\Gamma^-(u'; u''; p) \quad (24.58)$$

$$\partial_\Gamma B_\Gamma^+(u; u''; p) = \int_{u''}^{u - \Gamma} du' B_\Gamma^+(u; u'; p) B_\Gamma^-(u'; u' + \Gamma; p) B_\Gamma^+(u' + \Gamma; u''; p) \quad (24.59)$$

Using the symmetry (24.49), we obtain that $B_\Gamma^-(u''; u; p)$ satisfies the closed RG equation

$$\partial_\Gamma B_\Gamma^-(u; u''; p) = \int_u^{u''-\Gamma} du' B_\Gamma^-(u; u' + \Gamma; p) B_\Gamma^-(u'; u' + \Gamma; p) B_\Gamma^-(u'; u''; p) \quad (24.60)$$

and the edges satisfy

$$\partial_\Gamma E_\Gamma^-(u, u_R, p) = \int_u^{+\infty} du' B_\Gamma^-(u; u' + \Gamma; p) B_\Gamma^-(u'; u' + \Gamma; p) E_\Gamma^-(u', u_R, p) \quad (24.61)$$

As shown in Appendix (24.9.3), a class of solutions of the RSRG equation (24.60) can be found with the factorized Ansatz

$$B_\Gamma^-(u; u''; p) = A_\Gamma^L(u, p) A_\Gamma^R(u'', p) \quad (24.62)$$

provided that the function Φ defined by

$$\partial_1 \partial_2 \Phi(u, u + \Gamma) = B_\Gamma^-(u; u + \Gamma; p)^2 \quad (24.63)$$

satisfies the following Liouville equation

$$\partial_1 \partial_2 \Phi(u_1, u_2) = \exp(-2\Phi(u_1, u_2)) \quad (24.64)$$

The general solution, discussed in more details in Appendix (24.9.3), can be written

$$\Phi(u_1, u_2) = \ln \left[\frac{1}{\sqrt{w_L w_R}} (\psi_L^{(1)}(u_1) \psi_R^{(2)}(u_2) - \psi_L^{(2)}(u_1) \psi_R^{(1)}(u_2)) \right] \quad (24.65)$$

where $\psi_L^{(1,2)}(u)$ and $\psi_R^{(1,2)}(u)$ are respectively two pairs of two linearly independent solutions of the two Schrodinger equations:

$$\psi_L''(u) = V_L(u, p) \psi_L(u) \quad (24.66)$$

$$\psi_R''(u) = V_R(u, p) \psi_R(u) \quad (24.67)$$

where $V_L(u, p)$ and $V_R(u, p)$ are arbitrary potentials, and where the constants $w_{L,R}$ are the two wronskian, i.e $w_{L,R} = \psi_{L,R}^{(1)}(u) \psi_{L,R}^{(2)'}(u) - \psi_{L,R}^{(2)}(u) \psi_{L,R}^{(1)'}(u)$.

The results of the path-integral approach (24.50) are recovered with the following choice:

$$V_L(u, p) = V_R(u, p) = V(u) + p \quad (24.68)$$

with the identifications $\psi_L^{(1)} = \psi_R^{(1)}$, $\psi_L^{(2)} = \psi_R^{(2)}$ and

$$\Phi(u_1, u_2) = \ln K(u_1, u_2) \quad (24.69)$$

Thus by solving the RSRG equations with the following properties: (i) factorization in blocks (ii) statistical translational invariance and parity of the blocks (iii) an additional factorization property in Laplace variable (24.62), we have found general solutions involving two arbitrary potentials $V_L(u, p)$ and $V_R(u, p)$. This method does not use the knowledge of the initial landscape they correspond to. This is a familiar feature of RG equations, fixed points can be found under symmetry assumptions but finding the basin of attraction is harder. We have showed that the special choice (24.68) corresponds to the case of initial Schrodinger measure (24.50) that we have independently solved via the path-integral method. It would be of course

of great interest to understand whether other choices for the potentials $V_L(u, p)$ and $V_R(u, p)$ yields sensible solutions for the landscape problem. However this analysis goes beyond the scope of this paper and it is left as an open question for future investigation. Note also that all formulae here and in Appendix (24.9.3) hold for discrete space, under the same assumptions (defining Laplace transforms as $B^\pm(u, u'', p) = \sum_{x=1}^{+\infty} B^\pm(u, u'', x)$), and one could also check whether discrete landscape could also be solved by these methods.

Note finally that although fixed point (i.e. continuum) models can alternatively be solved by the constrained path integral method, the RSRG is in principle more powerful. Here for instance we only need assumptions (i) to (iii) to hold only asymptotically at large Γ . In principle the full convergence to the fixed point could be also studied, as in any RG method, and universal results established for a broader set of discrete models within the basin of attraction of the fixed points found here.

In the following we restrict to the case of Schrodinger measures corresponding to the choice (24.68) and use the explicit solutions derived above to study the case of the toy model (24.1) in details and the case of stationary landscapes (24.21) more briefly.

24.4 Statistics of extrema in the toy model

In this section, we apply the general construction of the probability measure of renormalized landscape to the particular case of the toy model (24.1). We start by giving the expressions for the blocks before constructing the full measure.

24.4.1 Blocks of the toy model in terms of Airy functions

We have seen in (24.38) how the functional integrals for the process $dU/dx = \mu x + \eta(x)$ could be recast *up to boundary terms* into functional integrals of the Schrodinger-type. The Fokker-Planck blocks thus read (24.38)

$$B_\Gamma^\pm(u_0, x_0, u_1, x_1) = e^{h(u_0, x_0) - h(u_1, x_1)} \tilde{B}_\Gamma^\pm(u_0, u_1, x_1 - x_0) \quad (24.70)$$

$$E_\Gamma^\pm(u_0, u_1, x_1 - x_0) = e^{h(u_0, x_0) - h(u_1, x_1)} \tilde{E}_\Gamma^\pm(u_0, x_0, u_1, x_1) \quad (24.71)$$

in terms of the Schrodinger blocks $\tilde{B}$ $\tilde{E}$ given in Laplace (24.53, 24.57) by

$$\tilde{B}_\Gamma^-(u_0, u, p) = \tilde{B}_\Gamma^+(u, u_0, p) = \frac{1}{K(u - \Gamma, u, p)} \exp\left(\int_{u_0}^{u-\Gamma} dv \partial_1 \ln K(v, v + \Gamma, p)\right) \quad (24.72)$$

$$\tilde{E}_\Gamma^+(u_b, u, p) = \tilde{E}_\Gamma^-(u, u_b, p) = \exp\left(\int_u^{u_b} \partial_1 \ln K(u', u' + \Gamma, p) du'\right) \quad (24.73)$$

The function K defined in (24.54) now corresponds to the problem with the Schrodinger potential $V[U] = \frac{1}{2}\mu U$ (24.40). Two independent solutions of the Schrodinger equation are the Airy functions (24.347)

$$\phi_1(u, p) = \text{Ai}(au + bp) \quad (24.74)$$

$$\phi_2(u, p) = \text{Bi}(au + bp) \quad (24.75)$$

where

$$a = \left(\frac{\mu}{2}\right)^{1/3} \quad (24.76)$$

$$b = \frac{1}{a^2} \quad (24.77)$$

a is the characteristic inverse energy, whereas b represents the characteristic length scale of the toy model. The wronskian of the two solutions (24.75) reads

$$w(p) = \frac{a}{\pi} \quad (24.78)$$

and thus the function K reads (24.54)

$$K(u, v, p) = \frac{\pi}{a} (\text{Ai}(au + bp)\text{Bi}(av + bp) - \text{Bi}(au + bp)\text{Ai}(av + bp)) \quad (24.79)$$

Although there are no obvious simple expressions for the integrals involved in the blocks (24.73), in calculations it will be often useful to extract the leading behavior for $u < v$ by rewriting

$$K(u, v, p) = \frac{\pi}{a} \text{Ai}(au + bp)\text{Bi}(av + bp) \left(1 - \frac{\text{Bi}(au + bp) \text{Ai}(av + bp)}{\text{Ai}(au + bp) \text{Bi}(av + bp)} \right) \quad (24.80)$$

and

$$\partial_1 \ln K(u, v, p) = \partial_u \ln \text{Ai}(au + bp) + \partial_u \ln \left(1 - \frac{\text{Bi}(au + bp) \text{Ai}(av + bp)}{\text{Ai}(au + bp) \text{Bi}(av + bp)} \right) \quad (24.81)$$

$$(24.82)$$

24.4.2 Normalization of the full Measure for the renormalized landscape

As explained in Section (24.2), we consider left and right reflecting boundaries, i.e. we impose $u(x_L) = u_L$ and $u(x_R) = u_R$ with $u(x_L^-) = +\infty$ and $u(x_R^+) = +\infty$. Then the normalization of the measure is (24.36):

$$Z(u_L, x_L; u_R, x_R) = \int_{u(x_L)=u_L}^{u(x_R)=u_R} DU e^{-\frac{1}{4} \int_{x_L}^{x_R} dx \left(\frac{dU}{dx} - \mu x \right)^2} = \frac{1}{\sqrt{4\pi(x_R - x_L)}} e^{-\frac{(u_R - u_L - \frac{\mu}{2}x_R^2 + \frac{\mu}{2}x_L^2)^2}{4(x_R - x_L)}} \quad (24.83)$$

The decomposition into blocks at scale Γ reads (24.30)

$$\begin{aligned} Z(u_L, x_L, u_R, x_R) &= \sum_{n=1}^{+\infty} \int \prod_{i=1}^{2n-1} du_i dx_i E_{\Gamma}^{+}(u_L, x_L; u_1, x_1) B_{\Gamma}^{-}(u_1, x_1; u_2, x_2) \dots \\ &\quad B_{\Gamma}^{+}(u_{2n-2}, x_{2n-2}; u_{2n-1}, x_{2n-1}) E_{\Gamma}^{-}(u_{2n-1}, x_{2n-1}; u_R, x_R) \quad (24.84) \\ &= e^{h(u_L, x_L) - h(u_R, x_R)} \sum_{n=1}^{+\infty} \int \prod_{i=1}^{2n-1} du_i dx_i \tilde{E}_{\Gamma}^{+}(u_L, u_1, x_1 - x_L) \tilde{B}_{\Gamma}^{-}(u_1, u_2, x_2 - x_1) \dots \end{aligned}$$

$$\tilde{B}_{\Gamma}^{+}(u_{2n-2}, u_{2n-1}, x_{2n-1} - x_{2n-2}) \tilde{E}_{\Gamma}^{-}(u_{2n-1}, u_R, x_R - x_{2n-1}) \quad (24.85)$$

i.e. the boundary terms involving the function h in the transformation from Fokker-Planck to Schrodinger (24.38) cancel between two successive blocks, and thus only survive at the boundaries of the full system (x_L, x_R) .

24.4.3 Alternative expression of the full measure using barriers

The invariance by a global shift in the energy u of the Fokker-Planck blocks

$$B_{\Gamma}^{-}(u_0, x_0; u_1, x_1) = B_{\Gamma}^{-}(0, x_0; u_1 - u_0, x_1) \quad (24.86)$$

$$B_{\Gamma}^{+}(u_0, x_0; u_1, x_1) = B_{\Gamma}^{+}(u_0 - u_1, x_0; 0, x_1) \quad (24.87)$$

translates into the following properties for the Schrodinger blocks (24.71) using the expression of the function h (24.39)

$$\begin{aligned} \tilde{B}_{\Gamma}^{-}(u_0, u_1, x_1 - x_0) &= e^{h(0, x_0) - h(u_0, x_0) + h(u_1, x_1) - h(u_1 - u_0, x_1)} \tilde{B}_{\Gamma}^{-}(0, u_1 - u_0, x_1 - x_0) \\ &= e^{\frac{\mu}{2}x_0u_0 - \frac{\mu}{2}x_1u_0} \tilde{B}_{\Gamma}^{-}(0, u_1 - u_0, x_1 - x_0) \end{aligned} \quad (24.88)$$

$$\begin{aligned} \tilde{B}_{\Gamma}^{+}(u_0, u_1, x_1 - x_0) &= e^{h(u_0 - u_1, x_0) - h(u_0, x_0) + h(u_1, x_1) - h(0, x_1)} \tilde{B}_{\Gamma}^{+}(u_0 - u_1, 0, x_1 - x_0) \\ &= e^{\frac{\mu}{2}x_0u_1 - \frac{\mu}{2}x_1u_1} \tilde{B}_{\Gamma}^{+}(u_0 - u_1, 0, x_1 - x_0) \end{aligned} \quad (24.89)$$

and similarly for the edge blocks E . An alternative expression of (24.85) containing only differences of energies is thus given by

$$\begin{aligned} Z(u_L, x_L, u_R, x_R) &= \sum_{n=1}^{+\infty} \int \prod_{i=1}^{2n-1} du_i dx_i [e^{\frac{\mu^2}{12}x_L^3 - \frac{\mu}{2}x_L(u_L - u_1)} \tilde{E}_{\Gamma}^{+}(u_L - u_1, 0, x_1 - x_L)] \\ &\quad \tilde{B}_{\Gamma}^{-}(0, u_2 - u_1, x_2 - x_1) e^{\frac{\mu}{2}x_2(u_3 - u_1)} \tilde{B}_{\Gamma}^{+}(u_2 - u_3, 0, x_3 - x_2) \\ &\quad \tilde{B}_{\Gamma}^{-}(0, u_4 - u_3, x_4 - x_3) e^{\frac{\mu}{2}x_4(u_5 - u_3)} \tilde{B}_{\Gamma}^{+}(u_4 - u_5, 0, x_5 - x_4) \dots \\ &\quad \tilde{B}_{\Gamma}^{-}(0, u_{2n-2} - u_{2n-3}, x_{2n-2} - x_{2n-3}) e^{\frac{\mu}{2}x_{2n-2}(u_{2n-1} - u_{2n-3})} \tilde{B}_{\Gamma}^{+}(u_{2n-2} - u_{2n-1}, 0, x_{2n-1} - x_{2n-2}) \\ &\quad [e^{\frac{\mu}{2}x_R(u_R - u_{2n-1}) - \frac{\mu^2}{12}x_R^3} \tilde{E}_{\Gamma}^{-}(0, u_R - u_{2n-1}, x_R - x_{2n-1})] \end{aligned} \quad (24.90)$$

where

$$\tilde{B}_{\Gamma}^{-}(0, F, p) = \tilde{B}_{\Gamma}^{+}(F, 0, p) = \frac{1}{K(F - \Gamma, F, p)} \exp\left(\int_0^{F-\Gamma} dv \partial_1 \ln K(v, v + \Gamma, p)\right) \quad (24.91)$$

$$\tilde{E}_{\Gamma}^{-}(0, F, p) = \tilde{E}_{\Gamma}^{+}(F, 0, p) = \exp\left(+ \int_0^F dv \partial_1 \ln K(v, v + \Gamma, p)\right) \quad (24.92)$$

24.4.4 Full measure using barriers for free boundary conditions

The normalization (24.83) concerns fixed boundary conditions (u_L, u_R) and depends only on the difference $(u_R - u_L)$ since there is an invariance with respect to a global shift of all the energies u . For free boundary conditions, we need to sum over the end-potential u_R with fixed u_L , which of course yields a normalization to 1

$$Z_{free}(x_L; x_R) = \int_{-\infty}^{+\infty} du_R Z(u_L, x_L; u_R, x_R) = 1 \quad (24.93)$$

The decomposition into blocks at scale Γ now reads using the formulation in terms of barriers

(24.90) that we now denote by $F_L = u_L - u_1$, $F_1 = u_2 - u_1, \dots$

$$\begin{aligned}
 Z_{free}(x_L; x_R) = 1 = & \sum_{n=1}^{+\infty} \int_0^{+\infty} dF_L \int_0^{+\infty} dF_R \int_{\Gamma}^{+\infty} \prod_{i=1}^{2n-2} dF_i \int_{x_L < x_1 < \dots < x_{2n-1} < x_R} \prod_{j=1}^{2n-1} dx_j \\
 & [e^{\frac{\mu^2}{12}x_L^3 - \frac{\mu}{2}x_L F_L} \tilde{E}_{\Gamma}^{+}(F_L, 0, x_1 - x_L)] \\
 & \tilde{B}_{\Gamma}^{-}(0, F_1, x_2 - x_1) e^{\frac{\mu}{2}x_2(F_1 - F_2)} \tilde{B}_{\Gamma}^{+}(F_2, 0, x_3 - x_2) \\
 & \tilde{B}_{\Gamma}^{-}(0, F_3, x_4 - x_3) e^{\frac{\mu}{2}x_4(F_3 - F_4)} \tilde{B}_{\Gamma}^{+}(F_4, 0, x_5 - x_4) \dots \\
 & \tilde{B}_{\Gamma}^{-}(0, F_{2n-3}, x_{2n-2} - x_{2n-3}) e^{\frac{\mu}{2}x_{2n-2}(F_{2n-3} - F_{2n-2})} \tilde{B}_{\Gamma}^{+}(F_{2n-2}, 0, x_{2n-1} - x_{2n-2}) \\
 & [e^{\frac{\mu}{2}x_R F_R - \frac{\mu^2}{12}x_R^3} \tilde{E}_{\Gamma}^{-}(0, F_R, x_R - x_{2n-1})] \quad (24.94)
 \end{aligned}$$

24.4.5 Full measure using barriers on the infinite line

Of particular interest is of course the limit of the infinite system $x_L \rightarrow -\infty$ and $x_R \rightarrow \infty$. We define the following function that describes the right boundary in the limit $x_R \rightarrow \infty$

$$g_{\Gamma}(x) \equiv \lim_{x_R \rightarrow \infty} \int_0^{+\infty} dF_R [e^{+\frac{\mu}{2}x_R F_R - \frac{\mu^2}{12}x_R^3} \tilde{E}_{\Gamma}^{-}(0, F_R, x_R - x)] \quad (24.95)$$

Using (24.73)

$$g_{\Gamma}(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda}{2\pi} e^{-i\lambda x} \lim_{x_R \rightarrow \infty} \left[e^{-\frac{\mu^2}{12}x_R^3 + i\lambda x_R} \int_0^{+\infty} dF e^{+\frac{\mu}{2}x_R F} e^{-\int_0^F du \partial_1 \ln K(u, u + \Gamma, i\lambda) du} \right] \quad (24.96)$$

In the limit $x_R \rightarrow \infty$, the integral over F is dominated by a saddle with F large. Using (24.82) it is convenient to rewrite

$$\partial_1 \ln K(F, F + \Gamma, i\lambda) = \partial_F \ln \text{Ai}(aF + bi\lambda) - \psi_{\Gamma}(F, \lambda) \quad (24.97)$$

$$\psi_{\Gamma}(F, \lambda) = \frac{a \text{Ai}(a(F + \Gamma) + bi\lambda)}{\pi \text{Ai}(aF + bi\lambda) [\text{Ai}(aF + bi\lambda) \text{Bi}(a(F + \Gamma) + bi\lambda) - \text{Bi}(aF + bi\lambda) \text{Ai}(a(F + \Gamma) + bi\lambda)]} \quad (24.98)$$

A saddle-point analysis with the asymptotic behavior (24.351) immediately gives

$$\int_0^{+\infty} d\zeta e^{\zeta y} \text{Ai}(\zeta + b) \simeq_{y \rightarrow \infty} e^{\frac{1}{3}y^3 - by} \quad (24.99)$$

As a consequence, we get

$$g_{\Gamma}(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda}{2\pi} e^{-i\lambda x} \frac{1}{a \text{Ai}(ib\lambda)} e^{-\int_0^{+\infty} du \psi_{\Gamma}(u, \lambda)} \quad (24.100)$$

Similarly, the other boundary $x_L \rightarrow -\infty$ yields

$$\lim_{x_L \rightarrow -\infty} \int_0^{+\infty} dF_L [e^{\frac{\mu^2}{12}x_L^3 - \frac{\mu}{2}x_L F_L} \tilde{E}_{\Gamma}^{+}(F_L, 0, x - x_L)] = g_{\Gamma}(-x) \quad (24.101)$$

As a consequence, the full measure using barriers on the infinite line reads (24.94)

$$\begin{aligned}
Z_{free}(-\infty; +\infty) &= 1 = \sum_{n=1}^{+\infty} \int_{\Gamma} \prod_{i=1}^{+\infty} dF_i \int_{x_1 < \dots < x_{2n-1}} \prod_{j=1}^{2n-1} dx_j g_{\Gamma}(-x_1) \\
&\quad \tilde{B}_{\Gamma}^{-}(0, F_1, x_2 - x_1) e^{\frac{\mu}{2} x_2 (F_1 - F_2)} \tilde{B}_{\Gamma}^{+}(F_2, 0, x_3 - x_2) \dots \\
&\quad \tilde{B}_{\Gamma}^{-}(0, F_{2n-3}, x_{2n-2} - x_{2n-3}) e^{\frac{\mu}{2} x_{2n-2} (F_{2n-3} - F_{2n-2})} \tilde{B}_{\Gamma}^{+}(F_{2n-2}, 0, x_{2n-1} - x_{2n-2}) \\
&\quad g_{\Gamma}(x_{2n-1}) \quad (24.102)
\end{aligned}$$

24.5 Boltzmann equilibrium at low temperatures of the toy model

In this section, we use the explicit measure of the renormalized landscapes of the toy model derived in the previous section to compute various observables that characterize the equilibrium of the toy model (24.1) on the full line $] -\infty, +\infty[$ at low temperature. For $T = 0$, we need to compute the distribution over samples of the position of absolute minimum energy on the full line. For small T , we need to compute the probabilities of configurations with nearly degenerate minima which govern the thermal fluctuations.

24.5.1 Distribution of the position at zero temperature

To obtain the distribution of the position of absolute minimum energy, we need the final state of the renormalized landscape, corresponding to the $\Gamma \rightarrow \infty$ limit, where all internal barriers have been eliminated. The decomposition (24.102) then reduces to the term $n = 1$ that contains only the boundary blocks

$$Z_{free}(-\infty; +\infty) = 1 = \int_{-\infty}^{+\infty} dx g_{\infty}(-x) g_{\infty}(x) \quad (24.103)$$

where (24.100)

$$g_{\infty}(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda}{2\pi} \frac{e^{-i\lambda x}}{a \text{Ai}(bi\lambda)} \quad (24.104)$$

since the function ψ_{Γ} (24.98) vanishes for $\Gamma \rightarrow \infty$. The distribution of the position x of the minimum on $] -\infty, +\infty[$ reads

$$P_{]-\infty, +\infty[}(x) = g_{\infty}(x) g_{\infty}(-x) \quad (24.105)$$

in agreement with [37, 28]. The normalization is easily checked with the relation $b = 1/a^2$ and the properties (24.349) (24.352)

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx P(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda}{2\pi} \frac{1}{a^2 \text{Ai}(ib\lambda)^2} = \frac{1}{2i} \left[\frac{\text{Bi}(z)}{\text{Ai}(z)} \right]_{z=-i\infty}^{z=+i\infty} = 1 \quad (24.106)$$

Let us now describe the asymptotic behaviors of this distribution. The Airy function $\text{Ai}(z)$ has an infinity of poles which all are on the negative real axis: the largest one is $e_1 = -2.33810741..$ where $\text{Ai}'(-|e_1|) = 0.70121082$, the second one is $e_2 = -4.08794944..$ where $\text{Ai}'(-|e_2|) =$

-0.80311137 and so on. For $x < 0$, we may deform the contour in the complex plane to express the function g as a series over the zeroes ($-|e_s|$) of the Airy function

$$g_\infty(x < 0) = a \sum_{s=1}^{+\infty} \frac{1}{\text{Ai}'(-|e_s|)} e^{-a^2|e_s||x|} \quad (24.107)$$

Thus $g(x)$ decays exponentially for $x \rightarrow -\infty$. For $x > 0$, we may shift the contour integration $\lambda \rightarrow \lambda - ic$

$$g_\infty(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda}{2\pi} \frac{e^{-i\lambda x - cx}}{a \text{Ai}(bi\lambda + bc)} \quad (24.108)$$

Assuming c large, we replace the function Ai by its asymptotic behavior (24.351)

$$g_\infty(x) = \frac{1}{a\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\lambda (b(c + i\lambda))^{1/4} e^{-x(c+i\lambda) + \frac{2}{3}(b(c+i\lambda))^{3/2}} \quad (24.109)$$

A saddle-point analysis leads to the choice $c = \frac{x^2}{b^3}$ and to the asymptotic behavior

$$g_\infty(x) \simeq_{x \rightarrow +\infty} 2a^3 x e^{-\frac{1}{3}(a^2 x)^3} \quad (24.110)$$

Putting (24.107) and (24.110) together, the asymptotic behavior of the distribution (24.105) is given by

$$P_{]-\infty, +\infty[}(x) \simeq_{|x| \rightarrow +\infty} 2a^4 |x| \frac{1}{\text{Ai}'(-|a_1|)} e^{-\frac{1}{3}(a^2|x|)^3 - a^2|a_1||x|} \quad (24.111)$$

24.5.2 Moments of the position at zero temperature

Here we obtain the explicit analytical expressions for the disorder averaged thermal moments $\overline{\langle x^p \rangle}$ of the position in the limit of zero temperature, where they are determined by the absolute minimum. They can be derived from the Fourier transform

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{isx} P(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda}{2\pi} \frac{1}{a^2 \text{Ai}(ib\lambda) \text{Ai}(ib(\lambda + s))} \quad (24.112)$$

as (24.77)

$$\overline{\langle x^p \rangle} = b^p \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{du}{2\pi} \frac{1}{\text{Ai}(iu)} \partial_{(iu)}^p \left(\frac{1}{\text{Ai}(iu)} \right) = \mu^{-2p/3} C_p \quad (24.113)$$

where C_p are numerical constants given by

$$C_p = 2^{2p/3} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{du}{2\pi} \frac{1}{\text{Ai}(iu)} \partial_{(iu)}^p \left(\frac{1}{\text{Ai}(iu)} \right) \quad (24.114)$$

For odd p , an integration by parts shows that C_p vanishes, i.e. the odd moments vanish as it should from the symmetry $(x, -x)$. For even p , we may also write

$$C_{2p} = 2^{4p/3} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{du}{2\pi} \frac{1}{\text{Ai}(iu)} \partial_{(iu)}^{2p} \left(\frac{1}{\text{Ai}(iu)} \right) = 2^{4p/3} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{du}{2\pi} \left(\partial_u^p \left(\frac{1}{\text{Ai}(iu)} \right) \right)^2 \quad (24.115)$$

We give the lowest moments:

$$C_2 = -2^{4/3} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{du}{2\pi} \frac{\text{Ai}'(iu)^2}{\text{Ai}(iu)^4} = \frac{2^{4/3}}{3} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{du}{2\pi} \frac{-iu}{\text{Ai}(iu)^2} = 1.05423856519.. \quad (24.116)$$

$$C_4 = 2^{8/3} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{du}{2\pi} \frac{(iu - 2 \frac{\text{Ai}'(iu)^2}{\text{Ai}(iu)^2})^2}{\text{Ai}(iu)^2} = 3.15451.. \quad (24.117)$$

These exact results are in reasonable agreement with numerical simulations of Ref. [38] which found $C_2 = 1.05381 \pm .01$ and $3.15441 \pm .04$. It should also be compared with the result of approximate replica methods which give respectively $C_2 = 3/(2\sqrt{\pi})^{2/3} = 1.29038$ (RSB gaussian variational method), $C_2 = 1.00181$ (vector breaking) [38]. Note also the exact result for the ratio $R = C_4/C_2^2 = 2.83827..$ in good agreement with the numerical simulation result $R = 2.84048$, while the replica approximations give respectively $R = 3$ (GVM) and $R = 2.995$ (VB).

24.5.3 Joint distribution of position and energy at zero temperature

To obtain information on the minimal energy on the full line, we need to fix the absolute value of the energy at a given point for all samples. The usual natural choice is of course

$$U(x = 0) = 0 \quad (24.118)$$

Then in the renormalization procedure, we need to keep information on this value, that doesn't a priori appear in the list of extrema. As a consequence, to obtain the joint distribution $P_{]-\infty, +\infty[}(x_0, u_0)$ of the minimal energy $U(x_0) = -u_0$ (with $u_0 \in [0, +\infty[$ and of its position x_0 , we need to consider the renormalized landscapes on the two independent half-lines $] -\infty, 0]$ and $[0, +\infty[$ which have the same statistical properties. More precisely, we have for the case $x_0 > 0$

$$P_{]-\infty, +\infty[}(x_0 > 0, u_0) = P_{[0, \infty[}(x_0, u_0) \int_0^{u_0} du_1 \int_0^{+\infty} dx_1 P_{[0, \infty[}(x_1, u_1) \quad (24.119)$$

where $P_{[0, \infty[}(x_0, u_0)$ is the joint probability that (x_0, u_0) characterizes the absolute minimum on the half-line, and where the integrals represents the probability that the minimum on the other half line is less deep than u_0 . The decomposition (24.94) for the case $x_L = 0$ and $x_R \rightarrow \infty$ becomes in the limit $\Gamma \rightarrow \infty$ using (24.95)

$$Z_{free}(0; +\infty) = 1 = \int_0^{+\infty} dF_L \int_0^{+\infty} dx \tilde{E}_{+\infty}^+(F_L, 0, x) g_\infty(x) \quad (24.120)$$

where g_∞ has been defined in (24.104) and where the edge block $\tilde{E}^+$ has for Laplace transform in the $\Gamma \rightarrow \infty$

$$\tilde{E}_\infty^+(F, 0, p) = \frac{\text{Ai}(aF + bp)}{\text{Ai}(bp)} \quad (24.121)$$

As a consequence, the joint distribution for the half line reads

$$P_{[0, \infty[}(x, u) = \tilde{E}_{+\infty}^+(u, 0, x) g_\infty(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda_1}{2\pi} \frac{e^{i\lambda_1 x} \text{Ai}(au + bi\lambda_1)}{\text{Ai}(bi\lambda_1)} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda_2}{2\pi} \frac{e^{-i\lambda_2 x}}{a \text{Ai}(bi\lambda_2)} \quad (24.122)$$

in agreement with [37]. In particular, for $u = 0$ we have

$$P_{[0, \infty[}(x, 0) = \delta(x)g_\infty(0) \quad (24.123)$$

as it should in terms of the function g_∞ (24.104).

For the distribution of the energy u_0 alone, the relation (24.119) becomes after taking into account the two sides $x > 0$ and $x < 0$

$$P_{]-\infty, +\infty[}(u_0) = 2P_{[0, \infty[}(u_0) \int_0^{u_0} du P_{[0, \infty[}(u) = \frac{d}{du_0} \left[\int_0^{u_0} du P_{[0, \infty[}(u) \right]^2 \quad (24.124)$$

where

$$P_{[0, \infty[}(u) = \int_0^{+\infty} dx P_{[0, \infty[}(x, u) = \lim_{p \rightarrow 0} \left(\int_{-i\infty}^{+i\infty} \frac{dz_2}{2i\pi} \frac{1}{a\text{Ai}(bz_2)} \int_{-i\infty}^{+i\infty} \frac{dz_1}{2i\pi} \frac{\text{Ai}(au + bz_1)}{\text{Ai}(bz_1)} \frac{1}{p + z_2 - z_1} \right) \quad (24.125)$$

is the distribution of the energy alone on the half-line $[0, +\infty[$. For $u > 0$, we may close the contour in z_1 on the right at infinity to obtain via Cauchy theorem

$$P_{[0, \infty[}(u) = \int_{-i\infty}^{+i\infty} \frac{dz_2}{2i\pi} \frac{\text{Ai}(au + bz_2)}{a\text{Ai}^2(bz_2)} = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda}{2\pi} \frac{\text{Ai}(au + bi\lambda)}{a\text{Ai}^2(bi\lambda)} \quad (24.126)$$

and this expression is also valid for $u = 0$ (24.123).

The expansion near $u = 0$ reads

$$P_{[0, \infty[}(u) \simeq_{u \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda}{2\pi} \frac{\text{Ai}(bi\lambda) + au\text{Ai}'(bi\lambda) + \frac{a^2 u^2}{2}\text{Ai}''(bi\lambda)}{a\text{Ai}^2(bi\lambda)} = g_\infty(0) - \frac{u^2}{2}g'_\infty(0) + O(u^4) \quad (24.127)$$

which leads to the following expansion for the full line

$$P_{]-\infty, +\infty[}(u_0) \simeq_{u_0 \rightarrow 0} 2u_0 g_\infty^2(0) + O(u_0^3) \quad (24.128)$$

To obtain the asymptotic behavior for large u , we may shift the contour integration $\lambda \rightarrow \lambda - ic$, and assuming c large, we get via the saddle-point method with the choice $c = \frac{au}{3b}$ (24.351)

$$P_{[0, \infty[}(u) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda}{2\pi} \frac{\text{Ai}(au + bi\lambda + bc)}{a\text{Ai}^2(bi\lambda + bc)} \quad (24.129)$$

$$\simeq_{c \rightarrow \infty} \frac{1}{a\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\lambda \frac{(bi\lambda + bc)^{1/2}}{(au + bi\lambda + bc)^{1/4}} e^{\frac{4}{3}(bi\lambda + bc)^{3/2} - \frac{2}{3}(au + bi\lambda + bc)^{3/2}} \quad (24.130)$$

$$\simeq_{u \rightarrow \infty} \frac{2}{3}a(au)^{1/2} e^{-4\left(\frac{au}{3}\right)^{3/2}} \quad (24.131)$$

24.5.4 Samples presenting nearly degenerate minima, thermal fluctuations at low T

As explained in the introduction, there are remarkable identities [18] for the disorder averages of the thermal cumulants of the position (24.4). It was moreover shown in [18] that the result (24.5) for the second cumulant at low temperature contains a finite contribution from the rare configurations presenting two nearly degenerate minima. In this section, we compute the statistical properties of such configurations and show that they actually give the full exact result (24.5).

Configurations with two nearly degenerate minima

It is shown in Appendix (24.9.4) that the probability to have two nearly degenerate minima separated by an energy difference $\Delta E = \epsilon \rightarrow 0$ and situated at x_1 and x_2 reads

$$\mathcal{D}(\epsilon, x_1, x_2) = \epsilon g_\infty(-x_1) d(x_2 - x_1) g_\infty(x_2) + O(\epsilon^2) \quad (24.132)$$

where the function g_∞ has been defined in (24.104) and where

$$d(y) = a \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda}{2\pi} e^{i\lambda y} \frac{Ai'(ib\lambda)}{Ai(ib\lambda)} \quad (24.133)$$

The total probability density to have two degenerate minima separated by a distance $y > 0$ thus reads

$$D(y) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left(\frac{\mathcal{D}(\epsilon, x_1, x_1 + y)}{\epsilon} \right) = d(y) \int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 g(-x_1) g(x_1 + y) = bd(y) \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda}{2\pi} \frac{e^{-i\lambda y}}{Ai^2(ib\lambda)} \quad (24.134)$$

In Laplace with respect to y we have

$$\hat{D}(p) \equiv \int_0^{+\infty} dy e^{-py} D(y) = a \int_{-i\infty}^{+i\infty} \frac{dz_2}{2\pi i} \frac{1}{Ai^2(z_2)} \int_{-i\infty}^{+i\infty} \frac{dz_1}{2\pi i} \frac{Ai'(z_1)}{Ai(z_1)} \frac{1}{bp + z_2 - z_1} \quad (24.135)$$

In particular, the second moment is given by

$$\int_0^{+\infty} dy y^2 D(y) = \lim_{p \rightarrow 0} \left(\frac{d^2 \hat{D}(p)}{dp^2} \right) \quad (24.136)$$

$$= \lim_{p \rightarrow 0} \left(a \int_{-i\infty}^{+i\infty} \frac{dz_2}{2\pi i} \frac{1}{Ai^2(z_2)} \int_{-i\infty}^{+i\infty} \frac{dz_1}{2\pi i} \frac{Ai'(z_1)}{Ai(z_1)} \frac{2b^2}{(bp + z_2 - z_1)^3} \right) \quad (24.137)$$

$$= ab^2 \int_{-i\infty}^{+i\infty} \frac{dz_2}{2\pi i} \frac{1}{Ai^2(z_2)} \left(\frac{Ai'}{Ai} \right)''(z_2) \quad (24.138)$$

where we have used Cauchy theorem. This last integral may be computed via integration by part, with the help of the following properties of Airy function: the function $f(z) = \frac{Ai'(z)}{Ai(z)}$ satisfies $f'(z) = z - f^2(z)$ and the function $g(z) = \frac{1}{Ai^2(z)}$ satisfies $g'(z) = -2f(z)g(z)$:

$$\int_0^{+\infty} dy y^2 D(y) = \frac{ab^2}{2} \int_{-i\infty}^{+i\infty} \frac{dz_2}{2\pi i} \frac{1}{Ai^2(z_2)} = \frac{ab^2}{2} \left[\frac{Bi(z)}{2iAi(z)} \right]_{z=-i\infty}^{z=+i\infty} = \frac{ab^2}{2} = \frac{1}{\mu} \quad (24.139)$$

with (24.77).

Contribution to the second thermal cumulant at low temperature

The contribution of these configurations with two degenerate minima to the second thermal cumulant of the position (24.5) can be estimated at order T in temperature as follows. The two minima have for respective Boltzmann weights $p = \frac{1}{1+e^{-\beta\epsilon}}$ and $(1-p) = \frac{e^{-\beta\epsilon}}{1+e^{-\beta\epsilon}}$. The variable

$(x - \langle x \rangle)$ is $(1-p)(x_1 - x_2)$ with probability p and $p(x_2 - x_1)$ with probability $1-p$, so we get after averaging over ϵ with a flat measure as in the study of the rare events in [4, 9]

$$\overline{\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle} = \overline{p(1-p)(x_1 - x_2)^2} \quad (24.140)$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 \int_{x_1}^{+\infty} dx_2 \int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon \mathcal{D}'(\epsilon = 0, x_1, x_2) \frac{e^{-\epsilon/T}}{(1 + e^{-\epsilon/T})^2} (x_2 - x_1)^2 \quad (24.141)$$

$$= T \int_0^{+\infty} dy D(y) y^2 \quad (24.142)$$

Using (24.139), we exactly find the exact result (24.5). This shows that the thermal fluctuations at low temperature are entirely due the presence of metastable states in rare disordered samples. In particular, the susceptibility

$$\chi \equiv \frac{1}{T} (\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2) \quad (24.143)$$

has for average a finite value at zero-temperature

$$\bar{\chi} = \frac{1}{\mu} \quad (24.144)$$

but only the samples with two nearly degenerate minima contribute to this zero-temperature value. The typical samples with only one minimum have a susceptibility that vanishes at zero temperature. This type of behavior was also found numerically in [25] and analyzed in [20] for the random directed polymer model.

Contribution to the thermal moments at low temperature

The small-T behavior of the even moments of $(x - \langle x \rangle)$ can be similarly computed

$$\overline{\langle (x - \langle x \rangle)^{2n} \rangle} = \frac{T}{n} \int_0^{+\infty} y^{2n} D(y) + O(T^2) \quad (24.145)$$

The moments of $D(y)$ read, with the same method as in (24.138)

$$\int_0^{+\infty} dy y^k D(y) = a(-1)^k b^k \int_{-i\infty}^{+i\infty} \frac{dz}{2\pi i} \frac{1}{Ai^2(z)} \left(\frac{Ai'}{Ai} \right)^{(k)}(z) = \frac{\sigma^{(k-2)/3}}{\mu^{(2k-1)/3}} m_k \quad (24.146)$$

where m_k are numbers given by

$$m_k = (-1)^k 2^{(2k-1)/3} \int_{-i\infty}^{+i\infty} \frac{dz}{2\pi i} \frac{1}{Ai^2(z)} \left(\frac{Ai'}{Ai} \right)^{(k)}(z) \quad (24.147)$$

Discussion

The comparison between (24.145) and (24.4) shows that there are a lot of cancelations in the disorder averages of the cumulants. This phenomenon was already emphasized in [19] for the random directed polymer, and will be studied in more details in [39] for the toy model

as well as in other one-dimensional random systems which do not present the statistical tilt symmetry leading to the identities (24.4).

Another question that needs further explanations and that will be studied in [39] is why the result (24.5) which can be understood at order T by considering only the configurations with two degenerate minima remains true for arbitrary temperature. Indeed, in the light of the above discussion, it would be natural to expect corrections at order T^2 coming from configurations with three degenerate minima and described by the distribution function analogous to (24.132)

$$\mathcal{T}(\epsilon_1, \epsilon_2, x_1, x_2, x_3) = \epsilon_1 \epsilon_2 g_\infty(-x_1) d(x_2 - x_1) d(x_3 - x_2) g_\infty(x_3) \quad (24.148)$$

and so on for configurations with n nearly degenerate minima. One also expect corrections from the thermal width around minima. The study of the roles played by these various effects in different systems is postponed to a future work [39].

24.6 Non-equilibrium dynamics of the toy model

In this section, we study the non-equilibrium dynamics of the toy model by using the full measure of the renormalized landscape of the toy model for an arbitrary scale Γ . We also briefly summarize some results for the RFIM in a field gradient, already discussed in the Introduction.

As in the Sinai model [4], the long-time dynamics is asymptotically entirely determined by the renormalized landscape at scale

$$\Gamma = T \ln t \quad (24.149)$$

in the sense that a particle starting at x_0 at time $t = 0$ will be at time t around the minimum of the renormalized valley at scale Γ that contains the initial position x_0 . As in the Sinai model [4], this method allows to compute asymptotically exact results for scaling variables in the limit $t \rightarrow \infty$ corresponding to large barriers, and to large distances. Here in the toy model, there is a typical scale of energy given by $(1/a)$ and a typical length $b = 1/a^2$ (24.77). As a consequence, we need to define the following scaling variables for the barrier

$$\gamma \equiv a\Gamma = \left(\frac{\mu}{2}\right)^{1/3} T \ln t \quad (24.150)$$

and for the length

$$\tilde{x} = \frac{x}{b} = \left(\frac{\mu}{2}\right)^{2/3} x \quad (24.151)$$

The RSRG method will thus give asymptotic exact results for the dynamics in the double limit $t \rightarrow \infty$ (to have large barriers Γ) and $\mu \rightarrow 0$ (to have large typical scales for energy and length in the toy landscape) with the scaling variables γ and $\tilde{x}$ fixed. For large γ , as studied in previous section, the system will reach equilibrium. For small γ , i.e. when the barrier $\Gamma = T \ln t$ is much smaller than the characteristic energy scale $(1/a)$ of the toy model, the dynamics should look like the Sinai model, where the typical length associated to the dynamics is Γ^2 [4] so that the scaling variable for distance of diffusion during the time t reads in this regime

$$(\Delta X)_{\text{Sinai}} = \frac{\Delta x}{\Gamma^2} = \frac{\Delta \tilde{x}}{\gamma^2} \quad (24.152)$$

We will first consider a global quantity of the whole system: each sample is characterized by an equilibration time t_{eq} corresponding to the largest barrier Γ_{eq} in the system via

$$\Gamma_{eq} = T \ln t_{eq} \quad (24.153)$$

We will compute the distribution over samples of this equilibration time and then characterize the samples which have an anomalously large equilibration time and which thus dominate the long time dynamics. We will then study local quantities, such as the probability density of minima of the renormalized landscape, and the diffusion front, i.e. the generalization of the Kesten distribution of the Sinai model [6, 4] to the case of the toy model.

As discussed in the Introduction, the equilibrium state for the RFIM in a field gradient for large J is obtained by stopping the RSRG at scale $\Gamma = \Gamma_{eq0} = T \ln t_{eq0} = 2J$ at which equilibrium is attained and putting a B domain wall in each minimum and a A domain in each maximum of the renormalized landscape at scale $\Gamma = 2J$. The equilibrium state thus consists in a B domain plus n additional pairs of domains $A - B$, the probability of n with respect to sample being thus $N_{\Gamma=2J}^{(2+2n)}$. The distribution of the total number of domains at equilibrium is thus a scaling function of $\gamma_{eq0} = a2J$. Below we obtain the behavior at large γ_{eq0} of these probabilities for $n = 0, 1$ as well as an estimate of the total number of domains at small γ_{eq0} . Similarly, inserting instead $\Gamma = T \ln t$, one also finds these probabilities for the out of equilibrium system at time t starting from a random (i.e. high temperature) configuration at time zero. The total magnetization reads

$$M = 2 \sum_{\alpha=1}^{N_A} a_{\alpha} - 2 \sum_{\alpha=1}^{N_B} b_{\alpha} \quad (24.154)$$

its probability measure at time t can thus be formally expressed using the full measure for the renormalized landscape at $\Gamma = T \ln t$, and the equilibrium expression obtained using $\Gamma = 2J$. In the limit of large γ_{eq0} , its probability distribution coincides exactly with the one of the absolute minimum of the toy model given by formula (24.105) setting $M = 2x$.

For non random initial configurations prepared with a single domain B , the equilibration time of this domain is t_{eq} computed below (provided $T \ln t_{eq0} > T \ln t_{eq}$, otherwise additional pairs are created at time t_{eq0} and take positions in the additional deep extrema). If the single domain is A , then it is expelled from the system when the extrema corresponding to the highest barrier is decimated, again the expulsion time is the same $T \ln t_{exp} = T \ln t_{eq}$. Note, interestingly, that if two almost degenerate minima (within energy difference T) exist, the domain wall A will be expelled with finite probabilities towards the two boundaries, and the system will be in a macroscopic mixture of two reversed states (either all spins $(+)$ or all $(-)$) between times t_{exp} and t_{eq0} (if we assume that $hL \ll J$).

24.6.1 Distribution over samples of the equilibration time

We first study the distribution over samples of the equilibration time t_{eq} at which equilibrium is reached. The probability $\mathcal{P}(t_{eq} < t)$ that the system has already reached equilibrium at time t is directly given by the probability that there remains only one valley at renormalization scale $\Gamma = T \ln t$ in the decomposition (24.102) with (24.100)

$$\mathcal{P}(t_{eq} < t) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx g_{\Gamma}(-x) g_{\Gamma}(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda}{2\pi} \frac{1}{a^2 A i^2(i b \lambda)} e^{-2 \int_0^{+\infty} dF \psi_{\Gamma}(F, \lambda)} \quad (24.155)$$

where ψ_{Γ} has been defined in (24.98).

It is convenient to rewrite it as a scaling function of γ defined in (24.150)

$$\mathcal{P}(t_{eq} < t) = \Phi(\gamma) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda}{2\pi} \frac{1}{A i^2(i \lambda)} e^{-2 \int_0^{+\infty} d\tilde{f} \tilde{\psi}_{\gamma}(\tilde{f}, \lambda)} \quad (24.156)$$

with

$$\tilde{\psi}_\gamma(f, \lambda) = \frac{\text{Ai}(f + \gamma + i\lambda)}{\pi \text{Ai}(f + i\lambda) [\text{Ai}(f + i\lambda) \text{Bi}(f + \gamma + i\lambda) - \text{Bi}(f + i\lambda) \text{Ai}(f + \gamma + i\lambda)]} \quad (24.157)$$

Equivalently, this result describes the probability distribution $P_{\max}(\Gamma)$ over samples of the largest barrier $\Gamma = T \ln t_{eq}$ existing in the system

$$P_{\max}(\Gamma) = \frac{d}{d\Gamma} \mathcal{P}(t_{eq} < t) = \frac{d}{d\Gamma} \Phi(a\Gamma) \quad (24.158)$$

Probability of large equilibration times

For large γ , the dominant behavior of the function $\tilde{\psi}_\gamma$ (24.157) is found by using (24.351)

$$\frac{\text{Ai}(\gamma + f + i\lambda)}{\text{Bi}(\gamma + f + i\lambda)} \simeq_{\gamma \rightarrow \infty} \frac{1}{2} e^{-\frac{4}{3}(\gamma + f + i\lambda)^{3/2}} \quad (24.159)$$

which leads to

$$\tilde{\psi}_\gamma(f, \lambda) \simeq_{\gamma \rightarrow \infty} \frac{a e^{-\frac{4}{3}(\gamma + f + i\lambda)^{3/2}}}{2\pi \text{Ai}^2(f + i\lambda) \left[1 - e^{-\frac{4}{3}(\gamma + f + i\lambda)^{3/2}} \left(\frac{\text{Bi}(f + i\lambda)}{2\text{Ai}(f + i\lambda)} \right) \right]} \quad (24.160)$$

$$\simeq_{\gamma \rightarrow \infty} \frac{1}{2\pi \text{Ai}^2(f + i\lambda)} e^{-\frac{4}{3}\gamma^{3/2} - 2\gamma^{1/2}(f + i\lambda) + O\left(\frac{1}{\gamma^{1/2}}\right)} \quad (24.161)$$

The change of variable $f = \frac{w}{\sqrt{\gamma}}$ gives

$$\int_0^{+\infty} df \tilde{\psi}_\gamma(f, \lambda) \simeq_{\gamma \rightarrow \infty} \int_0^{+\infty} \frac{dw}{\sqrt{\gamma}} \frac{1}{2\pi \text{Ai}^2(i\lambda + \frac{w}{\sqrt{\gamma}})} e^{-\frac{4}{3}\gamma^{3/2} - 2i\lambda\gamma^{1/2} - 2w} \left[1 + O\left(\frac{1}{\gamma^{1/2}}\right) \right] \quad (24.162)$$

$$\simeq_{\gamma \rightarrow \infty} \frac{1}{4\pi\sqrt{\gamma}\text{Ai}^2(i\lambda)} e^{-\frac{4}{3}\gamma^{3/2} - 2i\lambda\gamma^{1/2}} \left[1 + O\left(\frac{1}{\gamma^{1/2}}\right) \right] \quad (24.163)$$

The leading behavior of (24.156) is thus given by

$$\Phi(\gamma) \simeq_{\gamma \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda}{2\pi} \frac{1}{\text{Ai}^2(i\lambda)} \left[1 - \frac{1}{2\pi\sqrt{\gamma}\text{Ai}^2(i\lambda)} e^{-\frac{4}{3}\gamma^{3/2} - 2i\lambda\gamma^{1/2}} \left[1 + O\left(\frac{1}{\gamma^{1/2}}\right) \right] \right] \quad (24.164)$$

$$\simeq_{\gamma \rightarrow \infty} 1 - \frac{e^{-\frac{4}{3}\gamma^{3/2}}}{2\pi\sqrt{\gamma}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda}{2\pi} \frac{e^{-2i\lambda\gamma^{1/2}}}{\text{Ai}^4(i\lambda)} \left[1 + O\left(\frac{1}{\gamma^{1/2}}\right) \right] \quad (24.165)$$

Shifting the contour integration $\lambda \rightarrow \lambda - ic$ and assuming c large, we get using (24.351)

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda}{2\pi} \frac{e^{-i\lambda 2\sqrt{\gamma}}}{\text{Ai}^4(i\lambda)} = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda}{2\pi} \frac{e^{-2\sqrt{\gamma}(c+i\lambda)}}{\text{Ai}^4(i\lambda + c)} \simeq_{c \rightarrow \infty} 8\pi \int_{-\infty}^{+\infty} d\lambda (c + i\lambda) e^{-2\sqrt{\gamma}(c+i\lambda) + \frac{8}{3}(c+i\lambda)^{3/2}} \quad (24.166)$$

A saddle-point analysis leads to the choice $c = \frac{\gamma}{4}$ and to the asymptotic behavior

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda}{2\pi} \frac{e^{-i\lambda 2\sqrt{\gamma}}}{\text{Ai}^4(i\lambda)} \simeq_{\gamma \rightarrow +\infty} \pi \sqrt{2\pi} \gamma^{5/4} e^{-\frac{1}{6}\gamma^{3/2}} \quad (24.167)$$

The probability to have only one valley at time t finally behaves for large γ as (24.165)

$$\mathcal{P}(t_{eq} < t) = \Phi(\gamma) \simeq_{\gamma \rightarrow \infty} 1 - \sqrt{\frac{\pi}{2}} \gamma^{3/4} e^{-\frac{3}{2} \gamma^{3/2}} \quad (24.168)$$

Equivalently, this result describes the asymptotic tail of probability distribution $P_{max}(\Gamma)$ over samples of the largest barrier $\Gamma = T \ln t_{eq}$ existing in the system (24.158)

$$P_{max}(\Gamma) = \frac{d}{d\Gamma} \Phi(a\Gamma) \simeq_{\Gamma \rightarrow \infty} \frac{9}{4} a \sqrt{\frac{\pi}{2}} (a\Gamma)^{5/4} e^{-\frac{3}{2} (a\Gamma)^{3/2}} \quad (24.169)$$

Small equilibration times

For small γ , the leading behavior of (24.156) can be found with the change of variable $f = \frac{s^2}{\gamma^2}$ using (24.351)

$$\int_0^{+\infty} df \tilde{\psi}_\gamma(f, \lambda) = \quad (24.170)$$

$$= \int_0^{+\infty} \frac{2s ds}{\gamma^2} \frac{\text{Ai}(\frac{s^2}{\gamma^2} + i\lambda + \gamma)}{\pi \text{Ai}(\frac{s^2}{\gamma^2} + i\lambda) \left[\text{Ai}(\frac{s^2}{\gamma^2} + i\lambda) \text{Bi}(\frac{s^2}{\gamma^2} + i\lambda + \gamma) - \text{Bi}(\frac{s^2}{\gamma^2} + i\lambda) \text{Ai}(\frac{s^2}{\gamma^2} + i\lambda + \gamma) \right]} \quad (24.171)$$

$$\simeq_{\gamma \rightarrow 0} \frac{2}{\gamma^3} \int_0^{+\infty} ds s^2 \frac{e^{-s}}{\sinh s} = \frac{\zeta(3)}{\gamma^3} \quad (24.172)$$

where $\zeta(n)$ is the Riemann zeta function. This leads to the following essential singularity for the short equilibration times

$$\mathcal{P}(t_{eq} < t) = \Phi(\gamma) \simeq_{\gamma \rightarrow 0} e^{-2 \frac{\zeta(3)}{\gamma^3}} \quad (24.173)$$

or equivalently for probability distribution $P_{max}(\Gamma)$ of the largest barrier Γ existing in the system (24.158)

$$P_{max}(\Gamma) = \frac{d}{d\Gamma} \Phi(a\Gamma) \simeq_{\Gamma \rightarrow 0} \frac{6\zeta(3)}{a\Gamma^4} e^{-2 \frac{\zeta(3)}{(a\Gamma)^3}} \quad (24.174)$$

24.6.2 Rare configurations with anomalously large equilibration times

We are now interested into the statistical properties of the configurations that present an anomalously large equilibration time, as described by the tail (24.168) since these configurations are important for the long time dynamics. In the regime $\gamma \gg 1$ under consideration, the leading correction to the one valley event (24.168) that we have computed in the previous section corresponds to the two valleys configurations, because the configurations with three or more valleys are even more unlikely. These configurations correspond to the last non-equilibrium dynamics in the system before it finally equilibrates by going over the largest barrier Γ_{eq} . We can already deduce from the previous section the total probability of the two valleys configurations (24.168)

$$N_\Gamma^{(4)} \simeq_{\Gamma \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{\pi}{2}} (a\Gamma)^{3/4} e^{-\frac{3}{2} (a\Gamma)^{3/2}} \quad (24.175)$$

To characterize the statistical properties of these two valley events, we have the probability measure (24.102)

$$N_{\Gamma}^{(4)}(x_1, F_1, x_2, F_2, x_3) = g_{\Gamma}(-x_1) \tilde{B}_{\Gamma}^{-}(0, F_1, x_2 - x_1) e^{\frac{\mu}{2} x_2 (F_1 - F_2)} \tilde{B}_{\Gamma}^{+}(F_2, 0, x_3 - x_2) g_{\Gamma}(x_3) \quad (24.176)$$

where $x_1 < x_2 < x_3$, x_1 and x_3 are the two local minima separated by the barriers $F_1 \geq \Gamma$ and $F_2 \geq \Gamma$ from the local maximum x_2 . For large Γ , the leading behavior of the blocks $\tilde{B}$ (24.92) can be found using (24.80)

$$K(u, v, p) \simeq_{v \gg u} \frac{\pi}{a} \text{Ai}(au + bp) \text{Bi}(av + bp) \quad (24.177)$$

which yields

$$\tilde{B}_{\Gamma}^{-}(0, F, p) = \tilde{B}_{\Gamma}^{+}(F, 0, p) \simeq_{\Gamma \rightarrow \infty} \frac{a}{\pi \text{Ai}(bp) \text{Bi}(aF + bp)} \quad (24.178)$$

At the same level on approximation, g_{Γ} is given by g_{∞} (24.104), so that we finally get at leading order

$$N_{\Gamma}^{(4)}(x_1, F_1, x_2, F_2, x_3) \simeq_{\Gamma \rightarrow \infty} \frac{e^{\frac{\mu}{2} x_2 (F_1 - F_2)}}{\pi^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda_1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda_2}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda_3}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda_4}{2\pi} \frac{e^{i(\lambda_1 + \lambda_2)x_1 + i(\lambda_3 - \lambda_2)x_2 - i(\lambda_2 + \lambda_3)x_3}}{\text{Ai}(bi\lambda_1) \text{Ai}(b\lambda_2) \text{Bi}(aF_1 + b\lambda_2) \text{Ai}(b\lambda_3) \text{Bi}(aF_2 + b\lambda_3) \text{Ai}(bi\lambda_4)} \quad (24.179)$$

It is shown in Appendix (24.9.5) that after integration over the barriers and the position x_2 of the local maximum, the measure for the two minima (x_1, x_3) has the simple structure

$$M_{\Gamma}^{(4)}(x_1, x_3) \equiv \int_{x_1}^{x_3} dx_2 \int_{\Gamma}^{+\infty} dF_1 \int_{\Gamma}^{+\infty} dF_2 N_{\Gamma}^{(4)}(x_1, F_1, x_2, F_2, x_3) \quad (24.180)$$

$$\simeq_{\Gamma \rightarrow \infty} \frac{a^2}{2\pi(a\Gamma)^{1/2}} e^{-\frac{4}{3}(a\Gamma)^{3/2}} g_{\infty}(-x_1) g_{\infty}^{(2)}(x_1 - x_3 + 2b(a\Gamma)^{1/2}) g_{\infty}(x_3) \quad (24.181)$$

with

$$g_{\infty}^{(2)}(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda}{2\pi} \frac{e^{-i\lambda x}}{a^2 \text{Ai}^2(bi\lambda)} = (g_{\infty} * g_{\infty})(x) \quad (24.182)$$

The total normalization $N^{(4)}$ (24.175) is recovered by integration over (x_1, x_3) with the use of (24.167).

Since all the functions $g_{\infty}(y)$ are centered around $y = 0$, the two-minima measure $M_{\Gamma}^{(4)}(x_1, x_3)$ is concentrated around $(x_1, x_3) = (-x_{\Gamma}, x_{\Gamma})$ with

$$x_{\Gamma} = \frac{\sqrt{a\Gamma}}{2a^2} \quad (24.183)$$

More precisely, a saddle-point analysis leads to the approximation by a product of two Gaussian distributions of broadness

$$\sigma_{\Gamma} = \frac{\sqrt{3}}{2a^2(a\Gamma)^{1/4}} \quad (24.184)$$

as

$$M_{\Gamma}^{(4)}(x_1, x_3) \simeq_{\Gamma \rightarrow \infty} N_{\Gamma}^{(4)} \frac{e^{-\frac{1}{2\sigma_{\Gamma}^2}(x_1+x_{\Gamma})^2}}{2\sqrt{2\pi\sigma_{\Gamma}^2}} \frac{e^{-\frac{1}{2\sigma_{\Gamma}^2}(x_3-x_{\Gamma})^2}}{2\sqrt{2\pi\sigma_{\Gamma}^2}} \quad (24.185)$$

concentrating all the normalization $N_{\Gamma}^{(4)}$ found above (24.175).

The two valleys configurations with an anomalously large barrier $a\Gamma \gg 1$ thus present minima which are anomalously far from the origin when compared to the typical scale of minima (24.77)

$$x_{\min}^{(4)} = \frac{b\sqrt{a\Gamma}}{2} \gg b \quad (24.186)$$

which is necessary with the Brownian scaling to have a barrier of order Γ between them.

24.6.3 Probability density of minima in the renormalized landscape

The probability $V_{\Gamma}(x)$ that the point x is the bottom of a renormalized valley at scale Γ can be decomposed into

$$V_{\Gamma}(x) = V_{\Gamma}^L(x)V_{\Gamma}^R(x) \quad (24.187)$$

where $V_{\Gamma}^R(x)$ represents the constraints on the landscape on the half line $[x, +\infty[$: the potential starting from $U(x)$ has to reach $U(x) + \Gamma$ at an arbitrary position y without any return to $U(x)$, which reads in terms of the Fokker-Planck block (24.71, 24.39) with the use of (24.87, 24.92, 24.79)

$$\begin{aligned} V_{\Gamma}^R(x) &= \int_x^{+\infty} dy B_{\Gamma}^{-}(0, x; \Gamma, y) = \int_x^{+\infty} dy e^{h(0,x)-h(\Gamma,y)} \tilde{B}_{\Gamma}^{-}(0, \Gamma; y-x) \\ &= e^{\frac{\mu^2}{12}x^3} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda}{2\pi} \frac{ae^{-i\lambda x}}{\pi (\text{Ai}(ib\lambda)\text{Bi}(a\Gamma + ib\lambda) - \text{Bi}(ib\lambda)\text{Ai}(a\Gamma + ib\lambda))} \int_x^{+\infty} dy e^{i\lambda y + \frac{\mu}{2}y\Gamma - \frac{\mu^2}{12}y^3} \end{aligned}$$

so that finally in terms of the scaling variables γ (24.150) and $\tilde{x}$ (24.151)

$$V_{\Gamma}^R(x) = \frac{a}{\pi} e^{\frac{1}{3}\tilde{x}^3} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda}{2\pi} \frac{e^{-i\lambda\tilde{x}}}{(\text{Ai}(i\lambda)\text{Bi}(\gamma + i\lambda) - \text{Bi}(i\lambda)\text{Ai}(\gamma + i\lambda))} \int_{\tilde{x}}^{+\infty} d\tilde{y} e^{i\lambda\tilde{y} + \gamma\tilde{y} - \frac{1}{3}\tilde{y}^3}$$

Similarly, for the left half line $] -\infty, x]$, we have by symmetry

$$V_{\Gamma}^L(x) = V_{\Gamma}^R(-x) \quad (24.188)$$

In the limit $\gamma \rightarrow \infty$, we have using (24.177, 24.351) and by evaluating the integral over y by the saddle-point method

$$V_{\Gamma}^R(x) \simeq_{\gamma \rightarrow \infty} \frac{a}{\pi} e^{\frac{1}{3}\tilde{x}^3} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda}{2\pi} \frac{e^{-i\lambda\tilde{x}}}{\text{Ai}(i\lambda)\text{Bi}(\gamma + i\lambda)} \int_{\tilde{x}}^{+\infty} d\tilde{y} e^{i\lambda\tilde{y} + \gamma\tilde{y} - \frac{1}{3}\tilde{y}^3} \quad (24.189)$$

$$\simeq_{\gamma \rightarrow \infty} a e^{\frac{1}{3}\tilde{x}^3} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda}{2\pi} \frac{e^{-i\lambda\tilde{x}}}{\text{Ai}(i\lambda)} = e^{\frac{1}{3}\tilde{x}^3} g_{\infty}(x) \quad (24.190)$$

leading to

$$V_\infty(x) = g_\infty(-x)g_\infty(x) \quad (24.191)$$

as it should to recover the probability distribution of the absolute minimum of the full landscape (24.105).

In the other limit $\gamma \rightarrow 0$, we have using (24.348)

$$V_\Gamma^R(x) \simeq_{\gamma \rightarrow 0} a e^{\frac{1}{3}\tilde{x}^3} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda}{2\pi} \frac{e^{-i\lambda\tilde{x}}}{\left(\gamma + \frac{\gamma^3}{3}i\lambda + \dots\right)} \int_{\tilde{x}}^{+\infty} d\tilde{y} e^{i\lambda\tilde{y} - \frac{1}{3}\tilde{y}^3} (1 + \gamma\tilde{y} + \dots) \quad (24.192)$$

$$\simeq_{\gamma \rightarrow 0} \frac{a}{\gamma} (1 + \gamma\tilde{x}) + O(\gamma) \quad (24.193)$$

and thus, for the points x that are in the region where $\tilde{x}$ remains finite, the probability (24.187) is given by

$$V_\Gamma(x) \simeq_{\gamma \rightarrow 0} \frac{a^2}{\gamma^2} = \frac{1}{\Gamma^2} \quad (24.194)$$

i.e. it represents in this regime as it should the uniform density $1/\Gamma^2$ of minima of the Sinai model [4].

Another quantity of interest is probability that x is the nearest minimum x_{min}^R from the boundary $x_R = +\infty$ in the renormalized landscape at scale Γ

$$W_\Gamma^R(x) = V_\Gamma^L(x)V_\Gamma^R(x, +\infty, +\infty) \quad (24.195)$$

where the constraint on the left half line is the same as before (24.187, 24.188) and where the constraint on the right half-line reads (24.100)

$$V_\Gamma^R(x, \infty, \infty) = \lim_{x_R \rightarrow \infty} \int_{\Gamma}^{+\infty} dF_R E_\Gamma^-(0, x; F_R, x_R) = e^{\frac{\mu^2}{12}x^3} g_\Gamma(x) \quad (24.196)$$

or in terms of the rescaled variables using (24.100, 24.157)

$$V_\Gamma^R(x, \infty, \infty) = a e^{\frac{1}{3}\tilde{x}^3} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda}{2\pi} e^{-i\lambda\tilde{x}} \frac{1}{\text{Ai}(i\lambda)} e^{-\int_0^{+\infty} d\tilde{f} \tilde{\psi}_\gamma(\tilde{f}, \lambda)} \quad (24.197)$$

Of course, in the regime $\gamma \rightarrow \infty$, the distribution (24.195) of x_{min}^R is the same as the distribution of the absolute minimum (24.191). In the other limit $\gamma \rightarrow 0$, we expect that x_{min}^R is much bigger than the scale b (24.77) of the absolute minimum. In this regime, its position will not be governed by the constraint on right landscape $V_\Gamma^R(x, \infty, \infty)$, which is easy to satisfy in this region, but by the constraint on the left landscape, which behaves in this regime as (24.193)

$$V_\Gamma^L(x) = V_\Gamma^R(-x) \simeq_{\gamma \rightarrow 0} \frac{a}{\gamma} (1 - \gamma\tilde{x}) + O(\gamma) \quad (24.198)$$

We thus expect that $\tilde{x}_{min}^R$ scales as $1/\gamma$, i.e.

$$x_{min}^R \propto_{\gamma \rightarrow 0} \frac{b}{\gamma} \quad (24.199)$$

As a consequence, the total number n of minima is the renormalized landscape at scale Γ can be roughly estimated in this regime by dividing the effective region (24.199) by the typical distance Γ^2 (24.194) between two minima

$$n^{typ}(\gamma) \propto_{\gamma \rightarrow 0} \frac{1}{\gamma^3} \quad (24.200)$$

This estimation is coherent with the behavior found in (24.173). Of course, an exact calculation of the distribution of the number n of minima of the renormalized landscape could in principle be done from (24.102)

$$Z_{free} = 1 = \sum_{n=1}^{+\infty} N_{\Gamma}^{(2n+2)} \quad (24.201)$$

where N_{Γ}^{2n+2} represents the total normalization of the renormalized landscapes containing exactly n local minima. We have considered previously $N_{\Gamma}^{(2)}$ (24.155) corresponding to a single minimum, and $N_{\Gamma}^{(4)}$ (24.175) corresponding to two minima, but unfortunately, the multiple integrals over the barriers F and positions x needed in (24.102) become rapidly intractable for arbitrary n and arbitrary γ .

24.7 Diffusion front

As explained at the beginning of the Section 24.6, the long-time dynamics is determined by the properties of the renormalized landscape $\Gamma = T \ln t$, and the results obtained will be valid in the double limit $t \rightarrow \infty$ and $\mu \rightarrow 0$ in terms of the scaling variables γ (24.150) and $\tilde{x}$ (24.151). As in the Sinai model [4], the average over the disorder of the diffusion front $\overline{P(x, t|x_0, 0)}$ is given by the probability that x is the minimum of a renormalized valley at scale Γ that contains the initial position x_0 .

Let us first consider the case $x < x_0$. The constraint for the left half-line $] -\infty, x]$ is simply given by $V_L(x) = V_R(-x)$ (24.187, 24.188). The constraint for the landscape on the right half line is now that x should be the starting point of a renormalized bond of arbitrary barrier $F \geq \Gamma$ and of length l satisfying $x + l > x_0$. We thus have

$$\theta(x_0 - x) \overline{P(x, t|x_0, 0)} = V_{\Gamma}^L(x) \left(V_{\Gamma}^R(x, +\infty, +\infty) + \int_{\Gamma}^{+\infty} dF \int_{x_0 - x}^{+\infty} dl V_R(x, F, l) \right) \quad (24.202)$$

where V_{Γ}^R represents the constraints on the landscape on the half line $[x, +\infty[$: the point x should either be the first minimum on the right of the renormalized landscape (24.196) or it should be the starting point of a finite ascending renormalized bond of barrier F and length l , followed by an arbitrary descending bond, i.e. in terms of the Fokker-Planck block (24.71, 24.87)

$$V_{\Gamma}^R(x, F, l) = B_{\Gamma}^{-}(0, x; F, x + l) \int_{x+l}^{+\infty} dy B_{\Gamma}^{+}(F, x + l; F - \Gamma, y) \quad (24.203)$$

$$= B_{\Gamma}^{-}(0, x; F, x + l) \int_{x+l}^{+\infty} dy B_{\Gamma}^{+}(\Gamma, x + l; 0, y) \quad (24.204)$$

Using the explicit expressions (24.39,24.92,24.79), we have

$$V_{\Gamma}^R(x, F, l) = \frac{a^2}{\pi^2} e^{\frac{\mu^2}{12}x^3 + \frac{\mu}{2}(F-\Gamma)(x+l)} \quad (24.205)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda_1}{2\pi} \frac{e^{i\lambda_1 l + \int_0^{F-\Gamma} dv a \left(\frac{Ai'(av+bi\lambda_1)Bi(a(v+\Gamma)+bi\lambda_1) - Bi'(av+bi\lambda_1)Ai(a(v+\Gamma)+bi\lambda_1)}{Ai(av+bi\lambda_1)Bi(a(v+\Gamma)+bi\lambda_1) - Bi(av+bi\lambda_1)Ai(a(v+\Gamma)+bi\lambda_1)} \right)}}{(Ai(a(F-\Gamma)+bi\lambda_1)Bi(aF+bi\lambda_1) - Bi(a(F-\Gamma)+bi\lambda_1)Ai(aF+bi\lambda_1))} \quad (24.206)$$

$$\int_{x+l}^{+\infty} dy e^{-\frac{\mu^2}{12}y^3} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda_2}{2\pi} \frac{e^{i\lambda_2(y-x-l)}}{(Ai(bp)Bi(a\Gamma+bi\lambda_2) - Bi(bp)Ai(a\Gamma+bi\lambda_2))} \quad (24.207)$$

so that in terms of the scaling variables γ (24.150) and $\tilde{x}$ (24.151), the integral needed in (24.202) reads

$$\int_{\Gamma}^{+\infty} dF \int_{x_0-x}^{+\infty} dl V_R(x, F, l) = \int_{\gamma}^{+\infty} \frac{df}{a} \int_{\tilde{x}_0-\tilde{x}}^{+\infty} b d\tilde{l} V_{\Gamma}^R(x = b\tilde{x}, F = \frac{f}{a}, l = b\tilde{l}) \quad (24.208)$$

$$= \frac{a}{\pi^2} e^{\frac{1}{3}\tilde{x}^3} \int_{\gamma}^{+\infty} df \int_{\tilde{x}_0-\tilde{x}}^{+\infty} d\tilde{l} e^{(f-\gamma)(\tilde{x}+\tilde{l})} \quad (24.209)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda_1}{2\pi} \frac{e^{i\lambda_1 \tilde{l} + \int_0^{f-\gamma} dw \left(\frac{Ai'(w+i\lambda_1)Bi(w+\gamma+i\lambda_1) - Bi'(w+i\lambda_1)Ai(w+\gamma+i\lambda_1)}{Ai(w+i\lambda_1)Bi(w+\gamma+i\lambda_1) - Bi(w+i\lambda_1)Ai(w+\gamma+i\lambda_1)} \right)}}{(Ai(f-\gamma+i\lambda_1)Bi(f+i\lambda_1) - Bi(f-\gamma+i\lambda_1)Ai(f+i\lambda_1))} \quad (24.210)$$

$$\int_{\tilde{x}+\tilde{l}}^{+\infty} d\tilde{y} e^{-\frac{1}{3}\tilde{y}^3} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda_2}{2\pi} \frac{e^{i\lambda_2(\tilde{y}-\tilde{x}-\tilde{l})}}{(Ai(i\lambda_2)Bi(\gamma+i\lambda_2) - Bi(i\lambda_2)Ai(\gamma+i\lambda_2))} \quad (24.211)$$

In the limit $\gamma \rightarrow \infty$, the term (24.196) dominates and the diffusion front converges as it should towards the distribution of the absolute minimum for x and doesn't depend anymore on the initial position x_0

$$\overline{P(x, t|x_0, 0)} \simeq_{\gamma \rightarrow \infty} g_{\infty}(-x)g_{\infty}(-x) \quad (24.212)$$

In the other limit $\gamma \rightarrow 0$, the term (24.196) is negligible, and the typical length associated to the dynamics is Γ^2 (24.194). The diffusion front is expected to become in this regime a function of the scaling variable (24.152)

$$(\Delta X)_{Sinai} = \frac{x_0 - x}{\Gamma^2} = \frac{\tilde{x}_0 - \tilde{x}}{\gamma^2} \quad (24.213)$$

The contribution of finite barriers (24.211) indeed becomes with the appropriate changes of variables $\tilde{l} = \gamma^2 l$, $\lambda_1 = \frac{\lambda}{\gamma^2}$, $f = \gamma(1 + \eta)$

$$\int_{\Gamma}^{+\infty} dF \int_{x_0-x}^{+\infty} dl V_R(x, F, l) \simeq_{\gamma \rightarrow 0} \frac{a}{\pi} e^{\frac{1}{3}\tilde{x}^3} \int_0^{+\infty} d\eta \int_{\frac{\tilde{x}_0-\tilde{x}}{\gamma^2}}^{+\infty} dl e^{\gamma\eta(\tilde{x}+\gamma^2 l)} \quad (24.214)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda}{2\pi} \frac{e^{i\lambda l + \int_0^{\eta} \gamma dv \left(\frac{Ai'(\gamma v + i\frac{\lambda}{\gamma^2})Bi(\gamma v + \gamma + i\frac{\lambda}{\gamma^2}) - Bi'(\gamma v + i\frac{\lambda}{\gamma^2})Ai(\gamma v + \gamma + i\frac{\lambda}{\gamma^2})}{Ai(\gamma v + i\frac{\lambda}{\gamma^2})Bi(\gamma v + \gamma + i\frac{\lambda}{\gamma^2}) - Bi(\gamma v + i\frac{\lambda}{\gamma^2})Ai(\gamma v + \gamma + i\frac{\lambda}{\gamma^2})} \right)}}{\left(Ai(\gamma\eta + i\frac{\lambda}{\gamma^2})Bi(\gamma(1+\eta) + i\frac{\lambda}{\gamma^2}) - Bi(\gamma\eta + i\frac{\lambda}{\gamma^2})Ai(\gamma(1+\eta) + i\frac{\lambda}{\gamma^2}) \right)} e^{-\frac{1}{3}(\tilde{x}+\gamma^2 l)^3} \quad (24.215)$$

$$\simeq_{\gamma \rightarrow 0} \frac{a}{\gamma} \int_0^{+\infty} d\eta \int_{\frac{\tilde{x}_0-\tilde{x}}{\gamma^2}}^{+\infty} dl P^*(\eta, l) \quad (24.216)$$

where we have recognized the joint distribution of rescaled barrier η and rescaled length l of the Brownian landscape [4]

$$P^*(\eta, l) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda}{2\pi} \frac{(i\lambda)^{1/2}}{\sinh(i\lambda)^{1/2}} e^{i\lambda l - \eta(i\lambda)^{1/2} \coth((i\lambda)^{1/2})} \quad (24.217)$$

The diffusion front has thus for Laplace transform in this regime

$$\int_x^{+\infty} dx_0 e^{-p(x_0-x)} \overline{P(x, t|x_0, 0)} \simeq_{\gamma \rightarrow 0} \int_0^{+\infty} dy e^{-p\Gamma^2 y} \int_0^{+\infty} dl \int_0^{+\infty} d\eta P^*(\eta, l) \frac{1 - e^{-p\Gamma^2 l}}{p\Gamma^2} = \frac{1}{\Gamma^2 p} (1 - \cosh \Gamma \sqrt{p})$$

which is exactly the Laplace transform of the Kesten distribution for the Sinai model [4].

The diffusion front for $x_0 < x$ can be obtained from the symmetry $x \rightarrow -x$

$$\begin{aligned} \theta(x - x_0) \overline{P(x, t|x_0, 0)} &= \left(V_{\Gamma}^L(x, +\infty, +\infty) + \int_{\Gamma}^{+\infty} dF \int_{x-x_0}^{+\infty} dl V_L(x, F, l) \right) V_{\Gamma}^R(x) \\ &= \left(V_{\Gamma}^R(-x, +\infty, +\infty) + \int_{\Gamma}^{+\infty} dF \int_{x-x_0}^{+\infty} dl V_R(-x, F, l) \right) V_{\Gamma}^R(x) \end{aligned}$$

24.8 Results for stationary landscapes

In this section, we discuss the case of the stationary landscapes defined by (24.21) which belong to the class of solvable models with our method as discussed in Section (24.3.1).

24.8.1 Explicit expressions for the blocks

We have seen in (24.41) how the functional integrals for the process $dU/dx = -dW[U]/dU + \eta(x)$ could be recast into a functional integral of the Schrodinger-type *up to boundary terms*. The Fokker-Planck blocks read (24.41)

$$B_{\Gamma}^{\pm}(u_0, x_0, u_1, x_1) = e^{-\frac{1}{2}(W[u_1] - W[u_0])} \tilde{B}_{\Gamma}^{\pm}(u_0, x_0, u_1, x_1) \quad (24.218)$$

$$E_{\Gamma}^{\pm}(u_0, x_0, u_1, x_1) = e^{-\frac{1}{2}(W[u_1] - W[u_0])} \tilde{E}_{\Gamma}^{\pm}(u_0, x_0, u_1, x_1) \quad (24.219)$$

in terms of the Schrodinger blocks $\tilde{B}$ and $\tilde{E}$ given in Laplace transform by

$$\tilde{B}_\Gamma^-(u_0, u, p) = \tilde{B}_\Gamma^+(u, u_0, p) = \frac{1}{K(u - \Gamma, u, p)} \exp\left(\int_{u_0}^{u-\Gamma} dv \partial_1 \ln K(v, v + \Gamma, p)\right) \quad (24.220)$$

$$\tilde{E}_\Gamma^-(u, u_b, p) = \tilde{E}_\Gamma^+(u_b, u, p) = \exp\left(\int_u^{u_b} dv \partial_1 \ln K(v, v + \Gamma, p)\right) \quad (24.221)$$

The function K (24.54) now corresponds to the problem with the Schrodinger potential $V[U] = -\frac{1}{2}W''[U] + \frac{1}{4}W'[U]^2$.

For the special case $p = 0$, two independent solutions of the Schrodinger equation are then known for an arbitrary potential $W[U]$

$$\phi_1(u) = e^{-\frac{1}{2}W(u)} \quad (24.222)$$

$$\phi_2(u) = e^{-\frac{1}{2}W(u)} \int_0^u e^{W(u')} du' \quad (24.223)$$

of wronskian $w = 1$ and thus the function K (24.54) simply reads:

$$K(u, v, p = 0) = e^{-\frac{1}{2}(W(u)+W(v))} \int_u^v e^{W(u')} du' \quad (24.224)$$

The Schrodinger blocks of the measure read (24.221)

$$\tilde{B}_\Gamma^-(u_0, u, p = 0) = \tilde{B}_\Gamma^+(u, u_0, p = 0) = \frac{e^{\frac{W(u_0)}{2} + \frac{W(u)}{2}}}{\int_{u-\Gamma}^u e^{W(u')} du'} e^{-\int_{u_0}^{u-\Gamma} \frac{dv}{\int_v^{v+\Gamma} e^{W(u')-W(v)} du'}} \quad (24.225)$$

$$\tilde{E}_\Gamma^+(u_b, u, p = 0) = \tilde{E}_\Gamma^-(u, u_b, p = 0) = e^{\frac{W(u)}{2} - \frac{W(u_b)}{2} - \int_u^{u_b} \frac{dv}{\int_v^{v+\Gamma} e^{W(u')-W(v)} du'}} \quad (24.226)$$

so that finally the blocks for the full measure (24.219) read in terms of the arbitrary potential $W(u)$

$$B_\Gamma^-(u_0, u, p = 0) = \frac{e^{W(u_0)}}{\int_{u-\Gamma}^u e^{W(u')} du'} e^{-\int_{u_0}^{u-\Gamma} \frac{dv}{\int_v^{v+\Gamma} e^{W(u')-W(v)} du'}} \quad (24.227)$$

$$B_\Gamma^+(u, u_0, p = 0) = \frac{e^{W(u)}}{\int_{u-\Gamma}^u e^{W(u')} du'} e^{-\int_{u_0}^{u-\Gamma} \frac{dv}{\int_v^{v+\Gamma} e^{W(u')-W(v)} du'}} \quad (24.228)$$

$$\tilde{E}_\Gamma^-(u, u_b, p = 0) = e^{W(u) - W(u_b) - \int_u^{u_b} \frac{dv}{\int_v^{v+\Gamma} e^{W(u')-W(v)} du'}} \quad (24.229)$$

$$\tilde{E}_\Gamma^+(u_b, u, p = 0) = e^{-\int_u^{u_b} \frac{dv}{\int_v^{v+\Gamma} e^{W(u')-W(v)} du'}} \quad (24.230)$$

These expressions for the Laplace variable $p = 0$ describe the properties of the extrema in the energy u of the landscape after integration over the positions variables x .

24.8.2 Normalization of the full measure

The normalization for left and right reflecting boundaries, corresponding to $u(x_L) = u_L$ and $u(x_R) = u_R$ with $u(x_L^-) = +\infty$ and $u(x_R^+) = +\infty$, is given by (24.36)

$$Z(u_L, x_L; u_R, x_R) = \int_{u(x_L)=u_L}^{u(x_R)=u_R} DU \exp\left(-\int_{x_L}^{x_R} dx \left(\frac{dU}{dx} - F[U]\right)^2 + \frac{1}{2}F'[U]\right) \quad (24.231)$$

and the decomposition into blocks at scale Γ reads (24.30)

$$Z(u_L, x_L, u_R, x_R) = \sum_{n=1}^{+\infty} \int \prod_{i=1}^{2n-1} du_i dx_i \quad E_{\Gamma}^{+}(u_L, x_L; u_1, x_1) B_{\Gamma}^{-}(u_1, x_1; u_2, x_2) \dots \quad (24.232)$$

$$\dots B_{\Gamma}^{+}(u_{2n-2}, x_{2n-2}; u_{2n-1}, x_{2n-1}) E_{\Gamma}^{-}(u_{2n-1}, x_{2n-1}; u_R, x_R) \quad (24.233)$$

$$= e^{-\frac{1}{2}(W[U(x_R)] - W[U(x_L)])} \sum_{n=1}^{+\infty} \int \prod_{i=1}^{2n-1} du_i dx_i \quad \tilde{E}_{\Gamma}^{+}(u_L, u_1, x_1 - x_L) \tilde{B}_{\Gamma}^{-}(u_1, u_2, x_2 - x_1) \dots \quad (24.234)$$

$$\tilde{B}_{\Gamma}^{+}(u_{2n-2}, u_{2n-1}, x_{2n-1} - x_{2n-2}) \tilde{E}_{\Gamma}^{-}(u_{2n-1}, u_R, x_R - x_{2n-1}) \quad (24.235)$$

24.8.3 Example: Brownian landscape with drift

We rewrite the general expressions for the particular case $W(u) = fu$ corresponding to the Schrodinger potential

$$V(u) = f^2/4 = \delta^2 \quad (24.236)$$

where we have introduced the notation $\delta = f/2$ to compare more straightforwardly with the papers [12]. The functions $\phi_1(u, p)$ and $\phi_2(u, p)$ introduced in (24.54) and their wronskian $w(p)$ read

$$\phi_1(u) = e^{-u\sqrt{p+\delta^2}} \quad (24.237)$$

$$\phi_2(u) = e^{u\sqrt{p+\delta^2}} \quad (24.238)$$

$$w(p) = 2\sqrt{p+\delta^2} \quad (24.239)$$

Thus the function K introduced in (24.54) reads

$$K(u, v, p) = \frac{1}{\sqrt{p+\delta^2}} \sinh((v-u)\sqrt{p+\delta^2}) \quad (24.240)$$

This leads to the expressions

$$B_{\Gamma}^{-}(u_1, u_2, p) = e^{-\delta(u_2-u_1)} \frac{\sqrt{p+\delta^2}}{\sinh(\Gamma\sqrt{p+\delta^2})} \exp(-(u_2-u_1-\Gamma)\sqrt{p+\delta^2} \coth(\Gamma\sqrt{p+\delta^2}))$$

$$= e^{-\Gamma\delta} \frac{\sqrt{p+\delta^2}}{\sinh(\Gamma\sqrt{p+\delta^2})} \exp(-(u_2-u_1-\Gamma)(\delta + \sqrt{p+\delta^2} \coth(\Gamma\sqrt{p+\delta^2})))$$

$$B_{\Gamma}^{+}(u_1, u_2, p) = e^{-\delta(u_2-u_1)} \frac{\sqrt{p+\delta^2}}{\sinh(\Gamma\sqrt{p+\delta^2})} \exp(-(u_1-u_2-\Gamma)\sqrt{p+\delta^2} \coth(\Gamma\sqrt{p+\delta^2}))$$

$$= e^{\Gamma\delta} \frac{\sqrt{p+\delta^2}}{\sinh(\Gamma\sqrt{p+\delta^2})} \exp(-(u_1-u_2-\Gamma)(-\delta + \sqrt{p+\delta^2} \coth(\Gamma\sqrt{p+\delta^2})))$$

$$E_{\Gamma}^{+}(u_L, u) = \exp(-(u_L-u)(-\delta + \sqrt{p+\delta^2} \coth(\Gamma\sqrt{p+\delta^2})))$$

$$E_{\Gamma}^{-}(u, u_R) = \exp(-(u_R-u)(\delta + \sqrt{p+\delta^2} \coth(\Gamma\sqrt{p+\delta^2})))$$

in agreement with [12]. We thus recover simply and from a more general perspective the RSRG fixed-point for the pure Brownian landscape [12, 4].

24.8.4 Some further examples

One can study cases where the potential $W(u)$ (24.21) is a simple power law $W(u) = ru^\gamma$. This corresponds to the Schrodinger potential (24.42)

$$V(U) = -\frac{r\gamma(\gamma-1)}{2}u^{\gamma-2} + \frac{r^2\gamma^2}{4}u^{2(\gamma-1)} \quad (24.241)$$

which a priori contains two power-laws. Apart from the case $\gamma = 1$ corresponding to the biased Brownian motion discussed above (24.236), there are two other simple cases $\gamma = 2$ and $\gamma = 0$, which we now briefly comment on.

Landscape produced by a Brownian particle in a parabolic well

The parabolic potential $W(u) = ru^2$ corresponds to the quadratic Schrodinger potential

$$V(u) = -r + r^2u^2 \quad (24.242)$$

The functions $\phi_1(u, p)$ and $\phi_2(u, p)$ introduced in (24.54) and their wronskian $w(p)$ read

$$\phi_1(u, p) = e^{-\frac{r}{2}u^2} \sqrt{ru} U\left(\frac{1}{2} + \frac{p}{4r}, \frac{3}{2}, ru^2\right) \quad (24.243)$$

$$\phi_2(u, p) = e^{-\frac{r}{2}u^2} u M\left(\frac{1}{2} + \frac{p}{4r}, \frac{3}{2}, ru^2\right) \quad (24.244)$$

$$w(p) = \frac{\sqrt{\pi}}{\Gamma\left(\frac{1}{2} + \frac{p}{4r}\right)} \quad (24.245)$$

where $U(a, b, z)$ and $M(a, b, z)$ are the confluent hypergeometric functions. In particular for $p = 0$, we have $U(\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, z) = 1/\sqrt{z}$ and (24.223) yields

$$\phi_1(u, p = 0) = e^{-\frac{r}{2}u^2} = e^{-\frac{1}{2}W(u)} \quad (24.246)$$

$$\phi_2(u, p = 0) = e^{-\frac{r}{2}u^2} \int_0^u du' e^{ru'^2} \quad (24.247)$$

$$w(p = 0) = 1 \quad (24.248)$$

$$K(u, v, p = 0) = e^{-\frac{r}{2}(u^2+v^2)} \int_u^v du' e^{ru'^2} \quad (24.249)$$

The above expressions allow to obtain the full joint distribution of wide excursions (extrema) of the trajectory $U(x)$ of a Brownian particle in a quadratic well, but we will not explore these results further here since this goes beyond the scope of this paper.

Landscape produced by a Brownian particle in a logarithmic well

We now consider the logarithmic potential $W(u) = -r \ln u$ for $u \in]0, +\infty[$ corresponding to the Schrodinger potential

$$V(u) = \left(-\frac{r}{2} + \frac{r^2}{4}\right) \frac{1}{u^2} \quad (24.250)$$

The functions $\phi_1(u, p)$ and $\phi_2(u, p)$ introduced in (24.54) and their wronskian $w(p)$ read

$$\phi_1(u, p) = \sqrt{u} K_{\frac{1-r}{2}}(\sqrt{p}u) \quad (24.251)$$

$$\phi_2(u, p) = \sqrt{u} I_{\frac{1-r}{2}}(\sqrt{p}u) \quad (24.252)$$

$$w(p) = 1 \quad (24.253)$$

where $K_\nu(z)$ and $I_\nu(z)$ are the Bessel functions. For the special case $p = 0$, (24.223) yields for the function K

$$K(u, v, p = 0) = e^{-\frac{1}{2}(W(u)+W(v))} \int_u^v e^{W(u')} du' = \frac{1}{1-r} \left[u^{r/2} v^{1-r/2} - u^{1-r/2} v^{r/2} \right] \quad (24.254)$$

24.8.5 An example with a long-ranged constraint: Positive Brownian landscape

As an example of long-ranged constraint, we consider the process $U(x) = |V(x)|$ where $V(x)$ is a pure Brownian, i.e. $U(x)$ is constrained to remain positive by a reflecting wall at $U = 0$. For fixed boundary conditions (u_L, x_L) and (u_R, x_R) , the total normalization reads

$$Z(u_L, x_L; u_R, x_R) = \frac{1}{\sqrt{4\pi(x_R - x_L)}} \left(e^{-\frac{(u_R - u_L)^2}{4(x_R - x_L)}} + e^{-\frac{(u_R + u_L)^2}{4(x_R - x_L)}} \right) \quad (24.255)$$

In Laplace transform with respect to the length $(x_R - x_L)$, this leads to

$$Z(u_L, u_R; p) = \int_{x_L}^{+\infty} dx_R e^{-p(x_R - x_L)} Z(u_L, x_L; u_R, x_R) = \frac{1}{2\sqrt{p}} \left(e^{-\sqrt{p}|u_R - u_L|} + e^{-\sqrt{p}(u_R + u_L)} \right) \quad (24.256)$$

We again consider the convention $U(x_R^-) = U(x_L^+) = +\infty$ to define the renormalization procedure. The decomposition of the renormalized landscape at scale Γ can then be written as

$$Z(u_L, u_R; p) = \sum_{n=1}^{+\infty} \int_{u_i > 0} E_\Gamma^+(u_L, u_1; p) B_\Gamma^-(u_1, u_2; p) \dots E_\Gamma^-(u_{2n-1}, u_R; p) \quad (24.257)$$

$$+ E_\Gamma^+(u_L, 0; p) G_\Gamma(0, 0; p) E_\Gamma^-(0, u_R; p) \quad (24.258)$$

$$+ E_\Gamma^+(u_L, 0; p) G_\Gamma(0, 0; p) \left(\sum_{n=1}^{+\infty} \int_{u_i > 0} B_\Gamma^-(0, u_1; p) B_\Gamma^+(u_1, u_2; p) \dots B_\Gamma^+(u_{2n-1}, 0; p) \right) \quad (24.259)$$

$$\cdot G_\Gamma(0, 0; p) E_\Gamma^-(0, u_R; p) + \dots \quad (24.260)$$

where the blocks (B, E) represents the ‘bulk’ blocks and are thus identical to the blocks for the pure Brownian motion (24.241) for $\delta = 0$

$$B_\Gamma^-(u_1, u_2; p) = B_\Gamma^+(u_2, u_1; p) = \theta((u_2 - u_1) - \Gamma) \frac{\sqrt{p}}{\sinh(\Gamma\sqrt{p})} e^{-((u_2 - u_1) - \Gamma)\sqrt{p} \coth(\Gamma\sqrt{p})} \quad (24.261)$$

$$E_\Gamma^-(u, u_b; p) = E_\Gamma^+(u_b, u; p) = \theta(u_b - u) e^{-(u_b - u)\sqrt{p} \coth(\Gamma\sqrt{p})} \quad (24.262)$$

and where the notation $G_\Gamma(u_1, u_2, p)$ represents the measure of the Brownian paths that remain in $[0, \Gamma]$ between u_1 and u_2 . Since $U(x) = |V(x)|$, this is equivalent to asking that the unconstrained Brownian $V(x')$ remains in the interval $] -\Gamma, \Gamma[$, and goes from u_1 to $(+u_2)$ or to $(-u_2)$. With the notations of (24.289, 24.302), its Laplace transform reads

$$G_\Gamma(u_1, u_2, p) = F_{[u_a = -\Gamma, u_b = \Gamma]}(u_1, u_2, p) + F_{[u_a = -\Gamma, u_b = -\Gamma]}(u_1, -u_2, p) \quad (24.263)$$

$$= \frac{K(-\Gamma, \min(u_1, u_2)) K(\max(u_1, u_2), \Gamma)}{K(-\Gamma, \Gamma)} + \frac{K(-\Gamma, -u_2) K(u_1, \Gamma)}{K(-\Gamma, \Gamma)} \quad (24.264)$$

with the function K given by $K(u, v, p) = \frac{1}{\sqrt{p}} \sinh((v - u)\sqrt{p})$ (24.240). Here we only need the case $u_1 = 0 = u_2$

$$G_\Gamma(0, 0, p) = \frac{\tanh(\Gamma\sqrt{p})}{\sqrt{p}} \quad (24.265)$$

This expression may also be found by solving the RSRG equation

$$\partial_\Gamma G_\Gamma(0, 0; p) = G_\Gamma(0, 0; p) B_\Gamma(0, \Gamma, p) B_\Gamma(\Gamma, 0, p) G_\Gamma(0, 0; p) = G_\Gamma^2(0, 0; p) \frac{p}{\sinh^2 \Gamma \sqrt{p}} \quad (24.266)$$

In the limit of $\Gamma \rightarrow \infty$, the decomposition (24.260) becomes

$$\begin{aligned} Z(u_L, u_R; p) &= \int_0^{\min(u_L, u_R)} du E_\infty^+(u_L, u; p) E_\infty^-(u, u_R; p) + E_\infty^+(u_L, 0; p) G_\infty(0, 0; p) E_\infty^-(0, u_R; p) \\ &= \int_0^{\min(u_L, u_R)} du e^{-(u_L - u)\sqrt{p}} e^{-(u_R - u)\sqrt{p}} + e^{-u_L\sqrt{p}} \frac{1}{\sqrt{p}} e^{-u_R\sqrt{p}} \end{aligned} \quad (24.268)$$

which coincides with (24.256) as it should.

24.9 Appendixes

24.9.1 Explicit construction of the measure for renormalized landscape

This Appendix is dedicated to the precise definitions and properties of the joint probabilities of extrema introduced in Section 24.2.

Initial landscape

The joint probabilities defined in Section 24.2.1 are precisely defined as follows in terms of the initial landscape measure (24.24)

$$N_{\text{init}}^{(2n)}(x_L, u_L; u_1, x_1; \dots u_{2n-1}, x_{2n-1}; x_R, u_R) = \int D\mathcal{U} \mathcal{P}[U] \prod_{j=1}^{2n-1} \delta(U_{x_j} - u_j) \quad (24.269)$$

$$\prod_{i=1}^{x_1-1} \theta(U_i - U_{i+1}) \prod_{i=x_1}^{x_2-1} \theta(U_{i+1} - U_i) \prod_{i=x_2}^{x_3-1} \theta(U_i - U_{i+1}) \dots \prod_{i=x_{2n-1}}^{N-1} \theta(U_{i+1} - U_i) \quad (24.270)$$

The normalization (24.26) can be checked by inserting the identity

$$1 = \prod_{i=1}^{N-1} (\theta(U_{i+1} - U_i) + \theta(U_i - U_{i+1})) \quad (24.271)$$

$$\begin{aligned} &= \sum_{n=1}^K \sum_{1 \leq x_1 < x_2 < x_3 < \dots < x_{2n-2} < x_{2n-1} \leq N} \prod_{i=1}^{x_1-1} \theta(U_i - U_{i+1}) \prod_{i=x_1}^{x_2-1} \theta(U_{i+1} - U_i) \\ &\quad \prod_{i=x_2}^{x_3-1} \theta(U_i - U_{i+1}) \dots \prod_{i=x_{2n-1}}^{N-1} \theta(U_{i+1} - U_i) \end{aligned} \quad (24.272)$$

(with $K = (N + 1)/2$, N is odd) into the initial measure (24.25).

Renormalized landscape

To define explicitly the measure of renormalized landscapes defined in Section 24.2.2, it is convenient to introduce the following notation for an ascending bond with $x_1 < x_2$

$$\Theta_{\Gamma}^{-}(x_1, x_2; U) = \prod_{i=x_1}^{x_2-1} \prod_{j=i+1}^{x_2} \theta(\Gamma - U_i + U_j) \theta(U_j - U_{x_1}) \theta(U_{x_2} - U_i) \quad (24.273)$$

when $U_{x_2} - U_{x_1} \geq \Gamma$ and 0 otherwise. It expresses that U_{x_1} is the minimum potential over the segment $[x_1, x_2]$, U_{x_2} is the maximum and all descending barriers in the segment with $i < j$ satisfy $U_i - U_j < \Gamma$. Similarly, for a descending bond one defines

$$\Theta_{\Gamma}^{+}(x_1, x_2; U) = \prod_{i=x_1}^{x_2-1} \prod_{j=i+1}^{x_2} \theta(\Gamma - U_j + U_i) \theta(U_{x_1} - U_j) \theta(U_i - U_{x_2}) \quad (24.274)$$

when $U_{x_1} - U_{x_2} \geq \Gamma$ and 0 otherwise. For $\Gamma = 0$ we recover the extrema of the initial landscape

$$\Theta_{\Gamma=0}^{-}(x_1, x_2; U) = \prod_{i=x_1}^{x_2-1} \theta(U_{i+1} - U_i) \quad (24.275)$$

$$\Theta_{\Gamma=0}^{+}(x_1, x_2; U) = \prod_{i=x_1}^{x_2-1} \theta(U_i - U_{i+1}) \quad (24.276)$$

As a technicality, to treat the edges we must also introduce

$$\tilde{\Theta}_{\Gamma}^{+}(x_1, x_2; U) = \prod_{i=x_1}^{x_2-1} \prod_{j=i+1}^{x_2} \theta(\Gamma - U_j + U_i) \theta(U_i - U_{x_2}) \quad (24.277)$$

$$\tilde{\Theta}_{\Gamma}^{-}(x_1, x_2; U) = \prod_{i=x_1}^{x_2-1} \prod_{j=i+1}^{x_2} \theta(\Gamma - U_i + U_j) \theta(U_j - U_{x_1}) \quad (24.278)$$

with no other constraints, since outside the edge sites the potential is at $+\infty$. We may now express the probabilities of renormalized landscape in terms of the initial landscape as

$$N_{\Gamma}(x_L, u_L; u_1, x_1; \dots u_{2n-1}, x_{2n-1}; x_R, u_R) = \int DU \mathcal{P}[U] \prod_{j=1}^{2n-1} \delta(U_{x_j} - u_j) \quad (24.279)$$

$$\tilde{\Theta}_{\Gamma}^{+}(1, x_1; U) \Theta_{\Gamma}^{-}(x_1, x_2; U) \Theta_{\Gamma}^{+}(x_2, x_3; U) \dots \Theta_{\Gamma}^{+}(x_{2n-2}, x_{2n-1}; U) \tilde{\Theta}_{\Gamma}^{-}(x_{2n-1}, N; U) \quad (24.280)$$

The normalization (24.27) can be checked by using the following identity for any Γ

$$1 = \sum_{n=1}^K \sum_{1 \leq x_1 < x_2 \dots < x_{2n-1} \leq N} \tilde{\Theta}_{\Gamma}^{+}(1, x_1; U) \Theta_{\Gamma}^{-}(x_1, x_2; U) \Theta_{\Gamma}^{+}(x_2, x_3; U) \dots \Theta_{\Gamma}^{+}(x_{2n-2}, x_{2n-1}; U) \tilde{\Theta}_{\Gamma}^{-}(x_{2n-1}, N; U) \quad (24.281)$$

When Γ is varied, the following important property of renormalization

$$\partial_{\Gamma} \Theta_{\Gamma}^{-}(x_1, x_2; U) = \sum_{y_1=x_1+1}^{x_2-1} \sum_{y_2=y_1+1}^{x_2-1} \Theta_{\Gamma}^{-}(x_1, y_1; U) \Theta_{\Gamma}^{+}(y_1, y_2; U) \delta(U_{y_1} - U_{y_2} - \Gamma) \Theta_{\Gamma}^{-}(y_2, x_2; U) \quad (24.282)$$

leads to the renormalization of the full measure (24.28).

Block product measures

For the case of block product measure (24.30), the explicit expressions for the bond measures and for the right edge read

$$B_{\Gamma}^{\pm}(u_2, x_2; u_3, x_3) = \int \prod_{k=x_2}^{x_3} dU_k \delta(U_{x_2} - u_2) \delta(U_{x_3} - u_3) \Theta_{\Gamma}^{\pm}(x_2, x_3; U) \exp\left(-\sum_{i=x_2}^{x_3-1} S_i[U_{i+1}, U_i]\right) \quad (24.283)$$

$$E_{\Gamma}^+(x_R; u_1, x_1) = \int \prod_{k=1}^{x_1} dU_k \delta(U_{x_1} - u_1) \tilde{\Theta}_{\Gamma}^+(1, x_1; U) \exp\left(-\sum_{i=1}^{x_1-1} S_i[U_{i+1}, U_i]\right) \Phi_0(U_1) \quad (24.284)$$

with a symmetric expression for the left edge.

24.9.2 Renormalization procedure for periodic landscape

In the Section 24.2, we have described the renormalization procedure for an interval (x_L, x_R) with fixed boundary conditions. In this Appendix, we briefly describe the changes that are necessary for the case of a periodic landscape $U_1, \dots, U_N$ with $U_{N+1} = U_1$. The number of extrema is necessarily even in the initial landscape as well as in the renormalized landscape. The renormalized landscape at scale Γ can thus contain $2n$ extrema at positions $1 \leq x_1 < x_2 < \dots < x_{2n} \leq N$ and x_1 can be either a minimum or a maximum. As Γ increases there are also samples such that all barriers in the systems are smaller than Γ , corresponding to $n = 0$.

The normalization identity analogous to (24.281) which allows to treat the periodic case reads

$$1 = G_0(\Gamma, U) + \sum_{n=1}^K \sum_{1 \leq x_1 < x_2 < \dots < x_{2n} \leq N} (\Theta_{\Gamma}^+(x_1, x_2; U) \Theta_{\Gamma}^-(x_2, x_3; U) \dots \Theta_{\Gamma}^+(x_{2n-1}, x_{2n}; U) \Theta_{\Gamma}^-(x_{2n}, x_1; U) + \Theta_{\Gamma}^-(x_1, x_2; U) \Theta_{\Gamma}^+(x_2, x_3; U) \dots \Theta_{\Gamma}^-(x_{2n-1}, x_{2n}; U) \Theta_{\Gamma}^+(x_{2n}, x_1; U)) \quad (24.285)$$

where

$$G_0(\Gamma, U) = \prod_{i=0}^N \prod_{j=0}^N \theta(\Gamma - U_j + U_i) \theta(\Gamma - U_i + U_j) \quad (24.286)$$

is non zero if all barriers in the systems are smaller than Γ .

Integrating over the measure $\int DU \mathcal{P}(U)$, normalized by Z , each term yields:

$$Z = N_{\Gamma}^{(0)} + \sum_{n=1}^K \int_{u_1, \dots, u_{2n}} \sum_{1 \leq x_1 < x_2 < \dots < x_{2n} \leq N} N_{\Gamma}^{(2n, -)}(u_1, x_1; \dots, u_{2n}, x_{2n}) + N_{\Gamma}^{(2n, +)}(u_1, x_1; \dots, u_{2n}, x_{2n}) \quad (24.287)$$

where the symbols $\pm$ denote whether the bond $[x_{2n}, x_1]$ is $\pm$. RSRG recursion relations analogous to (24.28) may then be written, the only new RSRG equation being the growing of $N_{\Gamma}^{(0)}$ upon the decimation of the samples with only two extrema left.

Block product measure, involving only $B_{\Gamma}^{\pm}$ can be also written in an obvious way as in (24.30), and the above normalization identity can be written:

$$Z = N_{\Gamma}^{(0)} + \sum_{n=1}^K \text{Tr}(B_{\Gamma}^+ B_{\Gamma}^-)^n + \sum_{n=1}^K \text{Tr}(B_{\Gamma}^- B_{\Gamma}^+)^n \quad (24.288)$$

each term, all integrations excluded, giving the desired $N_{\Gamma}^{(2n, \pm)}$.

Note that although the starting landscape here can be the same as the one considered in Section 24.2 by imposing $U_1 = U_N$ in (24.25), the definition of the renormalized landscape here is different from the one in Section 24.2 for fixed boundary conditions. Here one allows consideration of a bond $[x_{2n}, x_1]$, which can be decimated, whereas in the case with infinite left and right boundaries, the decimation of the leftmost and rightmost bonds is not possible. In the periodic case, all the bonds can be decimated, resulting eventually in the $G_0(\Gamma)$ factor.

24.9.3 Derivation of the explicit solutions for a Schrodinger measure

This Appendix contains the technical details of Section (24.3).

Solution by a path-integral method

Basic Path-integral

We first consider the following path integral

$$F_{[u_a, u_b]}(u_0, x_0, u, x) = \int_{U_{x_0}=u_0}^{U_x=u} D U \exp - \int dx \frac{1}{4} \left(\frac{dU}{dx} \right)^2 + V[U] \quad (24.289)$$

where the sum is over paths which remain in the interval $]u_a, u_b[$ for $x_0 < x < x_1$. Seen as a function of (u, x) , it satisfies the Schrodinger equation

$$\partial_x F = \partial_u^2 F - V(u) F \quad (24.290)$$

with the initial condition at $x = x_0$

$$F(u, x_0) = \delta(u - u_0) \quad (24.291)$$

and the absorbing boundary conditions at $u = u_a$ and $u = u_b$

$$F(u_a, x) = 0 \quad (24.292)$$

$$F(u_b, x) = 0 \quad (24.293)$$

The Laplace transform with respect to $(x - x_0)$

$$F(u, p) = \int_{x_0}^{+\infty} dx e^{-p(x-x_0)} F(u, x) \quad (24.294)$$

satisfies the system

$$\partial_u^2 F - V(u) F = p F - \delta(u - u_0) \quad (24.295)$$

$$F(u_a, p) = 0 \quad (24.296)$$

$$F(u_b, p) = 0 \quad (24.297)$$

In terms of (24.54), we construct two solutions of the equation (24.55) which vanish respectively at u_a and u_b as:

$$\Phi_-(u, p; u_a) = K(u_a, u, p) \quad (24.298)$$

$$\Phi_+(u, p; u_b) = K(u, u_b, p) \quad (24.299)$$

Their wronskian (also independent of u) read:

$$W(p; u_a, u_b) = \Phi'_-(u_0, p; u_a)\Phi_+(u_0, p; u_b) - \Phi_-(u_0, p; u_a)\Phi'_+(u_0, p; u_b) = K(u_a, u_b) \quad (24.300)$$

The solution of the above equations (24.297) now read:

$$\hat{F}_{[u_a, u_b]}(u, p|u_0) = \frac{1}{W(p; u_a, u_b)}\Phi_-(u, p; u_a)\Phi_+(u_0, p; u_b) = \frac{K(u_a, u, p)K(u_0, u_b, p)}{K(u_a, u_b, p)} \quad \text{if } u_a \leq u \leq u_b \quad (24.301)$$

$$\hat{F}_{[u_a, u_b]}(u, p|u_0) = \frac{1}{W(p; u_a, u_b)}\Phi_+(u, p; u_b)\Phi_-(u_0, p; u_a) = \frac{K(u_a, u_0, p)K(u, u_b, p)}{K(u_a, u_b, p)} \quad \text{if } u_0 \leq u \leq u_b \quad (24.302)$$

The probability that the path has remained in the interval $]u_a, u_b[$ at time x

$$S_{[u_a, u_b]}(x|u_0, x_0) = \int_{u_a}^{u_b} du F_{[u_a, u_b]}(u, x|u_0, x_0) \quad (24.303)$$

satisfies

$$-\partial_x S_{[u_a, u_b]}(x|u_0, x_0) = r_{[u_a, u_b]}^a(x|u_0, x_0) + r_{[u_a, u_b]}^b(x|u_0, x_0) \quad (24.304)$$

where $r^{(u_a)}$ and $r^{(u_b)}$ represent the probability to be absorbed between "time" x and $x + dx$ at the boundary $u = u_a$ and $u = u_b$ respectively. They read:

$$r_{[u_a, u_b]}^a(x|u_0, x_0) = [\partial_u F_{[u_a, u_b]}(u, x|u_0, x_0)]|_{u=u_a} \quad (24.305)$$

$$r_{[u_a, u_b]}^b(x|u_0, x_0) = -[\partial_u F_{[u_a, u_b]}(u, x|u_0, x_0)]|_{u=u_b} \quad (24.306)$$

In Laplace transform with respect to $(x - x_0)$, they have the simple form

$$\hat{r}_{[u_a, u_b]}^a(p; u_0) = \frac{\Phi_+(u_0, p; u_b)}{\Phi_+(u_a, p; u_b)} \quad (24.307)$$

$$\hat{r}_{[u_a, u_b]}^b(p; u_0) = \frac{\Phi_-(u_0, p; u_a)}{\Phi_-(u_b, p; u_a)} \quad (24.308)$$

We are now in position to evaluate the constrained path-integral $B_\Gamma^-(u_1, x_1; u_2, x_2)$ (24.50).

Expression of $B_\Gamma^-(u_1, x_1; u_2, x_2)$ for the case $u_2 = u_1 + \Gamma$

We first consider the function $B_\Gamma^-(u_1, x_1; u_2, x_2)$ for an ascending bond with $u_2 = u_1 + \Gamma$. Setting $u_1 = u_a$, the distribution of x_2 is the distribution of the exit time at the boundary $u_b = u_a + \Gamma$ starting from $u_0 = u_a + \epsilon$ without being absorbed by the boundary at u_a . We thus have to consider the exit probability $r_{[u_a, u_b]}^b(x|u_0, x_0)$ computed in (24.308), for the particular case $u_0 = u_a + \epsilon$, $u_b = u_a + \Gamma$

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left(\frac{1}{\epsilon} r_{[u_a, u_a + \Gamma]}^b(x|u_a + \epsilon, x_0) \right) = B_{[u_a, u_a + \Gamma]}^-(x - x_0) \quad (24.309)$$

where the function $B_{[u_a, u_a + \Gamma]}^-(x - x_0)$ is defined by its Laplace transform

$$\hat{B}_{[u_a, u_a + \Gamma]}^-(p) = \partial_{u_0} \hat{r}_{[u_a, u_b]}^b(p; u_0)|_{u_0=u_a, u_b=u_0+\Gamma} \quad (24.310)$$

$$= \frac{1}{K(u_a, u_a + \Gamma, p)} \quad (24.311)$$

Expression of $B_{\Gamma}^{-}(u_1, x_1; u_2, x_2)$ for the case $u_2 > u_1 + \Gamma$

We now consider the function $B_{\Gamma}^{-}(u_1, x_1; u_2, x_2)$ for an ascending bond with $u_2 > u_1 + \Gamma$. To take into account the constraint of no returns of more than Γ , we write the recursion equation

$$B_{\Gamma}^{-}(u_0, x_0; u + \Delta u, x) = \int_{x_0}^x dx' B_{\Gamma}^{-}(u_0, x_0; u, x') r_{[u_a=u-\Gamma, u_b=u+\Delta u]}^b(x|u, x') \quad (24.312)$$

i.e. we obtain in Laplace with respect to $(x - x_0)$ the differential equation

$$\partial_u \hat{B}_{\Gamma}^{-}(u_0, ; u; p) = \hat{B}_{\Gamma}^{-}(u_0, ; u; p) \partial_{u_b} r_{[u_a, u_b]}^b(p, u)|_{u_a=u-\Gamma, u_b=u} = \hat{B}_{\Gamma}^{-}(u_0, ; u; p) Z^{-}(p, u - \Gamma, u) \quad (24.313)$$

with

$$Z^{-}(p, u_1, u_2) = -\frac{\partial_{u_2} K(u_1, u_2, p)}{K(u_1, u_2, p)} \quad (24.314)$$

Thus using the initial condition at $u_1 = u_0 + \Gamma$ (24.311), we get

$$B_{\Gamma}^{-}(u_0, u, p) = B_{\Gamma}^{-}(u_0, u_0 + \Gamma, p) \exp\left(\int_{u_0+\Gamma}^u du' Z^{-}(p, u' - \Gamma, u')\right) \quad (24.315)$$

leading to (24.53) given in the text.

Edge bonds

We now consider the function $E_{\Gamma}^{-}(u, x; u_R, x_R)$ for the ascending edge bond near the boundary condition $U(x = x_R^+) = +\infty$. Given u_R , the only constraint is that $u \leq u_R$ is the deepest minimum with no descending return of more than Γ in between. If $u = u_R$, we simply have $x = x_R$, whereas for $u < u_R$ we may again write an equation similar to (24.312) and we finally obtain in Laplace variable with respect to $(x_R - x)$ the result (24.57) given in the text.

Solution from the RSRG equations : Factorized Ansatz and Liouville equation

The factorized Ansatz (24.62) for B_{Γ}^{-} leads to the following RG equation

$$\partial_{\Gamma} \ln B_{\Gamma}^{-}(u; u''; p) = \int_u^{u''-\Gamma} du' (B_{\Gamma}^{-}(u'; u' + \Gamma; p))^2 \quad (24.316)$$

i.e. from the knowledge of $B_{\Gamma}^{-}(u; u + \Gamma; p)$ for all (Γ, u) one can reconstruct $B_{\Gamma}^{-}(u; u''; p)$ for all (Γ, u, u'') . This RG equation can be integrated if we introduce an auxiliary function $\Phi(u, v)$ defined by (24.63) since it yields

$$\int_u^{u''-\Gamma} du' \partial_1 \partial_2 \Phi(u', u' + \Gamma) = \int_{u+\Gamma}^{u''} dv \partial_1 \partial_2 \Phi(v - \Gamma, v) \quad (24.317)$$

$$= -\partial_{\Gamma} \int_{u+\Gamma}^{u''} du' \partial_2 \Phi(u' - \Gamma, u') - \partial_{\Gamma} \Phi(u, u + \Gamma) \quad (24.318)$$

and thus, integrating (24.316) over Γ one gets

$$B_{\Gamma}^{-}(p; u; u'') = \exp(-\Phi(u, u + \Gamma)) \exp\left(-\int_{u+\Gamma}^{u''} du' \partial_2 \Phi(u' - \Gamma, u')\right) \quad (24.319)$$

$$= \exp(-\Phi(u'' - \Gamma, u'')) \exp\left(-\int_{u''-\Gamma}^u du' \partial_1 \Phi(u', u' + \Gamma)\right) \quad (24.320)$$

which is indeed of the form (24.62) with

$$A_{\Gamma}^L(u) = \exp\left(-\int^u du' \partial_1 \Phi(u', u' + \Gamma)\right) \quad (24.321)$$

$$A_{\Gamma}^R(u'') = \exp(-\Phi(u'' - \Gamma, u'')) \frac{1}{A_{\Gamma}^L(u'' - \Gamma)} \quad (24.322)$$

The consistency of (24.63) now requires the famous Liouville equation (24.64) for the function $\Phi(u_1, u_2)$.

As is well known its most general local solution is of the form (Liouville 1850)

$$\Phi(u_1, u_2) = \ln\left(\frac{f_L(u_1) - f_R(u_2)}{(f_L'(u_1)f_R'(u_2))^{1/2}}\right) \quad (24.323)$$

where $f_L(u)$ and $f_R(u)$ are two arbitrary analytic functions. The alternative form (24.65) can be obtained by noting that the Liouville equation (24.64) implies

$$\partial_1(e^{-\Phi} \partial_2^2 e^{\Phi}) = 0 \quad (24.324)$$

$$\partial_2(e^{-\Phi} \partial_1^2 e^{\Phi}) = 0 \quad (24.325)$$

and thus there must exist two functions $V_L(u)$ and $V_R(u)$ such that e^{Φ} satisfies the two corresponding Schrodinger equations [36]. The connexion between the two representations is made by noting that $f_L(u) = \psi_L^{(1)}(u)/\psi_L^{(2)}(u)$. $f_R(u) = \psi_R^{(1)}(u)/\psi_R^{(2)}(u)$ and

$$\psi_L^{(1)}(u) = (-w_L)^{1/2} \frac{f_L(u)}{\sqrt{f_L'(u)}} \quad (24.326)$$

$$\psi_L^{(2)}(u) = (-w_L)^{1/2} \frac{1}{\sqrt{f_L'(u)}} \quad (24.327)$$

and similarly for ψ_R and f_R . One also has $V_L(u) = -\frac{1}{2})\frac{f_L''(u)}{f_L'(u)} - \frac{3}{2}(\frac{f_L''(u)}{f_L'(u)})^2$ and in general a second solution of the Schrodinger equation can be obtained from a first one $\psi_L^{(2)}(u)$ as $\psi_L^{(1)}(u) = \psi_L^{(2)}(u) \int^u (\psi_L^{(2)}(u))^{-2}$. Finally one finds that one can rewrite (24.320) as

$$B_{\Gamma}^{-}(p; u; u'') = \frac{(f_L'(u)f_R'(u''))^{1/2}}{f_L(u) - f_R(u + \Gamma)} \exp\left(\int_{f_R(u+\Gamma)}^{f_R(u'')} \frac{df_R}{f_L(u(f_R) - \Gamma) - f_R}\right) \quad (24.328)$$

$$= \frac{(f_L'(u)f_R'(u''))^{1/2}}{f_L(u'' - \Gamma) - f_R(u'')} \exp\left(\int_{f_L(u)}^{f_L(u''-\Gamma)} \frac{df_L}{f_L - f_R(v(B_L) + \Gamma)}\right) \quad (24.329)$$

where $u(B_R)$ is the inverse function of $f_R(u)$, i.e. $f_R(u(y)) = y$ and $v(f_L)$ the inverse function of $f_L(u)$.

Finally, assuming that $B_{\Gamma}^{-}(u; u''; p) = A_{\Gamma}^{(1)}(u)A_{\Gamma}^{(2)}(u'')$ together with delta function initial conditions, yields for the edge blocks

$$E_{\Gamma}^{+}(u_L, u, p) = \frac{A_{\Gamma}^L(u)}{A_{\Gamma}^L(u_L)} \quad (24.330)$$

$$E_{\Gamma}^{-}(u, u_R, p) = \frac{A_{\Gamma}^L(u)}{A_{\Gamma}^L(u_R)} \quad (24.331)$$

24.9.4 Configurations presenting two nearly degenerate minima

Distribution of the absolute minimum for the toy model on an arbitrary interval

The absolute minimum of the toy model on a arbitrary interval $[x_L, x_R]$ with fixed boundary conditions (u_L, u_R) is given by the $\Gamma \rightarrow \infty$ limit of the renormalized landscape containing only one valley left (24.90)

$$Z(u_L, x_L, u_R, x_R) = \int_{-\infty}^{\min(u_L, u_R)} du \int_{x_L}^{x_R} dx N_{\infty}^{(2)}(x_L, u_L - u, x, u_R - u, x_R) \quad (24.332)$$

where

$$N_{\infty}^{(2)}(x_L, u_L - u, x, u_R - u, x_R) = e^{\frac{\mu^2}{12}x_L^3 - \frac{\mu}{2}x_L(u_L - u)} \tilde{E}_{\infty}^{+}(u_L - u, 0, x - x_L) e^{\frac{\mu}{2}x_R(u_R - u) - \frac{\mu^2}{12}x_R^3} \tilde{E}_{\infty}^{-}(0, u_R - u, x_R - x) \quad (24.333)$$

describes the statistical properties of the position x and the energy u of the absolute minimum of the interval given the boundary conditions (u_L, x_L) and (u_R, x_R) . To obtain the edge blocks $\tilde{E}$ (24.92) in the limit $\Gamma \rightarrow \infty$, we need the function $K(u_1, u_2)$ in the regime $u_2 = u_1 + \Gamma \rightarrow \infty$, with u_1 fixed. Using the asymptotic expressions of Airy functions (24.351), we thus have

$$K(u_1, u_2) \simeq_{u_2 \rightarrow \infty} \frac{\pi}{a} \text{Ai}(au_1 + bp) \text{Bi}(au_2 + bp) \quad (24.334)$$

and the edge blocks at $\Gamma = \infty$ are simply given by

$$\tilde{E}_{\infty}^{+}(F, 0, p) = \tilde{E}_{\infty}^{-}(0, F, p) = \frac{\text{Ai}(aF + bp)}{\text{Ai}(bp)} \quad (24.335)$$

The function $N_{\infty}^{(2)}$ (24.333) describing the distribution of the minimum thus reads

$$N_{\infty}^{(2)}(x_L, u_L - u, x, u_R - u, x_R) = e^{\frac{\mu^2}{12}(x_L^3 - x_R^3) + \frac{\mu}{2}x_R(u_R - u) - \frac{\mu}{2}x_L(u_L - u)} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda_1}{2\pi} e^{i\lambda_1(x - x_L)} \frac{\text{Ai}(a(u_L - u) + bi\lambda_1)}{\text{Ai}(bi\lambda_1)} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda_2}{2\pi} e^{i\lambda_2(x_R - x)} \frac{\text{Ai}(a(u_R - u) + bi\lambda_2)}{\text{Ai}(bi\lambda_2)} \quad (24.336)$$

Probability to have two nearly degenerate minima

To study the measure of configurations with two degenerate minima, we need to consider (24.336) for the special case where the absolute minimum u coincides with the left boundary energy u_L

$$N_{\infty}^{(2)}(x_L, 0, x, u_R - u_L, x_R) = e^{\frac{\mu^2}{12}(x_L^3 - x_R^3) + \frac{\mu}{2}x_R(u_R - u_L)} \delta(x - x_L) \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda_2}{2\pi} e^{i\lambda_2(x_R - x)} \frac{\text{Ai}(a(u_R - u_L) + bi\lambda_2)}{\text{Ai}(bi\lambda_2)} \quad (24.337)$$

For the case $u_R = u_L + \epsilon$ with $\epsilon \rightarrow 0$, this yields for $x_L < x_R$

$$N_{\infty}^{(2)}(x_L, 0, x, \epsilon, x_R) = \delta(x - x_L) e^{\frac{\mu^2}{12}(x_L^3 - x_R^3)} \left(1 + \frac{\mu}{2} x_R \epsilon + O(\epsilon^2) \right) \\ \left(\delta(x_R - x) + a\epsilon \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda_2}{2\pi} e^{i\lambda_2(x_R - x)} \frac{Ai'(\lambda_2) bi\lambda_2}{Ai(bi\lambda_2)} + O(\epsilon^2) \right) \quad (24.338)$$

$$= a\epsilon \delta(x - x_L) e^{\frac{\mu^2}{12}(x_L^3 - x_R^3)} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda_2}{2\pi} e^{i\lambda_2(x_R - x_L)} \frac{Ai'(\lambda_2) bi\lambda_2}{Ai(bi\lambda_2)} \quad (24.339)$$

For the case $x_R \rightarrow \infty$, after integration over the barrier $(u_R - u_L)$, the formula (24.337) becomes using (24.335, 24.100, 24.104)

$$N_{\infty}^{(2)}(x_L, 0, x, +\infty) \equiv \lim_{x_R \rightarrow +\infty} \int_{u_L}^{+\infty} du_R N_{\infty}^{(2)}(x_L, 0, x, u_R - u_L, x_R) = e^{\frac{\mu^2}{12}x_L^3} \delta(x - x_L) g_{\infty}(x_L) \quad (24.340)$$

and similarly

$$N_{\infty}^{(2)}(+\infty, x, 0, x_R) = e^{-\frac{\mu^2}{12}x_R^3} \delta(x - x_R) g_{\infty}(-x_R) \quad (24.341)$$

Putting together the three results (24.339, 24.340, 24.341), we get the formula (24.132) for the configurations with two nearly degenerate minima.

24.9.5 Study of two valleys configurations in the toy model

This Appendix is dedicated to the study of the two valleys configurations described by (24.179). Since the barriers F_1 and F_3 are larger than Γ satisfying $a\Gamma \gg 1$, we may use the asymptotic expression (24.351) for the B_i to get

$$N_{\Gamma}^{(4)}(x_1, F_1, x_2, F_2, x_3) \simeq_{\Gamma \rightarrow \infty} \frac{e^{\frac{\mu}{2}x_2(F_1 - F_2)}}{\pi^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda_1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda_2}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda_3}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda_4}{2\pi} \quad (24.342)$$

$$\frac{e^{i(\lambda_1 + \lambda_2)x_1 + i(\lambda_3 - \lambda_2)x_2 - i(\lambda_2 + \lambda_3)x_3}}{Ai(bi\lambda_1)Ai(b\lambda_2)Ai(b\lambda_3)Ai(bi\lambda_4)} (aF_1 + bi\lambda_2')^{1/4} (aF_3 + bi\lambda_3')^{1/4} e^{-\frac{2}{3}(aF_1 + bi\lambda_2')^{3/2} - \frac{2}{3}(aF_3 + bi\lambda_3')^{3/2}} \quad (24.343)$$

At large Γ , the scaling region for the barrier is thus

$$F = \Gamma + \frac{\eta}{a\sqrt{a\Gamma}} \quad (24.344)$$

with $\eta \geq 0$ of order 1. The barriers are thus concentrated in the vicinity of Γ . Integration over the two barriers F_1, F_2 yields at leading order after the rescaling (24.344)

$$\int_{\Gamma}^{+\infty} dF_1 \int_{\Gamma}^{+\infty} dF_2 N_{\Gamma}^{(4)}(x_1, F_1, x_2, F_2, x_3) \simeq_{\Gamma \rightarrow \infty} \frac{a^2(a\Gamma)^{-1/2}}{\pi} e^{-\frac{4}{3}(a\Gamma)^{3/2}} \frac{1}{1 + \frac{(a^2x_2)^2}{a\Gamma}} g_{\infty}(-x_1) g_{\infty}(x_1 - x_2 + b(a\Gamma)^{1/2}) g_{\infty}(x_2 - x_3 + b(a\Gamma)^{1/2}) \quad (24.345)$$

in terms of (24.104).

We now integrate over the maximum x_2 . The constraints of integration $x_1 < x_2 < x_3$ may be forgotten since the domains $x_2 < x_1$ and $x_2 > x_3$ are highly suppressed with the functions $g_\infty(x_1 - x_2 + b(a\Gamma)^{1/2})$ and $g_\infty(x_2 - x_3 + b(a\Gamma)^{1/2})$. The measure for the two minima thus read

$$M_\Gamma^{(4)}(x_1, x_3) \equiv \int_{x_1}^{x_3} dx_2 \int_{\Gamma}^{+\infty} dF_1 \int_{\Gamma}^{+\infty} dF_2 N_\Gamma^{(4)}(x_1, F_1, x_2, F_2, x_3) \simeq_{\Gamma \rightarrow \infty} \frac{g_\infty(-x_1)g_\infty(x_3)}{a^2} e^{-\frac{4}{3}(a\Gamma)^{3/2}} \\ \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda_1}{2\pi} \frac{e^{-i\lambda_1(x_1+b(a\Gamma)^{1/2})}}{\text{Ai}(bi\lambda_1)} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda_2}{2\pi} \frac{e^{-i\lambda_2(-x_3+b(a\Gamma)^{1/2})}}{\text{Ai}(bi\lambda_2)} e^{-b(a\Gamma)^{1/2}|\lambda_1-\lambda_2|}$$

which yields (24.132) for $a\Gamma \gg 1$.

24.9.6 Useful properties of Airy functions

The Airy functions Ai and Bi are two independent solutions of the differential equation

$$\phi''(z) = z\phi(z) \quad (24.347)$$

of Wronskian

$$AiBi' - BiAi' = \frac{1}{\pi} \quad (24.348)$$

An immediate consequence is

$$\frac{d}{dx} \left(\frac{Bi(x)}{Ai(x)} \right) = \frac{1}{\pi Ai(x)^2} \quad (24.349)$$

The asymptotic expressions of the Airy functions at large argument read

$$Ai(z) \simeq_{Re(z) \rightarrow +\infty} \frac{1}{2\sqrt{\pi}} z^{-\frac{1}{4}} e^{-\frac{2}{3}z^{3/2}} \quad (24.350)$$

$$Bi(z) \simeq_{Re(z) \rightarrow +\infty} \frac{1}{\sqrt{\pi}} z^{-1/4} e^{\frac{2}{3}z^{3/2}} \quad (24.351)$$

Another useful property is

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \frac{Bi(ix)}{Ai(ix)} = \pm i \quad (24.352)$$

25 Exotic Kinetic Effects and Models

25.1 Kinetics of Magnetic Liquids (???)

(I have no idea, how it can be described)

25.1.1 Dynamo theory

(???? I have no idea, what is it?)

25.1.2 Magnetic Dynamo

(???? I have no idea, what is it?)

мотивация его изучать

???

Эффект магнитного динамо в стационарном и хаотическом потоке жидкости

25.2 Other Special Effects in Solids

25.2.1 Kinetics of Plasma in Graphene

актуальные статистические свойства графена

Вспомним необходимые свойства, чтобы использовать их далее.

В графене, то есть в монослое графита, зависимость энергии электронов от импульса $\mathbf{p} = (p_x, p_y)$ описывается безмассовым дираковским спектром

$$\varepsilon_p = v\sigma \cdot \mathbf{p},$$

где v - скорость электронов и $\sigma = (\sigma_x, \sigma_y)$ - матрицы Паули, и соответственно электронный спектр равен $\varepsilon_p = \pm v|\mathbf{p}|$.

Плотность состояний $g(\varepsilon)$ определяется интегралом

$$g(\varepsilon) = \nu \int \frac{d^2p}{(2\pi\hbar)^2} [\delta(\varepsilon - vp) + \delta(\varepsilon + vp)] = \nu \frac{|\varepsilon|}{2\pi\hbar^2 v^2}$$

где $\nu = 2 \times 2$ - кратность вырождения спектра по спину электрона и двум подзонам.

продольная диэлектрическая проницаемость плазменных колебаний в графене (??)

Найдем продольную диэлектрическую проницаемость $\varepsilon_l(\omega, k)$ продольных плазменных колебаний (плазмонов) в графене.

Нам известно выражение для продольной диэлектрической проницаемости двумерного слоя электронов

$$\varepsilon_l(\omega, k) = 1 + \frac{2\pi e^2}{k} \int \frac{\partial n_0(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} A(s) \frac{\nu d^2p}{(2\pi\hbar)^2}$$

где $n_0(\varepsilon) = 1/(1 + e^{(\varepsilon - \mu)/T})$ - функция распределения Ферми, $\nu = 2 \times 2$, а функцию $A(s)$, равную

$$A(s) = \begin{cases} -1 + s/\sqrt{s^2 - 1}, & s > 1, \\ -1 - is/\sqrt{1 - s^2}, & s < 1, \end{cases}$$

можно вынести из под знака интеграла, так как ее аргумент $s = \omega/vk$ не зависит от импульса p .

В результате после перехода от интегрирования по импульсу к интегрированию по энергии с введением плотности состояний $g(\varepsilon)$, получим для диэлектрической проницаемости

$$\begin{aligned} \varepsilon_l(\omega, k) &= 1 + \frac{2\pi e^2}{k} A\left(\frac{\omega}{vk}\right) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial n_0(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} g(\varepsilon) d\varepsilon = \\ &= 1 - \frac{2\pi e^2}{k} A\left(\frac{\omega}{vk}\right) \frac{\nu}{2\pi\hbar^2 v^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon}{4T} \frac{|\varepsilon|}{\text{ch}^2 \frac{\varepsilon - \mu}{2T}} = \\ &= 1 - \frac{4e^2 T}{\hbar^2 v^2 k} A\left(\frac{\omega}{vk}\right) \ln \left(2 \text{ch} \frac{\mu}{2T} \right) \end{aligned}$$

где учтено было известное значение плотности состояний: $g(\varepsilon) = \nu \frac{|\varepsilon|}{2\pi\hbar^2 v^2}$

дисперсия плазменных колебаний в графене

Дисперсию плазмонов находим из уравнения $\varepsilon_l(\omega, k) = 0$, решение которого несложно:

$$\omega^2 = \frac{\kappa k}{1 + v^2 k / 4\kappa} + v^2 k^2,$$

где $\kappa = \frac{2e^2 T}{\hbar^2} \ln \left(2 \operatorname{ch} \frac{\mu}{T} \right)$.

длинноволновая область

В наиболее интересной длинноволновой области $k \ll \kappa/v^2$ плазменные колебания (плазмоны) имеют ту же корневую зависимость от волнового вектора

$$\omega(k) = \sqrt{\kappa k}$$

как и для обычных двумерных систем, но с температурной зависимостью κ при $\mu \lesssim T$.
и что с ней?

25.2.2 Weak Localization (????)

(?????)

обзор

(вики)

Слабая локализация (англ. weak localization) — совокупность явлений, обусловленных эффектом квантово-механической интерференции электронов самих с собой в слабо разупорядоченных материалах с металлическим типом проводимости[1].

Явления слабой локализации являются универсальными и проявляются в любых неупорядоченных проводниках — в металлическом стекле, тонких металлических плёнках, системах с двумерным электронным газом и тому подобное.

Причиной слабой локализации служит изменение скорости диффузии электронов благодаря интерференции электронных волн, многократно рассеивающихся на дефектах кристаллической решётки.

При низких температурах, когда сопротивление проводника определяется преимущественно рассеянием на случайном потенциале, что создаётся дефектами, интерференция приводит к квантовым поправкам в классической электропроводности.

Экспериментально слабая локализация проявляется явлениями отрицательного магнетосопротивления, нехарактерной для металлов температурной зависимости электрического сопротивления при низких температурах, универсальными флуктуациями проводимости в мезоскопических образцах и тому подобное.

Происхождение термина «слабая локализация» объясняется тем, что интерференционные явления можно интерпретировать как предвестник андерсоновского перехода металл-диэлектрик, когда при достаточно сильном уровне беспорядка происходит полная локализация электронов[2].

вкратце теория

Слабая локализация возникает из-за интерференции электрона самого с собой благодаря возможности его движения в одну и ту же точку различными траекториями.

До открытия эффектов слабой локализации считалось, что квантово-механические явления интерференции существуют в основном для подвижных электронов в монокристаллах.

В первую очередь, это дифракция электронов[10].

Однако выяснилось, что эти явления не только существуют в неупорядоченных системах, но и могут усиливаться в таких системах[1][5].

В отличие от кристаллов, где потенциал поля, в котором движутся электроны, меняется периодически, в средах с беспорядком он меняется случайным образом.

Электроны, энергия которых меньше максимальных значений потенциала, локализуются в потенциальных ямах, образованных случайным потенциалом.

Если длина локализации невелика по сравнению с расстояниями между центрами локализации, электрон в потенциальной яме находится до тех пор, пока тепловые колебания атомов не перекинут его в соседнюю потенциальную яму.

Такой перенос электронов называется прыжковым транспортом[11].

Примером материалов, в которых осуществляется прыжковый транспорт, являются аморфные полупроводники[12].

Электроны с более высокими энергиями не локализуются в случайных потенциальных ямах, а рассеиваются на них.

Можно предположить, что среда с беспорядком состоит из хаотично расположенных силовых центров, на каждом из которых электрон рассеивается изотропно, то есть, может с одинаковой вероятностью отклониться на любой угол от первоначальной траектории движения.

Если бы электрон был классической частицей, то вероятность обнаружить электрон, рассеянный на хаотически расположенных силовых центрах, не зависела бы от угла рассеяния, однако, учёт корпускулярно-волнового дуализма меняет картину[1].

Квантовые поправки к проводимости

хз

история

Эффект слабой локализации — отрицательное магнетосопротивление — экспериментально обнаружил в 1948 году сотрудник Института точной механики и вычислительной техники АН СССР Ченцов Г. А.[3].

В течение длительного времени (почти 30 лет) его безуспешно пытались объяснить разного рода теориями.

Так, например, в соответствии с развитой Ютакой Тоязавой (англ.

Yutaka Toyozawa) моделью, некоторая часть примесных атомов в кристалле могут захватывать лишние электроны и, таким образом, приобретают магнитный момент — так называемый локальный спин[4].

Поскольку спины взаимодействующих электронов могут быть не параллельны, при рассеянии возможна переориентация спина, то есть, возникает дополнительный неупругий механизм рассеяния носителей тока.

Во внешнем магнитном поле происходит ориентация спинов по полю, причем доля ориентированных по полю спинов возрастает с увеличением магнитного поля и понижением температуры.

В результате неупругий механизм рассеяния частично выключается магнитным полем, что приводит к уменьшению электрического сопротивления.

Однако сравнение теоретических расчетов с экспериментом показывает, для согласия с экспериментом магнитный момент рассеивающего центра должен достигать десятков магнетонов Бора.

Этот и ряд других экспериментальных фактов показали, что невозможно объяснить экспериментальные данные в рамках модели Тоязави[4].

Выдвигались и другие модели для объяснения отрицательного магнетосопротивления.

Однако они не были обобщающими или базировались на заведомо ложных представлениях об увеличении концентрации носителей тока в магнитном поле.

И только в 1979 году это явление было объяснено как универсальное явление, которое наблюдается в любом проводнике при определённых условиях[5].

Количественная теория слабой локализации была построена в 1981 группой советских физиков-теоретиков: Борисом Альтшулером, Аркадием Ароновым, Анатолием Ларкиным и Давидом Хмельницким[6].

Она была подтверждена многочисленными экспериментами, а авторы за эту работу в 1993 году получили премию Европейского физического общества.

В том же 1981 году Юрий Шарвин и Дмитрий Юрьевич Шарвин обнаружили осцилляции сопротивления в тонкостенном цилиндре при изменении магнитного поля[7].

В 1985 году экспериментальным путём было подтверждено существование слабой локализации для электромагнитных волн[8][9].

25.3 Reaction-Diffusion

(??? I'll study it later)

well-known simulator: <https://www.karlsims.com/rdtool.html?s=0LGcd>

25.4 Phase Synchronization

(пока это в колебаниях написано.)

25.4.1 Typical Models of Phase Synchronization

Синхронизация по Белану

(!! разберу скоро.)

Модель Курамото

Рассмотрим ансамбль из $N \gg 1$ взаимодействующих фазовых осцилляторов, каждый из которых описывается фазовой переменной $\theta_i(t)$, принимающей значения от $-\pi$ до $+\pi$, и постоянной собственной частотой Ω_i , задающей скорость перемещения изображающей точки соответствующего осциллятора по фазовой окружности в отсутствие взаимодействия. В рамках простейшей модели синхронизации, предложенной Курамото, взаимодействие между осцилляторами носит непрерывный и нелокальный характер: в любой момент времени каждый осциллятор взаимодействует со всеми остальными. Более конкретно, динамика фазы i -го осциллятора описывается уравнением

$$\dot{\theta}_i = \Omega_i + \frac{K}{N} \sum_{j=1}^N \sin(\theta_j - \theta_i)$$

где $K \geq 0$ - это константа взаимодействия. Множитель $1/N$ введен, чтобы обеспечить конечность силы взаимодействия в пределе $N \rightarrow \infty$.

Во всех дальнейших рассуждениях мы будем предполагать, что собственные частоты осцилляторов представляют собой независимые случайные величины с одинаковой плотностью распределения $g(\Omega)$, которая имеет вид симметричного пика, центрированного в некоторой точке Ω_0 . Ниже мы увидим, что несмотря на разброс

собственных частот осцилляторов, при превышении константой взаимодействия K некоторого порогового значения K_c в модели Курамото происходит синхронизация фаз.

В качестве количественной меры степени синхронности ансамбля осцилляторов удобно выбрать комплексное число

$$re^{i\psi} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N e^{i\theta_j}$$

которое мы будем называть параметром порядка. Этот двухкомпонентный параметр можно себе представить как вектор с началом в центре фазовой окружности. Угол поворота этого вектора, ψ , есть средняя фаза осцилляторов ансамбля. Длина вектора, r , является мерой эффективности фазировки осцилляторов вблизи средней фазы. Если синхронизация в системе отсутствует, то осцилляторы равномерно распределены по фазовой окружности и $r = 0$. Если ансамбль полностью синхронизован, то есть все осцилляторы движутся как одна точка на фазовой окружности, то $r = 1$. Таким образом, параметр порядка (2) описывает коллективное поведение ансамбля осцилляторов как целого.

Метод среднего поля

Воспользуемся известным из статистической механики методом среднего поля, в рамках которого взаимодействие отдельной частицы с ее окружением учитывается посредством введения некоторого эффективного поля, наложенного на все частицы системы. В нашем случае очевидное тождество

$$re^{i(\psi-\theta_i)} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N e^{i(\theta_j-\theta_i)},$$

позволяет переписать уравнение динамики отдельного осциллятора как

$$\dot{\theta}_i = \Omega_i + Kr \sin(\psi - \theta_i)$$

Теперь взаимодействие каждого осциллятора со всеми остальными выражено через среднеполевые характеристики: фаза осциллятора "притягивается" к средней фазе ψ , причем сила притяжения пропорциональна степени когерентности ансамбля r .

В пределе $N \rightarrow +\infty$ флуктуациями "макроскопических" параметров r и ψ можно пренебречь. Разумно тогда предположить, что в установившемся режиме коллективная фаза ψ вращается с частотой Ω_0 , а амплитуда r постоянна. Выполним замену переменных $\theta_i \rightarrow \theta_i + \Omega_0 t$, что соответствует переходу в систему отсчета, вращающуюся с частотой Ω_0 . Выбрав соответствующим образом начало отсчета на фазовой окружности, можно положить $\psi = 0$. Тогда уравнение (4) приобретает вид

$$\dot{\theta}_i = \omega_i - Kr \sin \theta_i$$

где $\omega_i = \Omega_i - \Omega_0$.

Пояснение

Рассмотрим вещественную часть комплексного параметра порядка $X \equiv \Re \{ re^{i\psi} \} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i$, где $x_i \equiv \cos \theta_i$. Согласно неравенству Чебышева

$$\Pr[|X - \mu_X| \geq \delta] \leq \frac{\sigma_X^2}{\delta^2}$$

где

$$\begin{aligned}
 \mu_X &\equiv \langle X \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle x_i \rangle = \mu_x, \\
 \sigma_X^2 &\equiv \langle X^2 \rangle - \langle X \rangle^2 = \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i \right)^2 - \mu_x^2 = \frac{1}{N^2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \langle x_i x_j \rangle - \mu_x^2 = \\
 &= \frac{1}{N^2} \sum_{i \neq j} \langle x_i x_j \rangle + \frac{1}{N^2} \sum_{i=1}^N \langle x_i^2 \rangle - \mu_x^2 = \frac{1}{N^2} \sum_{i \neq j} \langle x_i x_j \rangle + \frac{\sigma_x^2 + \mu_x^2}{N} - \mu_x^2 \approx \\
 &\approx \frac{1}{N^2} \sum_{i \neq j} \langle x_i \rangle \langle x_j \rangle + \frac{\sigma_x^2 + \mu_x^2}{N} - \mu_x^2 = \frac{N-1}{N} \mu_x^2 + \frac{\sigma_x^2 + \mu_x^2}{N} - \mu_x^2 = \frac{\sigma_x^2}{N},
 \end{aligned}$$

где мы заменили $\langle x_i x_j \rangle \approx \langle x_i \rangle \langle x_j \rangle$, предполагая, что в силу слабого взаимодействия любых двух осцилляторов в пределе $N \gg 1$, их фазы можно считать статистически независимыми. Таким образом, с ростом N случайная переменная X все реже отклоняется от своего среднего значения

$$\Pr[|X - \mu_X| \geq \delta] \leq \frac{\sigma_x^2}{N\delta^2}$$

Плотность распределения фазы

Анализируя Ур. (5), Курамото понял, что в зависимости от значений расстройки частоты все осцилляторы можно разделить на две группы: дрейфующие и покоящиеся. А именно, если $|\omega_i| \leq Kr$, то в соответствии с Ур. (5) возможна ситуация, когда соответствующий осциллятор имеет постоянную во времени фазу

$$\theta_i = \arcsin \frac{\omega_i}{Kr}$$

Если же $|\omega_i| > Kr$, то у уравнения (5) нет стационарного решения, и такой осциллятор неизбежно движется по фазовой окружности. Рассмотрим произвольно выбранный осциллятор. Совместная плотность распределения его фазы θ и расстройки частоты ω может быть представлена в виде $\rho(\theta, \omega) = n(\theta|\omega)g(\Omega_0 + \omega)$, где $n(\theta|\omega)$ - это условная плотность распределения фазы при заданном значении расстройки частоты. Последнюю запишем как

$$n(\theta|\omega) = n_{\text{lock}}(\theta|\omega)I(|\omega| \leq Kr) + n_{\text{drift}}(\theta|\omega)I(|\omega| > Kr).$$

Здесь

$$n_{\text{lock}}(\theta|\omega) = \delta\left(\theta - \arcsin \frac{\omega}{Kr}\right)$$

это плотность распределения фазы осциллятора, чья собственная частота находится достаточно близко к вершине распределения $g(\Omega)$, а $n_{\text{drift}}(\theta|\omega)$ - это распределение фазы осциллятора с достаточно большой расстройкой частоты, удовлетворяющая следующему кинетическому уравнению (уравнение Лиувилля)

$$\partial_t n(\theta|\omega) = -\partial_\theta[(\omega - Kr \sin \theta)n(\theta|\omega)]$$

Статистически стационарное решение этого уравнения имеет вид $n_{\text{drift}}(\theta|\omega) = \frac{J}{\omega - Kr \sin \theta}$, где поток J определяется из условия нормировки как

$$\begin{aligned}
 J &= \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{\omega - Kr \sin \theta} = \sqrt{\omega^2 - K^2 r^2} \operatorname{sign}(\omega - Kr) / (2\pi). \text{ То есть} \\
 n_{\text{drift}}(\theta|\omega) &= \frac{\sqrt{\omega^2 - K^2 r^2}}{2\pi|\omega - Kr \sin \theta|}.
 \end{aligned}$$

Уравнение самосогласования

Построенная нами совместная плотность распределения $\rho(\theta, \omega)$ зависит от неизвестной амплитуды параметра порядка r . Ее значение определяется из уравнения самосогласования

$$\begin{aligned}
 r = \langle e^{i\theta} \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \int_{-\pi}^{+\pi} d\theta \rho(\theta, \omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega g(\Omega_0 + \omega) \int_{-\pi}^{+\pi} d\theta n(\theta|\omega) e^{i\theta} = \\
 &= \int_{|\omega| \leq Kr} d\omega \int_{-\pi}^{+\pi} d\theta e^{i\theta} n_{lock}(\theta|\omega) + \int_{|\omega| > Kr} d\omega \int_{-\pi}^{+\pi} d\theta e^{i\theta} n_{drift}(\theta|\omega) = \\
 &= \int_{|\omega| \leq Kr} d\omega \int_{-\pi/2}^{+\pi/2} d\theta \cos \theta \delta\left(\theta - \arcsin \frac{\omega}{Kr}\right) g(\Omega_0 + \omega) + \\
 &+ \int_{|\omega| > Kr} d\omega \int_{-\pi}^{+\pi} d\theta \cos \theta \frac{\sqrt{\omega^2 - Kr^2}}{2\pi|\omega - Kr \sin \theta|} g(\Omega_0 + \omega) = \\
 &= \int_{-\pi/2}^{+\pi/2} d\theta \cos \theta \int_{|\omega| \leq Kr} d\omega \delta\left(\frac{\omega - Kr \sin \theta}{Kr \cos \theta}\right) g(\Omega_0 + \omega) = \\
 &= Kr \int_{-\pi/2}^{+\pi/2} d\theta \cos^2 \theta g(\Omega_0 + Kr \sin \theta).
 \end{aligned}$$

Выше мы воспользовались тем, что $-\pi/2 \leq \arcsin \frac{\omega_i}{Kr} \leq +\pi/2$. Отметим также, что дрейфующие осцилляторы дают нулевой вклад в параметр порядка в силу неизменности функции распределения $\rho(\theta, \omega)$ при одновременной смене знаков ее аргументов и предполагаемой симметричности функции $g(\Omega)$ относительно точки $\Omega = \Omega_0$.

Фазовый переход

Итак

$$r = Kr \int_{-\pi/2}^{+\pi/2} d\theta \cos^2 \theta g(\Omega_0 + Kr \sin \theta)$$

При любом $K > 0$ у уравнения самосогласования всегда существует тривиальное решение $r = 0$, соответствующее декогерентному состоянию ансамбля осцилляторов. Чтобы выяснить, возможны ли в системе ненулевые значения параметра порядка, предположим, поделим уравнение (23) на r в предположении $r \neq 0$

$$K \int_{-\pi/2}^{+\pi/2} d\theta \cos^2 \theta g(\Omega_0 + Kr \sin \theta) = 1.$$

Далее, предположив дополнительно что $Kr \ll 1$, выполним разложение левой части в ряд Тейлора по r до квадратичного члена

$$K \left(g(\Omega_0) \int_{-\pi/2}^{+\pi/2} d\theta \cos^2 \theta + \frac{g''(\Omega_0)}{2} K^2 r^2 \int_{-\pi/2}^{+\pi/2} d\theta \cos^2 \theta \sin^2 \theta \right) = 1$$

$$\frac{\pi}{2} g(\Omega_0) K + \frac{\pi}{16} g''(\Omega_0) K^3 r^2 = 1.$$

Отсюда видно, что когда K становится больше критического значения

$$K_c = \frac{2}{\pi g(\Omega_0)}$$

у уравнения самосогласования (23) появляется ненулевая ветвь решений.
(??? как это связано с теорией Ландау фазовых переходов?????)

Модель Сакагучи-Курамото

Пусть эволюция фазы i -го осциллятора подчиняется уравнению

$$\dot{\theta}_i = \Omega_i + \frac{K}{N} \sum_{j=1}^N \sin(\theta_j - \theta_i) + \xi_i$$

где случайный процесс $\xi_i(t)$ представляет собой белый шум, заданный своим первым моментом и парным коррелятором

$$\langle \xi_i(t) \rangle = 0, \quad \langle \xi_i(t_1) \xi_j(t_2) \rangle = 2D \delta_{ij} \delta(t_1 - t_2)$$

Такое обобщение называется моделью Сакагучи-Курамото. После введения параметра порядка согласно формуле (2) и перехода в систему отсчета, вращающуюся с угловой скоростью Ω_0 , уравнение (28) может быть переписано как

$$\dot{\theta}_i = \omega_i - Kr \sin \theta_i + \xi_i$$

где как и выше $\omega_i = \Omega_i - \Omega_0$ обозначает расстройку фазы.

Уравнение Фоккера-Планка

Эволюция условной плотности распределения $n(\theta|\omega)$ фазы осциллятора при заданном значении расстройки его частоты ω описывается уравнением Фоккера-Планка

$$\partial_t n(\theta|\omega) = -\partial_\theta [(\omega - Kr \sin \theta) n(\theta|\omega)] + D \partial_\theta^2 n(\theta|\omega)$$

Статистически-стационарное решение имеет вид

$$n(\theta|\omega) = C_1 \exp\left(\frac{\omega}{D}\theta + \frac{Kr}{D} \cos \theta\right) + C_2 \exp\left(\frac{\omega}{D}\theta + \frac{Kr}{D} \cos \theta\right) \int_{-\pi}^{\theta} d\varphi \exp\left(-\frac{\omega}{D}\varphi + \frac{Kr}{D} \cos \varphi\right)$$

где коэффициенты C_1 и C_2 определяются условием нормировки $\int_0^{2\pi} n(\theta|\omega) d\theta = 1$ и условием периодичности $n(-\pi|\omega) = n(\pi|\omega)$. Для наших целей достаточно рассмотреть предел малых r . При $Kr/D \ll 1$ получаем

$$n(\theta|\omega) = \frac{1}{2\pi} + \frac{DKr}{2\pi(D^2 + \omega^2)} \left(\cos \theta + \frac{\omega}{D} \sin \theta \right) + O(r^2)$$

(????? и откуда оно выводится?????)
У

равнение самосогласования и фазовый переход

Неизвестная амплитуда параметра порядка определяется уравнением самосогласования

$$\begin{aligned} r = \langle e^{i\theta} \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \int_{-\pi}^{+\pi} d\theta \rho(\theta, \omega) e^{i\theta} = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega g(\Omega_0 + \omega) \int_{-\pi}^{+\pi} d\theta n(\theta|\omega) e^{i\theta} = \\ &= \frac{1}{2} DKr \int_{-\infty}^{+\infty} g(\omega + \Omega_0) \frac{d\omega}{D^2 + \omega^2} + O(r^2), \end{aligned}$$

где мнимая часть комплексной экспоненты дает нулевой вклад при интегрировании в силу неизменности функции распределения $\rho(\theta, \omega)$ при одновременной смене знаков ее аргументов и предполагаемой симметричности функции $g(\Omega)$ относительно точки $\Omega = \Omega_0$. Более детальный анализ показывает, что коэффициент при r^2 в правой части уравнения самосогласования положителен. Сокращая на r , получаем тогда следующее выражение для критической константы взаимодействия

$$K_c(D) = \frac{2}{D} \left[\int_{-\infty}^{+\infty} g(\omega + \Omega_0) \frac{d\omega}{D^2 + \omega^2} \right]^{-1},$$

выше которого происходит частичная синхронизация ансамбля осцилляторов, проявляющаяся в ненулевом значении r .

Фазовая синхронизация по (????) Колоколову

(удалю скорее всего, тут нет чего-то такого важного.)

К примерам из области физики относятся синхронизацию фаз взаимодействующих джозефсоновских переходов и лазеров.

Переход ансамбля осцилляторов от несогласованного состояния, когда каждый осциллятор колеблется с собственной частотой, к синхронизованному представляет собой аналог фазового перехода.

Контролируется этот переход силой взаимодействия между осцилляторами, которая после превышения некоторого порогового значения способна привести к коллективному поведению системы, несмотря на разброс собственных частот составляющих ее элементов и наличие шума.

Каждый осциллятор описывается фазой $\theta_i(t)$, которая может принимать значения от 0 до 2π .

Осцилляторы обладают собственными частотами Ω_i , определяющими скорости перемещения их фаз по фазовой окружности в отсутствие взаимодействия.

Эти частоты в общем случае могут быть функциями времени и фазы.

Вид взаимодействия между осцилляторами определяется свойствами конкретной физической или биологической системы, которая является предметом исследования.

Так, например, в моделях нейронных пулов наибольший интерес представляет импульсное взаимодействие.

В этом случае каждый осциллятор в момент достижения его фазой значения $2\pi (= 0)$ генерирует импульс, передающийся всем соседним элементам пула.

Данный импульс ведет к изменению фаз соседних осцилляторов на определенные величины, определяемые силами попарных взаимодействий.

В зависимости от знака приращения фазы взаимодействие может быть как возбуждающим, так и тормозящим.

Однако системы с импульсным взаимодействием весьма сложны с точки зрения аналитического описания и чаще всего исследуются численными методами.

Здесь мы рассмотрим более простую модель, в которой взаимодействие носит непрерывный и глобальный характер: в любой момент времени каждый осциллятор взаимодействует со всеми остальными.

Пусть динамика фазы описывается уравнением

$$\dot{\theta}_i = \Omega_i + \frac{K}{N} \sum_{j=1}^N \sin(\theta_j - \theta_i) + \xi_i$$

где $K \geq 0$ это константа взаимодействия, $N \gg 1$ - количество осцилляторов.

Множитель $1/N$ введен, чтобы обеспечить конечность силы взаимодействия в пределе $N \rightarrow \infty$.

Случайные процессы $\xi_i(t)$ представляет собой белый шум

$$\langle \xi_i(t) \rangle = 0, \quad \langle \xi_i(t_1) \xi_j(t_2) \rangle = 2D\delta_{ij}\delta(t_1 - t_2)$$

Модель, описываемая уравнением (5.41) называется моделью Курамото.

Теперь необходимо обсудить, что же является количественной мерой коллективной синхронизации.

Понятно, что если $K = 0$, то фазы осцилляторов независимы друг от друга и в любой момент времени распределены равномерно на фазовой окружности (в силу разброса собственных частот и наличия шума).

Если же константа взаимодействия достаточно велика, то ожидается коллективное поведение, выражающееся в неоднородности распределения на фазовой окружности.

В качестве меры синхронизации удобно выбрать комплексное число

$$re^{i\psi} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N e^{i\theta_j}$$

которое мы будем называть параметром порядка.

Этот параметр можно себе представить как вектор с началом в центре фазовой окружности.

Угол поворота этого вектора, ψ , есть средняя фаза осцилляторов ансамбля.

Длина вектора, r , является мерой эффективности фазировки осцилляторов вблизи средней фазы.

Если синхронизация в системе отсутствует, то осцилляторы равномерно распределены по фазовой окружности и $r = 0$.

Если ансамбль полностью синхронизован, то есть все осцилляторы движутся как одна точка на фазовой окружности, то $r = 1$.

Таким образом параметр (5.43) описывает коллективное поведение ансамбля осцилляторов как целого.

Равенство

$$re^{i(\psi-\theta_i)} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N e^{i(\theta_j-\theta_i)}$$

позволяет переписать уравнение динамики отдельного осциллятора как

$$\dot{\theta}_i = \Omega_i + Kr \sin(\psi - \theta_i) + \xi_i$$

Таким образом, мы видим перед собой пример теории среднего поля, встречающейся в задачах с многочастичным взаимодействием: взаимодействие элемента системы с окружением представляется как действие некоторого эффективного поля.

Теперь взаимодействие каждого осциллятора со всеми остальными выражено через среднеполевые характеристики r и ψ .

Фаза осциллятора "притягивается" к средней фазе ψ , а сила притяжения пропорциональна степени когерентности ансамбля r .

Предположим, что функция распределения осцилляторов по собственным частотам $g(\Omega)$ имеет вид симметричного пика около средней частоты Ω_0 : $g(\Omega_0 + \omega) = g(\Omega_0 - \omega)$.

Разумно предположить, что в установившемся режиме коллективная фаза ψ вращается с частотой Ω_0 , а амплитуда r не изменяется.

Выполним замену переменных $\theta_i \rightarrow \theta_i + \Omega_0 t$, что соответствует переходу в систему отсчета, вращающуюся с частотой Ω_0 .

В ней средняя фаза неподвижна и можно положить $\psi = 0$, выбрав соответствующим образом начало отсчета на фазовой окружности.

Тогда уравнение (5.45) приобретает вид

$$\dot{\theta}_i = \omega_i - Kr \sin \theta_i + \xi_i$$

где $\omega_i = \Omega_i - \Omega_0$. Введем функцию распределения осцилляторов по фазе и расстройке частоты

$$\rho(\theta, \omega, t) = \langle \delta(\theta - \theta_\omega(t)) \rangle_\xi$$

где $\theta_\omega(t)$ - решение уравнения (5.46) для осциллятора с собственной частотой ω при конкретной реализации случайного процесса ξ .

Эволюция данной функции описывается уравнением Фоккера-Планка

$$\partial_t \rho = -\partial_\theta[(\omega - Kr \sin \theta)\rho] + D\partial_\theta^2 \rho$$

Стационарное решение этого уравнения, удовлетворяющее периодическому граничному условию $\rho(\theta, \omega) = \rho(\theta + 2\pi, \omega)$, имеет вид

$$\rho(\theta, \omega) = \rho(0, \omega) \exp\left(\frac{-Kr + \omega\theta + Kr \cos \theta}{D}\right) \left(1 + \frac{(\exp(-\frac{2\pi\omega}{D}) - 1) \int_0^\theta \exp\left(\frac{-\omega\varphi - Kr \cos \varphi}{D}\right) d\varphi}{\int_0^{2\pi} \exp\left(\frac{-\omega\varphi - Kr \cos \varphi}{D}\right) d\varphi}\right)$$

где $\rho(0, \omega)$ определяется условием нормировки

$$\int_0^{2\pi} \rho(\theta, \omega) d\theta = 1$$

Функция распределения осцилляторов по фазе получается, если проинтегрировать (5.49) по частоте с весом $g(\Omega_0 + \omega)$

$$n(\theta) = \int_{-\infty}^{+\infty} g(\Omega_0 + \omega) \rho(\theta, \omega) d\omega$$

Вспоминая определение (5.43), мы можем выразить параметр порядка через функцию распределения

$$r = \int_0^{2\pi} n(\theta) e^{i\theta} d\theta = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega g(\Omega_0 + \omega) \int_0^{2\pi} d\theta \rho(\theta, \omega) e^{i\theta}$$

Последнее уравнение представляет собой условие самосогласования наaley среднеполевой теории и определяет величину параметра порядка.

Легко видеть, что при любом K уравнение самосогласования всегда имеет тривиальное нулевое решение $r = 0$, соответствующее полностью несинхронизованному режиму (когда $\rho(\theta, \omega) = 1/2\pi$).

Имеется однако еще одна ветвь решения, на которой параметр порядка становится отличным от нуля, начиная с некоторого критического значения константы взаимодействия K_c .

Чтобы определить точку перехода к синхронизованному состоянию, необходимо разложить правую часть уравнения (5.52) при $r \rightarrow 0$.

(?)

Функция распределения в пределе малого параметра порядка

$$\rho(\theta, \omega) = \frac{1}{2\pi} + \frac{DKr}{2\pi(D^2 + \omega^2)} \left(\cos \theta + \frac{\omega}{D} \sin \theta \right) + O(r^2)$$

Тогда уравнение (5.52(?)) приобретает вид

$$r = \frac{1}{2} DKr \int_{-\infty}^{+\infty} g(\omega + \Omega_0) \frac{d\omega}{D^2 + \omega^2} + O(r^2)$$

(мнимая часть занулилась в силу неизменности функции распределения $\rho(\theta, \omega)$ при одновременной смене знаков ее аргументов и предполагаемой симметричности функции $g(\Omega)$).

Сокращая на r , получаем следующее выражение для критической константы взаимодействия

$$K_c(D) = \frac{2}{D} \left[\int_{-\infty}^{+\infty} g(\omega + \Omega_0) \frac{d\omega}{D^2 + \omega^2} \right]^{-1}$$

Если константа взаимодействия K превышает это пороговое значение, то происходит частичная синхронизация ансамбля, проявляющаяся в ненулевом значении параметра порядка r .

критическая константа взаимодействия

(?77)

25.4.2 Other about Phase Synchronization (??)

О применениях фазовой синхронизации

(уменьшил раздел, потому что не актуально мне каждое применение прорабатывать, их слишком много, они слишком разные. Может, потом добавлю сюда формулы на разные случаи, посмотрим.)

О явлении синхронизации говорят, когда в системе взаимодействующих осцилляторов возникают согласованные колебания, хотя каждый в отдельности взятый осциллятор обладает уникальной собственной частотой и подвержен случайному шуму.

Такой эффект представляет собой коллективное поведение и обусловлен наличием взаимодействия между осцилляторами.

Коллективную синхронизацию можно наблюдать на большом числе примеров биологических систем: клетки типа *pacemaker* в сердечной ткани; синхронизованная активность нейронов, ответственная за формирование ритмов головного мозга; синхронизация метаболизма дрожжевых клеток; синхронизация вспышек больших скоплений светлячков; согласованное стрекотание сверчков.

обзор применений коллективной синхронизации в биологии

Коллективную синхронизацию можно наблюдать на большом числе примеров биологических систем:

- клетки типа *pacemaker* в сердечной ткани;
- синхронизованная активность нейронов, ответственная за формирование ритмов головного мозга;
- синхронизация метаболизма дрожжевых клеток;
- синхронизация вспышек больших скоплений светлячков;
- согласованное стрекотание сверчков.

обзор применений коллективной синхронизации в физике

К примерам из области физики относятся

синхронизация фаз взаимодействующих джозефсоновских переходов и лазеров.

Переход ансамбля осцилляторов от несогласованного состояния, когда каждый осциллятор колеблется с собственной частотой, к синхронизованному представляет собой аналог фазового перехода.

Контролируется этот переход силой взаимодействия между осцилляторами, которая после превышения некоторого порогового значения способна привести к коллективному поведению системы, несмотря на разброс собственных частот составляющих ее элементов и наличие шума.

клетки типа pacemaker в сердечной ткани

синхронизованная активность нейронов, ответственная за формирование ритмов головного мозга

синхронизация метаболизма дрожжевых клеток

синхронизация вспышек больших скоплений светлячков

согласованное стрекотание сверчков

25.5 Percolation Theory (!!!!)

(see a youtube video first about it, a special big topic)

25.6 Kinetics of Polymers (??)

(немного скажу про это, да и хватит.)

25.6.1 Freely-jointed chain model

(пока очень малая теория этого. чуть что потом выгружу что-то еще, пока мало что выгружено, не актуально это.)

Характерное расстояние между концами цепи

Каков характерный размер клубка, образованного полимерной цепью с известными длиной сегмента Куна l_{eff} и полной контурной длиной L ? Ответ на этот вопрос легко найти, воспользовавшись свободно-сочлененной моделью. Будем характеризовать размер клубка как квадратный корень из среднего квадрата расстояния между концами цепи. Вектор, соединяющий начало и конец свободно-сочлененной цепи можно представить как сумму

$$\vec{R} = \sum_{i=1}^N \vec{l}_i$$

где $N = L/l_{\text{eff}}$ - число сегментов Куна, $\vec{l}_i$ - вектор длины l_{eff} , направленный вдоль i -го сегмента. Тогда среднее расстояние между концами цепи

$$\sqrt{\langle \vec{R}^2 \rangle} = \sqrt{\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \langle \vec{l}_i \vec{l}_j \rangle} = \sqrt{\sum_i \langle \vec{l}_i^2 \rangle + \sum_{i \neq j} \langle \vec{l}_i \rangle \langle \vec{l}_j \rangle} = \sqrt{\sum_i \langle \vec{l}_i^2 \rangle} = \sqrt{N l_{\text{eff}}^2} = \sqrt{l_{\text{eff}}} L,$$

где мы использовали предположение о статистической независимости ориентаций различных в полностью растянутом состоянии, то есть $\sqrt{\langle \vec{R}^2 \rangle} \ll L$. К примеру, если принять $l_{\text{eff}} = 100$ нм, то согласно этим вычислениям размер клубка, образованного молекулой ДНК контурной длины 1 м составляет приблизительно 0.03 см. (Это много меньше метра, но гораздо больше размера клеточного ядра, имеющего диаметр порядка десяти микрометров, в которое реальные молекулы ДНК каким-то образом упакованы.)

25.6.2 Rouse Model

Модель Рауза

Рассмотрим цепочку из $N \gg 1$ бусинок с гармоническим взаимодействием между соседями. Движение каждой из промежуточных бусинок цепи описывается уравнением

$$\frac{d\vec{r}_n}{dt} = \gamma (\vec{r}_{n+1} + \vec{r}_{n-1} - 2\vec{r}_n) + \frac{1}{\zeta} \vec{\xi}_n(t)$$

где $2 \leq n \leq N - 1$, в то время как динамика крайних бусинок подчиняется уравнениям

$$\begin{aligned} \frac{d\vec{r}_1}{dt} &= \gamma (\vec{r}_2 - \vec{r}_1) + \frac{1}{\zeta} \vec{\xi}_1(t), \\ \frac{d\vec{r}_N}{dt} &= \gamma (\vec{r}_{N-1} - \vec{r}_N) + \frac{1}{\zeta} \vec{\xi}_N(t), \end{aligned}$$

Здесь $\vec{r}_n$ - координата n -ой бусинки, $\gamma = k/\zeta$ - кинетический коэффициент, выражаемый как отношение коэффициента упругости k соединяющих соседние бусинки пружинок и коэффициента вязкого трения ζ бусинки, $\vec{\xi}_n(t)$ - ланжевеновская сила (гауссов белый шум), действующая на n -ую бусинку. Для случайных сил предполагается выполнение следующих соотношений

$$\langle \xi_{n\alpha}(t) \rangle = 0, \quad \langle \xi_{n\alpha}(t_1) \xi_{m\beta}(t_2) \rangle = 2k_B T \zeta \delta_{\alpha\beta} \delta_{nm} \delta(t_1 - t_2),$$

где k_B - постоянная Больцмана, T - температура среды, δ_{nm} и $\delta_{\alpha\beta}$ - символы Кронекера. Индексы n и m обозначают номера бусинок, а индексы α и β нумеруют декартовы компоненты вектора.

Использование модели Рауза для описания динамики полимера основано на следующей идее: мысленно разделим полимерную цепь на большое число подцепей, контурная длина λ каждой из которых удовлетворяет условию $l_{\text{eff}} \ll \lambda \ll L$, и будем рассматривать только движение концов этих подцепей, не интересуясь динамикой промежуточных сегментов. Концы полученных подцепей и соответствуют бусинкам, а влияние связывающих их промежуточных участков, динамика которых нам не интересна, учитывается посредством введения гармонического взаимодействия между соседними бусинками.

Каким образом можно обосновать присутствие гармонической силы в уравнениях (17-19)? Этот вопрос неизбежно должен возникнуть, так как обсуждая микроскопическую структуру макромолекул мы не упоминали наличие какой бы то ни было упругой силы, которая бы препятствовала разведению в пространстве концов запутанного клубка. И если исходить, скажем, из простейшей модели свободно-сочлененной цепи, то свободное вращение сегментов друг относительно друга казалось бы означает отсутствие сопротивления цепи на внешнее растяжение, то есть отсутствие упругости. Так откуда же тогда может взяться упругое взаимодействие?

Макромолекула как термодинамическая система

Для прояснения этого вопроса, представим себе, что мы взяли полимерную цепь контурной длины λ за ее концы и медленно раздвинули их, так что расстояние R между концами увеличилось на относительно небольшую величину $\Delta R \ll R$. Если полимер действительно сопротивляется внешнему растяжению, то в этом процессе мы совершим некоторую ненулевую работу ΔA . Вычислим эту работу, заодно выяснив, на что она

пошла. находящуюся в контакте с термостатом (роль которого играет окружающий раствор) при постоянной температуре. Согласно первому началу термодинамики

$$\Delta A = \Delta U - \Delta Q$$

где ΔU - это изменение внутренней энергии цепи, а ΔQ - количество теплоты, переданное полимеру раствором. Прежде всего, заметим что потенциальная энергия свободно-сочлененной цепи не зависит от ее конформации. Не изменилась в ходе процесса растяжения и кинетическая энергия, так как она определяется температурой, а последняя поддерживается постоянной. Отсюда можно заключить, что фигурирующее в р. (21) изменение внутренней энергии макромолекулы равно нулю

$$\Delta U = 0$$

Что касается количества теплоты, сообщенного полимерной цепи из раствора, то оно связано с изменением энтропии макромолекулы ΔS как

$$\Delta Q = T\Delta S.$$

Энтропия клубка

(!?!?!?! в термаче укажу на это, пока плохо указано это.)

Согласно статистическому определению энтропии

$$S = k_B \ln W(R)$$

где $W(R)$ это число возможных микросостояний полимерной цепи, реализующих данное макросостояние. Последнее задано "макроскопической" переменной R , то есть длиной вектора, соединяющего концы макромолекулы. Иными словами, $W(R)$ - это количество конфигураций цепи при фиксированном взаимном расположении ее концов. В силу равновероятности всех конформаций свободно-сочлененной цепи, следующей из независимости потенциальной энергии такого полимера от его формы, имеем $P(\vec{R}) = \frac{W(R)}{W_0}$, где $P(\vec{R})$ - заданная формулой (3) равновесная функция распределения вектора $\vec{R}$ для предоставленного самому себе полимера, а W_0 - это полное число всех возможных конформаций свободного полимера. Значит

$$W(R) = W_0 P(\vec{R})$$

Из уравнений (24), (25) и (3), таким образом, находим

$$S = k \ln P(\vec{R}) + k \ln W_0 = \frac{3}{2} k \ln \frac{3}{2\pi\lambda_{\text{eff}}} - \frac{3kR^2}{2\lambda_{\text{eff}}} + k \ln W_0.$$

Мы видим, что энтропия уменьшается с увеличением расстояния между концами полимерной цепи. Это легко объяснить, если вспомнить, что вытянутая конформация всего одна, а запутанных много.

Энтропийная упругость полимерной цепи

Подстановка формул (22), (23) и (26) в уравнение (21) дает $\Delta A = \frac{3k_B T}{\lambda_{\text{eff}}} R \Delta R$. Знание работы ΔA , затраченной внешней силой на увеличение R на относительно малую величину ΔR позволяет найти силу натяжения между концами полимерной цепи

$$f(R) = \frac{\Delta A}{\Delta R} = \frac{3k_B T}{\lambda_{\text{eff}}} R$$

которая, таким образом, пропорциональна R , причем величина $k = \frac{3k_B T}{\lambda l}$ играет роль коэффициента жесткости. Отметим, что эта формула оправдана только в гауссовой области растяжений, когда расстояние между концами цепи далеко от своего максимально возможного растяжения, $R \ll \lambda$. Итак, мы выяснили, что упругость свободно-сочлененной цепи имеет энтропийное происхождение: при растяжении полимер распрямляется, т. е. переходит из беспорядочно запутанной конформации в более вытянутую; энтропия при этом уменьшается, и поскольку полимер находится в контакте с термостатом, процесс растяжения требует совершения работы. Эффективный коэффициент жесткости оказывается пропорционален температуре, что объясняется как раз энтропийной природой упругости полимерной цепи, и обратно пропорционален контурной длине λ , то есть мал для очень длинных цепей.

Континуальный предел модели Рауза

Вернемся к уравнению (17). Если число бусинок очень велико, $N \gg 1$, то оправдан переход к континуальному пределу

$$\vec{r}_{n+1}(t) + \vec{r}_{n-1}(t) - 2\vec{r}_n(t) \rightarrow \frac{\partial^2 \vec{r}(n, t)}{\partial n^2}$$

где n теперь рассматривается как континуальная переменная. Тогда из Ур. (17) получаем

$$\frac{\partial \vec{r}(n, t)}{\partial t} = \gamma \frac{\partial^2 \vec{r}(n, t)}{\partial n^2} + \frac{1}{\zeta} \vec{\xi}(n, t)$$

где для стохастического поля $\vec{\xi}(n, t)$ справедливо

$$\langle \xi_\alpha(n, t) \rangle = 0, \quad \langle \xi_\alpha(n, t_1) \xi_\beta(m, t_2) \rangle = 2\zeta k_B T \delta_{\alpha\beta} \delta(n - m) \delta(t_2 - t_1)$$

Таким образом, в континуальном пределе компоненты векторного поля $\vec{r}(n, t)$, которое описывает координаты участков полимерной цепи, пронумерованных индексом n , эволюционируют согласно неоднородному уравнению диффузии со стохастической "накачкой" $\vec{\xi}(n, t)$.

Граничные условия

Уравнение (29) должно решаться на отрезке $n \in [0, N]$ с граничными условиями

$$\partial_n \vec{r}(0, t) = \partial_n \vec{r}(N, t) = 0$$

Последнее связано с тем, что для концевых бусинок исходные дискретные уравнения имеют вид

$$\begin{aligned} \frac{d\vec{r}_0}{dt} &= \gamma (\vec{r}_1 - \vec{r}_0) + \frac{1}{\zeta} \vec{\xi}_0(t), \\ \frac{d\vec{r}_N}{dt} &= \gamma (\vec{r}_{N-1} - \vec{r}_N) + \frac{1}{\zeta} \vec{\xi}_N(t). \end{aligned}$$

Чтобы уравнения (32) и (33) по форме совпали с уравнением (17) справедливым для каждой из промежуточных бусинок, введем фиктивные бусинки с номерами -1 и N , положив при этом $\vec{r}_{-1}(t) = \vec{r}_0(t)$ и $\vec{r}_{N+1}(t) = \vec{r}_N(t)$. Тогда для бусинок 0 и N уравнения динамики примут вид

$$\begin{aligned} \frac{d\vec{r}_0}{dt} &= \gamma (\vec{r}_1 + \vec{r}_{-1} - 2\vec{r}_0) + \frac{1}{\zeta} \xi_0(t) \\ \frac{d\vec{r}_N}{dt} &= \gamma (\vec{r}_{N+1} + \vec{r}_{N-1} - 2\vec{r}_N) + \frac{1}{\zeta} \xi_N(t), \end{aligned}$$

то есть в континуальном пределе они будут переходить в Ур. (29). А условия $\vec{r}_{-1}(t) = \vec{r}_0(t)$ и $\vec{r}_{-1}(t) = \vec{r}_0(t)$ в этом же пределе эквивалентны Ур. (31), которые, таким образом, должны сопровождать Ур. (29). Отметим, что сказанное выше по поводу граничных условий относится к случаю полимера со свободными концами. Если же мы будем рассматривать динамику кольцевого полимера, то Ур. (31), очевидно, следует заменить условием периодичности $\vec{r}(0, t) = \vec{r}(N, t)$.

Решение уравнений Рауза

С континуальной версией модели Рауза несколько проще работать с точки зрения аналитических вычислений чем с дискретной. Покажем, как, решая уравнение (29), можно найти такую величину как время корреляции стохастической динамики полимера, то есть время, в течение которого цепь "помнит" свою текущую конформацию. Для этой цели вычислим для полимерной цепи в статистически-стационарном состоянии корреляционную функцию $\langle \vec{R}(0) \cdot \vec{R}(t) \rangle$, где $\vec{R} \equiv \vec{r}(N, t) - \vec{r}(0, t)$ - вектор, соединяющий свободные концы полимера, а угловые скобки $\langle \dots \rangle$ обозначают процедуру усреднения по тепловому шуму. Мы должны прежде всего решить уравнение (29) с граничными условиями (31) для заданной реализации ланжевеновского случайного поля $\vec{\xi}(n, t)$. Искомое решение может быть записано в виде

$$\vec{r}(n, t) = \frac{1}{\zeta} \int_{-\infty}^t dt_0 \int_0^N dn_0 G(n, t; n_0, t_0) \vec{\xi}(n_0, t_0)$$

где $G(n, t|n_0, t_0)$ - это функция Грина одномерного уравнения диффузии $\frac{\partial G}{\partial t} = \gamma \frac{\partial^2 G}{\partial n^2}$ на отрезке $n \in [0, N]$ с начальным условием $G(n, t_0|n_0, t_0) = \delta(n - n_0)$ и граничными условиями $\partial_n G(0, t|n_0, t_0) = \partial_n G(N, t|n_0, t_0) = 0$, где $0 \leq n_0 \leq N, 0 \leq n \leq N$ и $t \geq t_0$. Используя метод преобразования Фурье, получаем

$$G(n, t|n_0, t_0) = \frac{2}{N} \sum_{m=0}^{+\infty} e^{-\gamma q_m^2 (t-t_0)} \cos[q_m n_0] \cos[q_m n]$$

Тогда

$$\vec{R}(t) = \frac{2}{N\zeta} \sum_{m=0}^{+\infty} \int_{-\infty}^t dt_0 e^{-\gamma q_m^2 (t-t_0)} \int_0^N dn_0 \cos[q_m n_0] (\cos[q_m N] - 1) \vec{\xi}(n_0, t_0).$$

Для парного коррелятора находим

$$\begin{aligned}
 \langle \vec{R}(0) \cdot \vec{R}(t) \rangle &= \frac{4}{N^2 \zeta^2} \sum_{m=0}^{+\infty} \sum_{l=0}^{+\infty} (\cos [q_m N] - 1) (\cos [q_l N] - 1) \int_{-\infty}^0 dt_0 \int_{-\infty}^t dt'_0 e^{\gamma q_m^2 t_0 - \gamma q_l^2 (t-t'_0)} \\
 &\cdot \int_0^N dn_0 \int_0^N dn'_0 \cos [q_m n_0] \cos [q_l n'_0] \langle \vec{\xi}(n_0, t_0) \cdot \vec{\xi}(n'_0, t'_0) \rangle = \\
 &= \frac{4}{N^2 \zeta^2} \sum_{m=0}^{+\infty} \sum_{l=0}^{+\infty} (\cos [q_m N] - 1) (\cos [q_l N] - 1) \int_{-\infty}^0 dt_0 \int_{-\infty}^t dt'_0 e^{\gamma q_m^2 t_0 - \gamma q_l^2 (t-t'_0)} \cdot \\
 &\cdot \int_0^N dn_0 \int_0^N dn'_0 \cos [q_m n_0] \cos [q_l n'_0] 2\zeta k_B T \cdot 3\delta(n_0 - n'_0) \delta(t_0 - t'_0) = \\
 &= \frac{24k_B T}{N^2 \zeta} \sum_{m=0}^{+\infty} \sum_{l=0}^{+\infty} (\cos [q_m N] - 1) (\cos [q_l N] - 1) e^{-\gamma q_l^2 t} \int_{-\infty}^0 dt_0 e^{\gamma(q_m^2 + q_l^2)t_0} \cdot \\
 &\int_0^N dn_0 \cos [q_m n_0] \cos [q_l n_0] = \\
 &= \frac{24k_B T}{N^2 \zeta} \sum_{m=0}^{+\infty} \sum_{l=0}^{+\infty} (\cos [q_m N] - 1) (\cos [q_l N] - 1) \frac{e^{-\gamma q_l^2 t}}{\gamma (q_m^2 + q_l^2)} \cdot \frac{N}{2} \delta_{ml} = \\
 &= \frac{6k_B T}{N \gamma \zeta} \sum_{m=0}^{+\infty} (\cos [q_m N] - 1)^2 \frac{e^{-\gamma q_m^2 t}}{q_m^2} = \frac{24Nk_B T}{\pi^2 \gamma \zeta} \sum_{k=0}^{+\infty} \frac{\exp\left(-\frac{\pi^2(2k+1)^2 \gamma t}{N^2}\right)}{(2k+1)^2}.
 \end{aligned}$$

Таким образом, время, за которое парная корреляционная функция $\langle \vec{R}(0) \cdot \vec{R}(t) \rangle$ затухает в e раз, оценивается как

$$\tau_{\text{cor}} \approx \frac{N^2}{\pi^2 \gamma}$$

Problem

Из формулы $\frac{24Nk_B T}{\pi^2 \gamma \zeta} \sum_{k=0}^{+\infty} \frac{\exp\left(-\frac{\pi^2(2k+1)^2 \gamma t}{N^2}\right)}{(2k+1)^2}$ получите выражение для равновесного расстояния между концами цепи в модели Рауза.

$$\langle \vec{R}^2 \rangle_{eq} = \langle \vec{R}(0) \cdot \vec{R}(0) \rangle = \frac{24Nk_B T}{\pi^2 \gamma \zeta} \sum_{k=0}^{+\infty} \frac{1}{(2k+1)^2}$$

Чтобы вычислить сумму $\sum_{k=0}^{+\infty} \frac{1}{(2k+1)^2}$ рассмотрим контурный интеграл в комплексной плоскости $\oint_{\Gamma_N} dz f(z)$, где $f(z) = \frac{1}{z^2} \tan \frac{\pi z}{2}$ и $\Gamma_N = [-2N-2; 2N+2]^2$. Так как функция $\tan \frac{\pi z}{2}$ имеет полюса первого порядка в точках $z_k = 2k+1$, а функция $1/z^2$ - полюс второго порядка в нуле, то в силу теоремы о вычетах можем записать

$$\oint_{\Gamma_N} dz f(z) = 2\pi i \left(\text{res}_{z=0} f(z) + \sum_{k=-N-1}^N \text{res}_{z=z_k} f(z) \right)$$

где

$$\operatorname{res}_{z=0} f(z) = \lim_{z \rightarrow 0} \frac{d}{dz} [z^2 f(z)] \Big|_{z=0} = \frac{\pi}{2}$$

$$\operatorname{res}_z = z_k f(z) = \lim_{z \rightarrow z_k} [(z - z_k) f(z)] = -\frac{2}{\pi(2k+1)^2}$$

Очевидно, что при $N \rightarrow +\infty$ рассматриваемый контурный интеграл стремится к нулю. Значит

$$\operatorname{res}_{z=f(z)} + \sum_{k=-\infty}^{+\infty} \operatorname{res}_z = z_k f(z) = 0$$

$$\frac{\pi}{2} - \frac{4}{\pi} \sum_{k=0}^{+\infty} \frac{1}{(2k+1)^2} = 0$$

Таким образом, $\sum_{k=0}^{+\infty} \frac{1}{(2k+1)^2} = \pi^2/8$ и, следовательно, $\langle \vec{R}^2 \rangle_{eq} = \frac{3Nk_B T}{\gamma \zeta}$.

25.6.3 Polymers and Ideal Random Chains by Kleinert

(???? maybe I'll add something from this book, I am not sure since there are really a lot of theory)

Exact End-to-End Distribution in Three Dimensions Short-Distance Expansion for Long Polymer

Saddle Point Approximation to Three-Dimensional End-to-End Distribution

15.6 Path Integral for Continuous Gaussian Distribution

15.7 Stiff Polymers by Kleinert

15.7.1 Sliced Path Integral.

.

15.7.2 Relation to Classical Heisenberg Model

.

15.7.3 End-to-End Distribution

15.7.4 Moments of End-to-End Distribution

15.8 Continuum Formulation

15.8.1 Path Integral

(???? see his book)

15.8.2 Correlation Functions and Moments

15.9 Schrodinger Equation and Recursive Solution for Moments

15.9.1 Setting up the Schrodinger Equation

15.9.2 Recursive Solution of Schrodinger Equation

15.9.3 From Moments to End-to-End Distribution for $D = 3$

.

(???? see his book)

15.9.4 Large-Stiffness Approximation to End-to-End Distribution

15.9.5 Higher Loop Corrections

15.10 Excluded-Volume Effects

15.11 Flory's Argument

15.12 Polymer Field Theory

15.13 Fermi Fields for Self-Avoiding Lines

26 Applications of Kinetics

26.1 Diffusion in AI

(this is a tool that gave millions of dollars to many companies. I'll explain it, because it is way more important than maybe all other topics here)

26.2 Specific Aerodynamics

26.2.1 Некоторые темы

задача о вхождении ракеты в атмосферу

говорят, там как раз интеграл столкновений и рассматриваем

26.3 Weather and Climate (???)

26.3.1 Simple Models of Weather (??)

матрица переходов и предельное распределение

???

26.3.2 Models of Climate Change

(????)

26.3.3 Models of Melting of the Ice

(???? there are some of them, I'll maybe look later on them)

26.4 Nuclear Reactions

говорят, что часто рассчитывают кинетикой ядерные реакторы.

26.4.1 Замедление нейтронов

задача с лекций Колоколова, просто интересно очень.

итоги модели**модель**

Задача Найти стационарное пространственное распределение в зависимости от энергии для точечного источника моноэнергетических нейтронов, замедляющихся в среде в результате упругого рассеяния на ядрах массой $A \gg 1$, считая сечение рассеяния не зависящим от энергии нейтрона.

Решение Качественное рассмотрение.

При рассеянии легкой частицы массой m (нейтрона), движущейся со скоростью v , на неподвижной частице массой $M \approx Am$, переданный импульс меняется от нулевого до максимального $\Delta P \approx 2mv$, так что теряемая энергия $\Delta \varepsilon \approx (\Delta P)^2/2M \sim (m/M)\varepsilon$.

Тогда для того, чтобы замедлиться от энергии ε_0 до ε , нейтрону потребуется испытать число соударений N , определяемое из соотношения

$$(1 - m/M)^N \sim \varepsilon/\varepsilon_0, \text{ т.е. } N \sim (M/m) \ln(\varepsilon_0/\varepsilon)$$

Если длина свободного пробега равна λ , то вероятность $P(r)$ оказаться на расстоянии r за N шагов длиной λ в результате случайного блуждания пропорциональна

$$P(r) \sim \exp\left(-\frac{3r^2}{2N\lambda^2}\right) = \exp\left(-\frac{3r^2}{2\lambda^2(M/m) \ln(\varepsilon_0/\varepsilon)}\right)$$

Эта же величина определяет и распределение числа нейтронов по энергии с точностью до предэкспоненциального множителя.

Описание замедления нейтронов с помощью уравнения Фоккера - Планка.

Для количественного описания процесса замедления нейтронов рассмотрим кинетическое уравнение для функции распределения нейтронов $f(\vec{r}, \vec{p})$ по импульсам $\vec{p}$ и координатам $\vec{r}$ в стационарном случае при отсутствии внешних полей:

(потом запишу, если дойду)

26.5 Cosmology

(there are well-known models, see my note on cosmology about them for now)

26.5.1 Cosmological Kinetic Equations

(I'll copy them from cosmology later)

26.6 Applications to Mathematics (??)

(??? I'll write them later, which exactly mathematical problems can be solved by it? I don't know, some random processes... there should be some also mathematical impact from physical kinetics)

26.7 Finances

которые хз, куда вписать

26.7.1 Stocks

???

26.7.2 Risk Management

???

26.8 Sociology, Games, Wars

(maybe I'll write also it here, but for now, there will be special notes about them. anyway, I don't have time to study them now)

Part IX

Appendix

A Preface and main motivation

(потом напишу)

A.1 Extra Motivation

Обсудим, зачем изучать кинетику.

(в настоящий момент этот раздел не сделан, так что рекомендуется найти с помощью оглавления нужную тему и смотреть только нее)

кинетика - неравновсная статистическая механика - в теоретическом минимуме физика

с ней можно моделировать классные диффузионные модели

по сути в любую задачу можно добавить хаос и беспорядок, и тогда нужна именно кинетика

вроде бы, так и происходит, что каждая тема просто усложняется кинетикой и всё.
потом пропишу подробнее.

A.2 The Mindset of Professionals

Попробуем понять, какое мышление способствует наиболее эффективному и интересному изучению кинетики.

A.2.1 Essence of the Subject

A.2.2 Ways to Guess Some Key Ideas

(overview how people guessed some key ideas)

способы догадаться до описания броуновского движения

(???)

A.2.3 Features of Effective Learning

Осудим, что лучше понимать, чтобы эффективно учить предмет.

важно как можно скорее прорабатывать выход на простые модели и расчет конкретных величин

потому что теории большие, они могут навсегда и засосать.

это не нужно.

важно отслеживать этот выход и прописывать!!! ибо с этим скорее начнешь решать задачи, а это самое главное.

без этого в пустую время может быть просто потрачено.

сперва теория кинетики, потом моделирование (?)

не уверен, кстати.

имеем рабочие структуры по электродинамике сплошных сред, квантовой механике, и желательно по статфизу и гидродинамике

на другие структуры отсылок заметно больше, чем в других записях.

если есть какое-то уравнение, то просто обозначь все непонятное большим оператором, а дальше обрати его

Достаточно странно делается это, тем не менее, такое видно.

A.2.4 21st century answers to questions of 17th century scientists

(there were many very complicated questions, so here I'll write shortly what we are answering at them now? also, this will be in the theory above)

A.2.5 What Kinetics Tells Us about Condensed Matter?

(there are a lot of applications, so I'll summarize them and write main formulas, plots)

A.3 The Mindset of Professionals: Advanced Topics

A.3.1 Overview of Results and Applications

(just to show what is already working because of this subject)

A.3.2 Currently Unsolved Problems of Kinetics

(overview of the questions, which are relevant for current scientific community)

A.4 Acknowledgements

Currently, no one except me has worked on the sections of this note (with the exception of sections taken from books).

A.5 Literature

Обсудим книги и статьи, которые очень помогут узнать кинетику.

A.5.1 Main Literature

Основная обучающая

Tong. D. Kinetics

Крутые более 100 страниц лекций, первые из тех, которые я хотел бы изучать.

[14] Лифшиц Е.М., Питаевский Физическая кинетика

Пока с нее начал, не уверен, что это на самом деле лучшая книга для этого, но думаю, сойдет, вряд ли там фишня будет.

Белан Лекции ВШЭ по кинетике

Замечательные лекции, учиться по ним одно удовольствие, пусть и не все там просто. В открытом доступе нет, если потерял их - не знаю, Белану что ли можно написать, проблема будет найти их.

Books With Many Solved Problems

[8] С.Н. Бурмистров Задачи по физической кинетике

много ссылок есть на этот задачник, порешаю позже. Отдельная работа на пару недель скорее всего.

[?] (КР) Кондратьев А. С., Райгородский П. А. Задачи по термодинамике, статистической физике и кинетической теории. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2007. 256 с

Очень хороший задачник, где более чем 1/3 задач по кинетике. Немного имеется опечаток.

[11] Левитов Шитов Функция Грина. Задачи и решения.

некоторые главы чисто по кинетике, то, что нужно. только по другим структурам подготовиться как следует нужно, это важно!

A.5.2 Professional Literature

Professional literature on quantum kinetics

Ulrich Weiss Quantum dissipative systems

An encyclopedia with many methods and models. So many things are written there, it is very amazing. There is no sense in learning something from it in advance, but looking there for something in quantum kinetics might be very useful.

Статьи про квантовые явления

[4] G.B. Lesovik, I.A. Sadovskyy Scattering matrix approach to the description of quantum electron transport

про квантовый транспорт, наверное, хорошая статья. Очень многогранная, так что для изучения нужно бы и квантмех, и оптику, и многое другое вывести на нормальный уровень. Может, потом займусь. Начал даже выгружать ее, но тут сперва нужно в тренировках посидеть..

Про углубленные методы кинетики

Книги с углубленными методами, которые буду читать после основной литературы.

И.А. Квасников Теория неравновесных систем

рекомендуют, мб буду смотреть разные детали. пока что как-то вообще не до нее, вряд ли скоро дойду.

[7] Боголюбов Н Н избранные труды по статистической физике

Интересная очень книга с многими дополнениями, надеюсь, выйду до нее, сперва основы квантовой механики собрать нужно, а также типичными методами овладеть.

Петручине Ф. теория открытых квантовых систем

какая-то интересная книга, в которой случайные процессы, мб там что-то интересное есть??? пока дойти до нее очень уж сложно. . вообще хз, о чем она.

Другая профессиональная литература по теории

[3] Hansen, Jean-Pierre and McDonald, Ian R Theory of simple liquids

Крутая большая книга, когда-то открыл, подумал, что стану умным - когда-то пройду.

Пока вроде не актуально.

[15] Лебедев "флуктуационные эффекты в макрофизике"

Крутая книга, но вроде это больше по твердому телу, так что если и буду заниматься, то только в записи по нему.

В.Л. Гуревич, «Кинетика фононных систем», М.: Наука, 1980.

ПТФ говорит, что про фононы хорошая книга, мб, не до нее.

Я. Пригожин НЕРАВНОВЕСНАЯ СТАТИСТИЧЕСКАЯ МЕХАНИКА Перевод с английского В. А. БЕЛОКОНЯ и В. А. УГАРОВА

Книга по кинетике с разными диаграммами, чтобы польза была, думаю, нужно КТП и обычную кинетику сперва нормально отработать. Плюс скорее всего нужны эти методы только в специфических задачах. Пока не вижу смысла открывать.

А.М. Косевич, «Основы механики кристаллической решётки», М.: Наука, 1972.

ПТФ говорит, что про фононы хорошая книга, мб, не до нее.

D. Arovas, Lecture Notes про металлы кин теория

крутая книга вроде

Bogolyubov-NN-Izbrannye-trudy-po-statisticheskoi-fizike.djvu

Hansen Theory of simple Liquids

Биккин Х. М., Ляпилин И. И. Неравновесная термодинамика и физическая кинетика

Гантмахер рассеяние электронов в металлах

Что-то про это очень подробное, пока не смотрел особо, но мб крутая книга тоже.

A.5.3 Extra Literature

Другая обучающая литература

Румер Ю.Б., Рывкин М.Ш. Термодинамика, статистическая физика и кинетика

Там более 100 страниц про кинетику, кстати, так что тоже многому можно по ней научиться.

Я.В. Фоминов Фононы в кристаллах. Курс лекция для ПТФ, 2022

50 страниц многих известных тем, многие модели рассмотрены, крутая методичка, 1 неделя только в ней тренироваться - минимум. Качается на сайте ПТФ.

[9] Колоколов И. В. Лекции и семинары по курсу “Физическая кинетика и стохастические процессы”

небольшая и очень интересная запись, потому что там обсуждаются задачи, которые на самом деле хочется вписать и решать. Плюсы в том, что вкратце приведена теория и заданы интересные задачи. Минусы в том, что кроме этого ничего нет, так что теорию собираем сперва из других подробных книг.

Колоколов Семинары по физической кинетике

Вроде небольшой файл с сутью кинетики, когда-то посмотрю.

[5] Максимов Л. А., Полищук И. Я. Лекции по физической кинетике: Учебное пособие
Наверное, хорошие лекции с интересными моделями, пока не смотрел, скорее всего хорошая идея посмотреть их.

[10] В.Н.Глазков заметки к лекциям по общей физике

Глазков все еще очень полезен, потому что вкратце о многом записал. так что некоторые места по нему смотрю, без этого не получается. параграфы введения очень во многом именно по нему написаны.

[2] Daniel Arovas Lecture Notes on Nonequilibrium Statistical Physics

тоже на нее много ссылок, тоже важно досмотреть потом будет.

[1] D. Arovas Lecture Notes on Condensed Matter Physics (University of California, San Diego),

Очень крутая вроде книга тем, что вкратце раскрыты многие актуальные задачи твердого тела. Кинетическая теория металлов из нее в некоторых местах взята. сперва основы только собрать нужно.

[16] Э. Сон Лекции по физической механике

очень интересных много моделей описано вкратце, так что их добавлю, прямо очень хочется их вставить. ну а объем не большой, не малый, в физической механике тем все-таки достаточно, чтобы пару дней только над ней просидеть.

Максимов Полищук Введение к теории фазовых переходов первого рода

методичка от МФТИ на 30 стр про Фоккера-Планка и образование зародышей, некоторые части этой теории возьму, хорошее вроде короткое изложение, просто мне не актуально, так что так и не усвоил это.

Максимов Полищук элементы теории кинетики твердых тел

про всякие экситоны, поляроны, спиновые волны. Может, это лучшая литература для этих разделов, пока не актуально просто и нет времени проверять.

По приложениям кинетики к металлами

Гантмахер Левинсон Рассеяние носителей тока в металлах и полупроводниках

Вроде много интересных формул, подробно проходится рассеяние. мб буду изучать, дополню квантмех и тут главу про металлы.

[6] Абрикосов Основы теории металлов

очень крутая большая книга, которая больше в твердом теле будет применяться, тем не менее, в кинетике наверняка многое также будет.

литература по необходимым предметам для кинетики

[13] Ландау Статистическая физика т. 5

В кинетике много используется базовых знаний статистической физики, которые раскрыты в этой книге. Например, принцип симметрии кинетических коэффициентов.

[12] Ландау Статистическая физика т. 9

литературные советы из Левитова Шитова

(потом разберу, впишу, удалю.)

Теория ферми-жидкости Ландау, включая кинетическое уравнение и коллективные возбуждения, изложена в [6], §1 – 6 и [1], §2.

Простой вывод закона дисперсии плазмонов с помощью приближения случайных фаз можно найти в [3], §9.5, 9.6.

Корреляционная и обменная энергии кулоновского взаимодействия в Электронной ферми-жидкости рассматривается в [3], §9.4, 9.8, 9.9, [6], §85 и [1], §22. Мн - красочное обоснование теории ферми-жидкости, базирующееся на функциях Грина, приведено в [1], §18, 19, а также в [6], §15 – 21. Полезно также обратиться к оригинальным работам (см. сборник статей на с. 185).

A.6 General Overview of Kinetics

что вообще в нем происходит?

A.6.1 Popular Introduction to Kinetics

Обсудим, что из себя представляет кинетика кратко, выделяя самую суть.

A.6.2 Overview of Real Non-Physical Applications

(I'll write only about that one which really exist, not some fancy words without real meaning)

обзор различных задач, которая кинетика решает

пока хз

обзор сфер жизни, в которых применяется кинетика

???

ну твердое тело, а где еще?

A.6.3 Which Phenomena Are There in Kinetics?

(должно быть очень мотивирующе написано. также что-то будет повторяться с уже написанными темами, тут с точки зрения обзора и мотивации пишу)

Обсудим вкратце, какие есть кинетические явления вокруг нас. Выделим из них интересные и актуальные.

A.6.4 What is Going On in Quantum Kinetics?

(overview of this strange subject)

обзор параметров явлений квантовой кинетики

способ описания систем

обзор параметров квантовой кинетики

A.6.5 Connection of Kinetics with Other Parts of Physics

(потом когда-то допишу)

связь кинетики с термодинамикой

кинетика и механика

по сути с нее стартуем.

кинетика и оптика

Теоремы Винера-Хинчина, всё, что со случайными процессами связано.

какие-то минимальные связи в общем...

но есть!

пропишу позже

также есть квантовая оптика и задачи про двухуровневые системы, где методами квантовой кинетики доказывается, что в двухуровневой системе невозможна инверсия заселенности при только лишь когерентной накачке.

(см ниже где-то)

кинетика и КТП

по сути если квантовые столкновения рассматриваем - то могут какие почти угодно частицы вылазить, так что описывать нормально это нужно КТП.

потом уже интеграл столкновений и всё такое.

проработаю эту связь потом.

кинетика и статфиз

по сути этот формализм и рассматриваем, только неравновесные уже процессы.

(?)

кинетика и квантовая механика

такая же мб связь, как и с механикой?

кинетика и электродинамика

плазма.

все электрические эффекты в телах

тут тоже большая связь

A.6.6 Connection of Kinetics with Other Parts of Science

Связь со случайными процессами

A.7 Short Historical Overview

Обсудим вкратце историю развития...

(???????????)

A.8 Description of the Note

(????)

A.8.1 General Description of the Note

(write basically the same as for any of my other big note)

Общие особенности записи

Features of Chapters and Sections

Первая часть про предмет в двух словах

Вторая часть

Часть про приложения

какие вообще приложения я разбирал?

A.8.2 Notation

(list of symbols just to make it easier to read. but it is not that important)

A.8.3 Constants

(list of useful values, which are not often used, but still, it should be good to have them in one place)

A.9 Puzzles for Different Situations

Обсудим в порядке интересности задачки и вопросы

A.9.1 Puzzles for Interesting Discussion

A.9.2 Puzzles About Everyday Life

(???? what fun questions can arise about this subject in everyday life?)

закипание воды в чайнике

(see theory about it, I'll write it later here)

модель погоды

(see theory about it, I'll write it later here)

A.9.3 Selected Fun Typical Problems

(all this should also be in the problem-solution section!)

задача о случайном блуждании (?)

пока не выбрал, какая, но позже некоторые интересные освою

распределение плотности газа, вылетающего из полупространства

A.9.4 Principal Puzzles

(Puzzles about really important questions, even though they are already maybe solved)

рост энтропии при микро взаимодействиях

так растёт она или нет?

вроде нет.

что там квантмех про это кстати говорит?

или H-теорема?

не знаю.

запоминание системы прошлого

помнит ли система прошлое воздействие?

там модели есть и можно потом нормально ответить про это.

B Some Mathematics for Kinetics

B.1 Random Processes and Probability Theory

B.1.1 Random Processes

обзор применений

основные методы описания стохастических процессов

стохастическое исчисление Ито

пока с википедии, не знаю, насколько оно нужно

обзор применений

хз?

обзор

Исчисление Ито - математическая теория, описывающая методы манипулирования со случайными процессами, такими как броуновское движение (или винеровский процесс).

Названа в честь создателя, японского математика Киёси Ито.

Часто применяется в финансовой математике и теории стохастических дифференциальных уравнений.

Центральным понятием этой теории является интеграл Ито

$$Y_t = \int_0^t H_s dX_s$$

записывающийся также в виде $Y = H \cdot X$, где X - броуновское движение или, в более общей формулировке, полумартингал.

Можно показать, что путь интегрирования для броуновского движения нельзя описать стандартными техниками интегрального исчисления.

В частности, броуновское движение не является интегрируемой функцией в каждой точке пути и имеет бесконечную вариацию по любому временному интервалу.

Таким образом, интеграл Ито не может быть определен в смысле интеграла Римана - Стильтьеса.

Однако, интеграл Ито можно определить корректно, если заметить, что подынтегральная функция H есть адаптивный процесс; это означает, что зависимость от времени t его среднего значения определяется поведением только до момента t .

Обозначения

$$\int_0^t H dX \equiv \int_0^t H_s dX_s$$

Интегрирование броуновского движения

$$\int_0^t H dB = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{t_{i-1}, t_i \in \pi_n} H_{t_{i-1}} (B_{t_i} - B_{t_{i-1}})$$

Процесс Ито

$$X_t = X_0 + \int_0^t \sigma_s dB_s + \int_0^t \mu_s ds$$

Семимартингалы, как интеграторы

$$\int_0^t H dX = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{t_{i-1}, t_i \in \pi_n} H_{t_{i-1}} (X_{t_i} - X_{t_{i-1}})$$

где $0 = t_0 < t_1 < \dots < t_{n-1} < t_n = t$, $\max(t_i - t_{i-1}) \rightarrow 0$ - последовательность разбиений интервала $[0, t]$ с длиной подынтервалов стремящейся нулю.

марковские процессы

тут теория, которая нужна будет.

флуктуационно-диссипативная теорема

используется во втором дз, так что нужно пройти, без этого никак.

формулировка

обзор применений

вроде не так уж редко применяется.
пока не знаю.

B.1.2 Correlations, Averaging

Совместное распределение гауссовых случайных величин

(колоколов добавил в место про Ф-Пл, я мб там тоже про это запишу)

Производящая функция для совместного распределения гауссовых случайных величин

Матрица корреляций

Теорема Вика

принцип формирования статистики

определение статистики в терминах оптимальных флуктуаций

,

перемежаемость статистики

величина нормировочной константы

Пусть имеется K действительных переменных x_i , функция распределения которых имеет гауссов вид:

$$\rho(x_1, x_2, \dots, x_K) = \frac{1}{N} \exp(-x_i A_{ij} x_j)$$

где $\hat{A}$ - симметричная положительно определённая матрица.

Покажите, что из условия $\int \rho d^K x = 1$ следует следующее выражение для нормировочной константы

$$N = \frac{(2\pi)^{K/2}}{\sqrt{\det A}}$$

корреляции для гауссовского распределения

Вычислите парную корреляционную функцию

$$\langle x_i x_j \rangle$$

а затем корреляционные функции произвольного порядка

$$\langle x_i x_j \dots x_n x_m \rangle$$

Сумма большого количества независимых одинаково распределённых случайных величин

Центральная предельная теорема.

Расширение центральной предельной теоремы: функция Крамерса. Задача 2: Рассмотрим случайную величину X , являющуюся суммой случайных переменных $x_j, j = \overline{1, N}$

$$X = x_1 + x_2 + \dots + x_N$$

имеющих одинаковую функцию распределения $p(x)$.

Для простоты положим, что $\langle x \rangle = 0$.

При $N \gg 1$ функция распределения $\mathcal{P}(X)$ для X может быть записана в универсальном виде:

$$\mathcal{P}(X) \approx \text{Const} \cdot \exp\{-NS(X/N)\}$$

Вычислить $S(X/N)$ для $p(x) = \frac{2}{\pi} \frac{1}{(1+x^2)^2}$.

При каких ограничениях на X/N работает гауссова аппроксимация:

$$S(X/N) \approx \frac{(X/N)^2}{2 \langle x^2 \rangle}?$$

B.1.3 Measure Theory

обзор применений

слабая сходимость

B.1.4 Markov Chain

обзор применений

хз

B.2 Numerical Methods

обзор применений

обзор методов

(+)9 алгоритм Монте-Карло

суть метода Монте-Карло

Многие процессы, возникающие в статистической физике, могут быть представлены как марковские.

По существу, марковский процесс - это стохастический процесс с короткой памятью, то есть процесс, который быстро забывает свою предысторию.

Марковское условие устанавливает, что вероятность какого-то события, обусловленная m предыдущими событиями, зависит только от последнего события.

Для любого стохастического процесса важную роль играет величина $T(x, t|x', t')$, которая равна плотности вероятности того, что процесс принимает значение в момент времени t при условии, что процесс принимает значение x' в некоторое начальное время t' .

Поэтому данная вероятность называется условной вероятностью перехода, или просто пропагатором.

Как следует из определения, пропагатор удовлетворяет соотношениям: $\int T(x, t|x', t') dx = 1, \lim_{t \rightarrow t'} T(x, t|x', t') = \delta(x - x')$.

Первое уравнение выражает тот факт, что с вероятностью 1 процесс принимает некоторое значение при любом фиксированном времени, а второе уравнение утверждает, что, при стремлении к нулю приращению времени с вероятностью 1 процесс не меняется.

Плотность вероятности $p(x, t)$, которая является просто плотностью для безусловной вероятности того, что процесс принимает значение в момент времени t ,

связана с начальной плотностью в некоторый момент времени t_0 очевидным соотношением: $P(x, t) = \int T(x, t|x', t_0) P(x', t_0) dx'$.

Используя определение пропагатора, мы, таким образом, получаем интегральное уравнение Чепмена-Колмогорова: $T(x_3, t_3|x_1, t_1) = \int T(x_3, t_3|x_2, t_2) T(x_2, t_2|x_1, t_1) dx_2$.

В итоге для определения стохастического марковского процесса нам нужно определить пропагатор $T(x, t|x', t')$, удовлетворяющий уравнению Чепмена-Колмогорова, и начальную плотность $p(x, t_0)$.

Поэтому, по существу, классификация марковских процессов сводится к классификации решений уравнения Чепмена-Колмогорова.

Из интегрального уравнения можно получить дифференциальное уравнение движения для пропагатора.

Для скачкообразных процессов оно имеет вид

$$\frac{\partial}{\partial t} T(x, t|x', t') = \int [W(x|x'', t) T(x'', t|x', t') - W(x''|x, t) T(x, t|x', t')] dx''$$

Это дифференциальное уравнение Чепмена-Колмогорова для скачкообразного процесса.

Оно называется основным уравнением.

Такое же уравнение имеет место и для плотности $p(x, t)$:

$$\frac{\partial}{\partial t} p(x, t) = \int [W(x|x', t) p(x', t) - W(x'|x, t) p(x, t)] dx'$$

Это уравнение также называется основным уравнением.

Однако необходимо помнить, что основное уравнение в действительности есть уравнение для вероятности условного перехода процесса.

Это важное место, так как уравнение для плотности первого порядка $p(x, t)$, эволюционирующей во времени, недостаточно для полного определения стохастического марковского процесса.

Основное уравнение допускает наглядную интерпретацию в виде уравнения баланса для интенсивности изменения плотности вероятности в точке x .

Первый член с

правой стороны описывает интенсивность роста плотности вероятности в x , которая происходит благодаря скачкам из других состояний x' в состояние x .

Второй член описывает интенсивность снижения вероятности вследствие скачков из состояния x .

Пуассоновский процесс.

Однородный пуассоновский процесс описывает число $N(t)$ независимых событий во временном интервале от 0 до t , где каждое событие происходит с постоянной интенсивностью γ .

Пусть величина γ характеризует интенсивность излучения отдельного фотона в единицу времени.

Надо определить количество $N(t)$ фотонов, излучаемых за ограниченный промежуток времени от 0 до t .

Для этого мы полагаем, что для всех излучаемых фотонов интенсивность γ постоянна, а каждый излучательный процесс проходит согласно тем же самым условиям и независимо от всех предыдущих.

Величина $N(t)$ становится стохастическим марковским процессом, известным как (однородный) процесс Пуассона.

Он описывается следующим основным уравнением для пропагатора:

$$\frac{\partial}{\partial t} T(n, t|n', t') = \gamma T(n-1, t|n', t') - \gamma T(n, t|n', t')$$

Мы поставим детерминированное начальное условие $N(0) = 0$, то есть $P(n, 0) = \delta_{n,0}$.

Пуассоновский процесс представляет пример одношагового процесса, для которого, если задано, что $N(t) = n$, то возможны только переходы в соседние состояния $n \pm 1$.

Он даже еще проще, если возможны только переходы из n в $n + 1$, а интенсивность перехода γ - константа, которая не зависит от n .

Основное уравнение для пуассоновского процесса может быть решено точно.

Это можно сделать посредством характеристической (производящей) функции

$$G(k, t) = \sum_{n=n'}^{\infty} e^{ik(n-n')} T(n, t | n' | t')$$

с фиксированными n' и t' .

Мы производим суммирование от $n = n'$ до бесконечности, принимая во внимание, что $T(n, t | n', t') = 0$ при $n < n'$.

Это условие есть прямое следствие того факта, что скачки только увеличивают число $N(t)$.

Подставляя характеристическую функцию в основное уравнение, получаем

$$\frac{\partial}{\partial t} G(k, t) = \gamma [e^{ik} - 1] G(k, t)$$

откуда непосредственно следует решение

$$G(k, t) = \exp [\gamma (t - t') (e^{ik} - 1)]$$

где мы используем начальное условие $G(k, t = t') = 1$, которое, в свою очередь, следует из $T(n, t' | n', t') = \delta_{nn'}$.

При сравнении разложения в ряд Тейлора характеристической функции

$$G(k, t) = \sum_{n=0}^{\infty} e^{ikn} \frac{[\gamma (t - t')]^n}{n!} e^{-\gamma(t-t')} = \sum_{n=n'}^{\infty} e^{ik(n-n')} \frac{[\gamma (t - t')]^{(n-n')}}{(n - n')!} e^{-\gamma(t-t')}$$

с её определением сразу получаем пропагатора процесса Пуассона в виде

$$T(n, t | n', t') = \frac{[\gamma (t - t')]^{(n-n')}}{(n - n')!} e^{-\gamma(t-t')}, \quad n \geq n'$$

Ожидаемо, процесс однороден во времени, а также однороден и в пространстве, в том смысле, что $T(n, t | n', t')$ зависит только от разности $n - n'$.

Соответствующее распределение вероятности $P(n, t) = T(n, t | 0, 0)$ есть

$$P(n, t) = \frac{(\gamma t)^n}{n!} e^{-\gamma t}, \quad n \geq 0$$

и оно представляет собой распределение Пуассона с равными математическим ожиданием (средним значением) и дисперсией:

$$\bar{n} \equiv \langle n \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} n P(n, t) = \gamma t, \quad \overline{(n - \bar{n})^2} = \langle (n - \bar{n})^2 \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} (n - \bar{n})^2 P(n, t) = \gamma t$$

Для этого распределения $P(n, t) = \frac{\bar{n}^n}{n!} e^{-\bar{n}}$ можно легко показать прямым вычислением, что $\langle (n - \bar{n})^2 \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} n^2 \frac{\bar{n}^n}{n!} e^{-\bar{n}} - \bar{n}^2 = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{n \bar{n}^n}{(n-1)!} e^{-\bar{n}} - \bar{n}^2 = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\bar{n}^n}{(n-1)!} e^{-\bar{n}} + \sum_{n=2}^{\infty} \frac{\bar{n}^n}{(n-2)!} e^{-\bar{n}} -$

$\bar{n}^2 = \bar{n}e^{-\bar{n}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\bar{n}^n}{n!} + \bar{n}^2 e^{-\bar{n}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\bar{n}^n}{n!} - \bar{n}^2 \equiv \bar{n}$ Вычислим также двухвременную корреляционную функцию, определенную как

$$\langle N(t)N(t') \rangle = \langle N(t')N(t) \rangle = \sum_{n_1, n_2} n_2 n_1 T(n_2, t | n_1, t') T(n_1, t' | 0, 0)$$

где во второй строчке мы допускаем без ограничения общности, что $t \geq t'$. Дифференцируя по t и применяя основное уравнение, мы находим, что

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \langle N(t)N(t') \rangle &= \gamma \sum_{n_1, n_2} [n_2 T(n_2 - 1, t | n_1, t') - n_2 T(n_2, t | n_1, t')] n_1 T(n_1, t' | 0, 0) = \\ &= \gamma \sum_{n_1, n_2} n_1 T(n_2, t | n_1, t') T(n_1, t' | 0, 0) = \gamma \sum_{n_1} n_1 T(n_1, t' | 0, 0) = \gamma \langle N(t') \rangle = \gamma^2 t' \end{aligned}$$

На втором шаге мы сделали сдвиг $n_2 \rightarrow n_2 + 1$ переменной суммирования n_2 В члене прихода основного уравнения.

Тогда с использованием начального условия $\langle N(t')N(t') \rangle = \gamma^2 t'^2 + \gamma t'$ мы находим следующее выражение для двухвременной корреляционной функции однородного процесса Пуассона: $\langle N(t)N(t') \rangle = \gamma^2 t t' + \gamma t'$.

Мы могли бы рассмотреть отдельное уравнение для вероятностей $\frac{d}{dt}P(n, t) = \gamma\{P(n-1, t) - P(n, t)\}$.

Производящая функция $P(z, t) = \sum_{n=0}^{\infty} z^n P(n, t)$ подчиняется уравнению $\frac{\partial P}{\partial t} = \gamma(z-1)P \rightarrow P(z, t) = e^{(z-1)\gamma t} P(z, 0)$.

Если начальное распределение $P(n, 0) = \delta_{n,0}$, то получаем пуассоновское распределение $P(n, t) = \frac{(\gamma t)^n}{n!} e^{-\gamma t}$.

алгоритм метрополиса

Алгоритм Метрополиса -Представим себе, что у нас есть функция распределения случайных величин $P(x)$.

Хочется построить алгоритм, который давал бы последовательность случайных величин, соответствующих данному распределению.

- Иными словами, предлагается построить генератор случайных чисел, который бы генерировал случайные числа, распределенные согласно $P(x)$.

пример: зависимость намагниченности от температуры в одномерной модели Изинга

Методом Монте-Карло найти зависимость намагниченности от температуры в одномерной модели Изинга.

Сравнить полученные данные с аналитическим решением этой модели.

пуассоновский случайный процесс: решение

Пропагатор пуассоновского случайного процесса удовлетворяет уравнению:

$$\partial_t T(n, t | n', t') = \gamma T(n-1, t | n', t') - \gamma T(n, t | n', t')$$

В качестве n может выступать, например, число излученных фотонов при эмиссии.

Решить уравнение.

пуассоновский случайный процесс: построение (?)

Численно построить соответствующий Пуассоновский случайный процесс $N(t)$.

[Петруччионе Ф., Бройер Х.-П., Теория открытых квантовых систем. М.-Ижевск: 2010. Глава 1]

Examples (???)

(основные примеры уже встроены в соответствующие главы, тут чисто ради пояснения вставим)

B.3 Other Mathematics**B.3.1 PDE for Kinetics**

(????)

B.3.2 Some Special Functions

(??? which are needed in kinetics?? I can't say just right now)

полиномы Сонина

полиномы Сонина нужны в приближенном решении кинетического уравнения. Эти функции определяются формулой

$$S_r^s(x) = \frac{1}{s!} e^x x^{-r} \frac{d^s}{dx^s} e^{-x} x^{r+s}$$

...

преобразование интегралов**взятие интеграла методом перевала****B.3.3 Path Integral for Kinetics (???)**

(указание этих методов будет, мало ли, иногда будет он нужен.)

C Some Physics for Kinetics

(I don't know what to write here, but I am assured that I'll find some physics that I would like to write here)

(maybe some approaches from classical mechanics? but it will be in the second part already...)

(maybe some scattering from QM, some Fermi golden rules?)

(maybe some electrodynamics for a background??)

(?? or hydrodynamics, to explain better connection with kinetics? but there will be a section about it in main theory...)

D Modeling in Kinetics

Моделирование - одно из самых вдохновляющих, что есть в кинетике.

(this is a very important appendix)

обсудим, как это моделировать, ибо на самом деле очень интересно смотреть на различные хаотические анимации.

D.1 Methods of Modelings

(some relevant programming methods)

D.2 Examples of Modelings

(??? I'll collect examples later)

D.2.1 Modeling of Diffusion

(most typical modeling)

D.2.2 Modeling of Reaction Diffusion

(most typical modeling)

D.2.3 Overview of Artistic Modeling Using Kinetics (???)

(???? explain some beautiful animations and pictures...)

E Bibliography

References

- [1] Daniel Arovas. Lecture notes on condensed matter physics, chapter 1 boltzmann transport. *Department of Physics, University of California, San Diego*, page 46, 2010.
- [2] Daniel Arovas. Lecture notes on nonequilibrium statistical physics. 2018.
- [3] Jean-Pierre Hansen and Ian R McDonald. *Theory of simple liquids*. Elsevier, 1990.
- [4] Gordei B Lesovik and Ivan A Sadovskyy. Scattering matrix approach to the description of quantum electron transport. *Physics-Uspekhi*, 54(10):1007–1059, Oct 2011.
- [5] Максимов Л. А. and Полищук И. Я. *Лекции по физической кинетике: Учебное пособие*. М.: МФТИ, 2007.
- [6] Алексей Алексеевич Абрикосов. *Основы теории металлов*. Физматлит, 2010.
- [7] Н Н Боголюбов. *Избранные труды по статистической физике*. МГУ, 1979.
- [8] С.Н. Бурмистров. *Задачи по физической кинетике: Учебное пособие*. Долгопрудный: Издательский Дом Интеллект, 2016.
- [9] Колоколов И. В. Лекции и семинары по курсу “Физическая кинетика и стохастические процессы”.
- [10] В.Н.Глазков. Заметки к лекциям по общей физике. 2018.
- [11] А В Шитов Л С Левитов. *Функция Грина Задачи и Решения*.
- [12] Л Д Ландау and Е М Лифшиц. Теоретическая физика (Том 9. Статистическая физика. Часть 2). *книга*, 2004.
- [13] ЛД Ландау and ЕМ Лифшиц. Теоретическая физика. Том v. Статистическая физика, часть 1. *книга*, 1976.
- [14] ЛД Ландау, ЕМ Лифшиц, and ЛП Питаевский. Теоретическая физика. Том X. Физическая кинетика. 2002.
- [15] В.В Лебедев. Флуктуационные эффекты в макрофизике, курс лекций, 2004.
- [16] Э.Е.Сон. Лекции по физической механике. 2010.

Lietrature from book by Kolokolov, Obrazovsky, Podvilov

- [1] Ахиезер А. И., Пелетминский С. В. Методы статистической физики. М.: Наука, 1977.
- [2] Беленичер В. И. Физическая кинетика. Лекции для магистрантов. Новосибирск: НГУ, 1995.
- [3] Гросберг А. Ю., Хохлов А. Р. Статистическая физика полимеров. М.: Наука, 1989.
- [4] Дой М., Эдвардс С. Динамическая теория полимеров. М.: Мир, 1998.
- [5] Захаров В. Е., Кузнецов Е. А. Гамильтоновский формализм для нелинейных волн //УФН. 1997. Т. 167, С. 1137.
- [6] Ильин А. В., Максимов Л. А., Цымбаленко В. Л. Теория чайника. Кинетика кипения

чистой жидкости в поле тяжести // ЖЭТФ, 1993, Т. 103, В. 6, С. 2039.

- [7] Коган Ю. О кинетике кипения чистой жидкости // Журнал физической химии, 1960, Т. 34, № 1, С. 92.
- [8] Лебедев В. В. Флуктуационные эффекты в макрофизике. М.: МЦНМО, 2004.
- [9] Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П. Физическая кинетика. М.: Наука, 1979.
- [10] Львов В. С. Лекции по волновой и гидродинамической турбулентности. Новосибирск: НГУ, 1978.
- [11] Паташинский А. З., Покровский В. Л. Флуктуационная теория фазовых переходов. М.: Наука, 1982.
- [12] Рубаков В. А. Классические калибровочные поля. М.: Эдиториал УРСС, 1999.
- [13] Сликтер Ч. Основы теории магнитного резонанса. М.: Мир, 1981.
- [14] Спитцер Л., мл. Динамическая эволюция шаровых скоплений, М.: Мир, 1990.
- [15] Фриш У. Турбулентность. Наследие А. Н. Колмогорова. М.: ФАЗИС, 1998.
- [16] Bergmann G. Weak localization in thin films // Phys. Reports, 1984, Vol. 107, № 1. P. 1.
- [17] Chertkov M., Connoughton C., Kolokolov I., Lebedev V., Dynamics of energy condensation in two-dimensional turbulence // Physical Review Letters. 2007. Vol. 99, 084501.
- [18] Mattis D. C., Glaser M. L. The uses of quantum field theory in diffusion-limited reactions // Rev. Mod. Phys. 1998. Vol. 70, № 3. P. 978.
- [19] Xia H., Punzmann H., Falkovich G., Shats M. G., TurbulenceCondensate Interaction in Two Dimensions // Physical Review Letters. 2008. Vol. 101, 194504.
- [20] Zacharov V. E., L'vov V. S, Falkovich G. Kolmogorov Spectra of Turbulence I. Wave Turbulence. Springer Verlag, 1992.

Bibliography from “Exact solutions for the statistics of extrema of some random 1D landscapes, Application to the equilibrium and the dynamics of the toy model” by Pierre Le Doussal Cécile Monthus

References

- [1] D.S. Fisher and D.A. Huse, Phys. Rev. B **38** 373 (1988) ; Phys. Rev. B **38** 386 (1988).
- [2] M. Mezard, G. Parisi and M. Virasoro, “Spin glass theory and beyond" world Scientific, Singapore (1987).
- [3] D.S. Fisher, P. Le Doussal and C. Monthus, cond-mat/9710270, Phys. Rev. Lett. **80** 3539 (1998).
- [4] P. Le Doussal, C. Monthus and D. S. Fisher cond-mat/9811300, Phys. Rev. E. **59** 4795 (1999).
- [5] Y. G. Sinai Theor. Probab. Its Appl. **27** 247 (1982).
- [6] H. Kesten, M. Koslov, F. Spitzer, Compos. Math. **30** 145 (1975); H. Kesten, Physica **138** A 299 (1986).
- [7] B. Derrida, J. Stat. Phys. **31** 433 (1983).
- [8] J. P. Bouchaud, A. Comtet, A. Georges, P. Le Doussal Europhys. Lett. **3** 653 (1987), Ann Phys. **201** 285 (1990).
- [9] D.S. Fisher, P. Le Doussal, C. Monthus, cond-mat/0012290, Phys. Rev. E. (2001).
- [10] P. Le Doussal, C. Monthus cond-mat/ Phys. Rev. E. reaction diffusion

- [11] C. Dasgupta and S.K. Ma Phys. Rev. B **22** 1305 (1980).
- [12] D.S. Fisher, Phys. Rev. B **50** 3799 (1994). D.S. Fisher, Phys. Rev. B **51** 6411 (1995).
- [13] A.J. Bray, B. Derrida and C. Godreche Europhys. Lett. **27** 175 (1994). A.D. Rutenberg and A.J. Bray Phys. Rev. E **50** 1900 (1994). A.J. Bray and B. Derrida Phys. Rev. E **51** R1633 (1995). B. Derrida, C. Godreche and I. Yekutieli Europhys. Lett. **12** 385 (1990) and Phys. Rev. A **44** 6241 (1991).
- [14] J. Villain, B. Semeria, F. Lancon and L. Billard, J. Phys. C **16** 6153 (1983).
- [15] J. Villain, J. Phys. A: Math. Gen. **21** L1099 (1988).
- [16] J. Villain and B. Semeria, J. Phys. Lett. **44** L889 (1983).
- [17] A. I. Larkin Sov. Phys. JETP **31** 784 (1970).
- [18] U. Schulz, J. Villain, E. Brezin and H. Orland, J. Stat. Phys. **51** 1 (1988).
- [19] D.S. Fisher and D.A. Huse, Phys. Rev. B **43** 10728 (1991).
- [20] T. Hwa and D.S. Fisher, Phys. Rev. B **49** 3136 (1994).
- [21] M. Mezard and G. Parisi, J. Phys. I **1** 809 (1991).
- [22] M. Mezard and G. Parisi, J. Phys. I **2** 2231 (1992).
- [23] G. Parisi, J. Phys. (France) **51** 1595 (1990).
- [24] J.P. Bouchaud and H. Orland, J. Stat. Phys. **61** 877 (1990).
- [25] M. Mezard, J. Phys. (France) **51** 1831 (1990).
- [26] M. Prahofer and H. Spohn, mathCO/9903134.
- [27] J. M. Burgers, "The nonlinear diffusion equation", Reidel (1974).
- [28] L. Frachebourg and Ph. A. Martin, cond-mat/9905056.
- [29] M. Kardar, G. Parisi and Y.C. Zhang, Phys. Rev. Lett. **56** 889 (1986).
- [30] S. Esipov and T.J. Newman, Phys. Rev. E **48** 1046 (1993) ; S. Esipov, Phys. Rev. E **49** 2070 (1994).
- [31] A. Engel, Nucl. Phys. B **410** 617 (1993).
- [32] A. Cavagna, J. P. Garrahan, I. Giardinà cond-mat/9812373, Phys. Rev. E, **59**, 2808 (1999).
- [33] A. Prevost, E. Rolley and C. Guthmann, Phys. Rev. Lett. **83** (1999) 348 and Phys. Rev. B **65** (2002) 064517. S. Moulinet, C. Guthmann and E. Rolley, in preparation (to be submitted to EPJ B).
- [34] D. Carpentier and P. Le Doussal Physical Review E **63** 026110 (2001).
- [35] H. Castillo and P. Le Doussal Phys. Rev. Lett. **86** 4859 (2001).
- [36] J. L. Gervais and A. Neveu Nucl. Phys. B **199** 59 (1982).
- [37] P. Groeneboom, Prob. Th. Rel. Fields **81** 79 (1989).
- [38] V. Dotsenko and M. Mezard, cond-mat/9611017.
- [39] P. Le Doussal and C. Monthus, in preparation.

From Nonequilibrium dynamics of closed interacting quantum systems

References

- [Allahverdyan and Nieuwenhuizen(2002)] Allahverdyan, A. E., and T. M. Nieuwenhuizen, 2002, *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications* **305**, 542.
- [Allahverdyan and Nieuwenhuizen(2005)] Allahverdyan, A. E., and T. M. Nieuwenhuizen, 2005, *Phys. Rev. E* **71**, 046107.
- [Altland *et al.*(2009)Altland, Gurarie, Kriecherbauer, and Polkovnikov] Altland, A., V. Gurarie, T. Kriecherbauer, and A. Polkovnikov, 2009, *Phys. Rev. A* **79**, 042703.
- [Altshuler *et al.*(1997)Altshuler, Gefen, Kamenev, and Levitov] Altshuler, B. L., Y. Gefen, A. Kamenev, and L. S. Levitov, 1997, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 2803.
- [Anderson(1958)] Anderson, P. W., 1958, *Phys. Rev.* **109**, 1492.
- [Appel *et al.*(2009)Appel, Windpassinger, Oblak, Hoff, Kjaergaard, and Polzik] Appel, J., P. J. Windpassinger, D. Oblak, U. B. Hoff, N. Kjaergaard, and E. S. Polzik, 2009, *PNAS* **106**, 10960.
- [Babadi *et al.*(2009)Babadi, Pekker, Sensarma, Georges, and Demler] Babadi, M., D. Pekker, R. Sensarma, A. Georges, and E. Demler, 2009, arXiv:0908.3483 .
- [Balian(1991)] Balian, R., 1991, *From Microphysics to Macrophysics* (Springer, Berlin, Heidelberg).
- [Barankov and Polkovnikov(2008)] Barankov, R., and A. Polkovnikov, 2008, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 076801.
- [Barmettler *et al.*(2009)Barmettler, Punk, Gritsev, Demler, and Altman] Barmettler, P., M. Punk, V. Gritsev, E. Demler, and E. Altman, 2009, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 130603.
- [Barouch *et al.*(1970)Barouch, McCoy, and Dresden] Barouch, E., B. M. McCoy, and M. Dresden, 1970, *Phys. Rev. A* **2**, 1075.
- [Barthel and Schollwöck(2008)] Barthel, T., and U. Schollwöck, 2008, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 100601.
- [Basko *et al.*(2006)Basko, Aleiner, and Altshuler] Basko, D. M., I. L. Aleiner, and B. L. Altshuler, 2006, *Ann. Phys. (NY)* **321**, 1126.
- [Bermudez *et al.*(2009)Bermudez, Patanè, Amico, and Martin-Delgado] Bermudez, A., D. Patanè, L. Amico, and M. A. Martin-Delgado, 2009, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 135702.
- [Biroli *et al.*(2010)Biroli, Cugliandolo, and Sicilia] Biroli, G., L. F. Cugliandolo, and A. Sicilia, 2010, *Phys. Rev. E* **81**, 050101.
- [Blakie *et al.*(2008)Blakie, Bradley, Davis, Ballagh, and Gardiner] Blakie, P. B., A. S. Bradley, M. J. Davis, R. J. Ballagh, and C. W. Gardiner, 2008, *Advances in Physics* **57**, 363.
- [Bloch *et al.*(2008)Bloch, Dalibard, and Zwerger] Bloch, I., J. Dalibard, and W. Zwerger, 2008, *Reviews of Modern Physics* **80**, 885.

- [Boksenbojm *et al.*(2010)Boksenbojm, Wynants, and Jarzynski] Boksenbojm, E., B. Wynants, and C. Jarzynski, 2010, *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications* **389**, 4406.
- [Burkov *et al.*(2007)Burkov, Lukin, and Demler] Burkov, A. A., M. D. Lukin, and E. Demler, 2007, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 200404.
- [Calabrese and Cardy(2004)] Calabrese, P., and J. Cardy, 2004, *J. Stat. Mech.* , P06002.
- [Calabrese and Cardy(2005)] Calabrese, P., and J. Cardy, 2005, *J. Stat. Mech.* , P04010.
- [Calabrese and Cardy(2007)] Calabrese, P., and J. Cardy, 2007, *J. Stat. Mech: Th. and Exp.* , P06008.
- [Campbell *et al.*(2005)Campbell, Rosenau, and Zaslavsky] Campbell, D. K., P. Rosenau, and G. Zaslavsky, 2005, *Chaos* **15**, 015101.
- [Caneva *et al.*(2007)Caneva, Fazio, and Santoro] Caneva, T., R. Fazio, and G. E. Santoro, 2007, *Phys. Rev. B* **76**, 144427.
- [Canovi *et al.*(2011)Canovi, Rossini, Fazio, Santoro, and Silva] Canovi, E., D. Rossini, R. Fazio, G. Santoro, and A. Silva, 2011, *Phys. Rev. B* **83**, 094431.
- [Cassidy *et al.*(2011)Cassidy, Clark, and Rigol] Cassidy, A. C., C. W. Clark, and M. Rigol, 2011, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 140405.
- [Caux and Mossel(2011)] Caux, J.-S., and J. Mossel, 2011, *J. Stat. Mech.* , P02023.
- [Cazalilla(2006)] Cazalilla, M. A., 2006, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 156403.
- [Chaikin and Lubensky(1995)] Chaikin, P. M., and T. C. Lubensky, 1995, *Principles of condensed matter physics* (Cambridge Univesrity Press, Cambridge).
- [Chang *et al.*(2008)Chang, Gritsev, Morigi, Vuletić, Lukin, and Demler] Chang, D. E., V. Gritsev, G. Morigi, V. Vuletić, M. D. Lukin, and E. A. Demler, 2008, *Nature Phys.* **4**, 884.
- [Chang *et al.*(2005)Chang, Qin, Zhang, You, and Chapman] Chang, M. S., Q. S. Qin, W. X. Zhang, L. You, and M. S. Chapman, 2005, *Nature Phys.* **1**, 111.
- [Cherng and Levitov(2006)] Cherng, R. W., and L. S. Levitov, 2006, *Phys. Rev. A* **73**, 043614.
- [Chuang *et al.*(1991)Chuang, Durrer, Turok, and Yurke] Chuang, I., R. Durrer, N. Turok, and B. Yurke, 1991, *Science* **251**, 1336.
- [Cincio *et al.*(2007)Cincio, Dziarmaga, Rams, and Zurek] Cincio, L., J. Dziarmaga, M. M. Rams, and W. H. Zurek, 2007, *Phys. Rev. A* **75**, 052321.
- [Collura and Karevski(2010)] Collura, M., and D. Karevski, 2010, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 200601.
- [Cramer *et al.*(2008)Cramer, Dawson, Eisert, and Osborne] Cramer, M., C. M. Dawson, J. Eisert, and T. J. Osborne, 2008, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 030602.
- [Cramer and Eisert(2010)] Cramer, M., and J. Eisert, 2010, *New J. Phys.* **12**, 055020.
- [Cucchietti *et al.*(2007)Cucchietti, Damski, Dziarmaga, and Zurek] Cucchietti, F. M., B. Damski, J. Dziarmaga, and W. H. Zurek, 2007, *Phys. Rev. A* **75**, 023603.

- [Damski and Zurek(2006)] Damski, B., and W. H. Zurek, 2006, Phys. Rev. A **73**(6), 063405.
- [De Grandi *et al.*(2008)De Grandi, Barankov, and Polkovnikov] De Grandi, C., R. A. Barankov, and A. Polkovnikov, 2008, Phys. Rev. Lett. **101**(23), 230402.
- [De Grandi *et al.*(2010a)De Grandi, Gritsev, and Polkovnikov] De Grandi, C., V. Gritsev, and A. Polkovnikov, 2010a, Phys. Rev. B **81**, 012303.
- [De Grandi *et al.*(2010b)De Grandi, Gritsev, and Polkovnikov] De Grandi, C., V. Gritsev, and A. Polkovnikov, 2010b, Phys. Rev. B **81**, 224301.
- [De Grandi and Polkovnikov(2010)] De Grandi, C., and A. Polkovnikov, 2010, Lect. Notes in Phys. **802**, 75.
- [Deng *et al.*(2008)Deng, Ortiz, and Viola] Deng, S., G. Ortiz, and L. Viola, 2008, Europhys. Lett. **84**, 67008.
- [Deutsch(1991)] Deutsch, J., 1991, Phys. Rev. A **43**, 2046.
- [Divakaran *et al.*(2008)Divakaran, Dutta, and Sen] Divakaran, U., A. Dutta, and D. Sen, 2008, Phys. Rev. B **78**, 144301.
- [Divakaran *et al.*(2010)Divakaran, Dutta, and Sen] Divakaran, U., A. Dutta, and D. Sen, 2010, Phys. Rev. B **81**(5), 054306.
- [Dóra *et al.*(2010)Dóra, Castro, and Moessner] Dóra, B., E. V. Castro, and R. Moessner, 2010, Phys. Rev. B **82**, 125441.
- [Dóra and Moessner(2010)] Dóra, B., and R. Moessner, 2010, Phys. Rev. B **81**, 165431.
- [Ducci *et al.*(1999)Ducci, Ramazza, González-Viñas, and Arecchi] Ducci, S., P. L. Ramazza, W. González-Viñas, and F. T. Arecchi, 1999, Phys. Rev. Lett. **83**, 5210.
- [Dziarmaga(2005)] Dziarmaga, J., 2005, Phys. Rev. Lett. **95**, 245701.
- [Dziarmaga(2006)] Dziarmaga, J., 2006, Phys. Rev. B **74**, 064416.
- [Dziarmaga(2010)] Dziarmaga, J., 2010, Adv. in Phys. **59**, 1063.
- [Dziarmaga *et al.*(2008)Dziarmaga, Meisner, and Zurek] Dziarmaga, J., J. Meisner, and W. Zurek, 2008, Phys. Rev. Lett. **101**, 115701.
- [Dziarmaga and Rams(2010)] Dziarmaga, J., and M. M. Rams, 2010, New J. of Phys. **12**, 055007.
- [Eckstein and Kollar(2008)] Eckstein, M., and M. Kollar, 2008, Phys. Rev. Lett. **100**, 120404.
- [Eckstein and Kollar(2010)] Eckstein, M., and M. Kollar, 2010, New J. of Phys. **12**, 055012.
- [Estève *et al.*(2008)Estève, Gross, Weller, Giovanazzi, and Oberthaler] Estève, J., C. Gross, A. Weller, S. Giovanazzi, and M. K. Oberthaler, 2008, Nature **455**, 1216.
- [Farhi *et al.*(2001)Farhi, Goldstone, Gutmann, Lapan, Lundgren, and Preda] Farhi, E., J. Goldstone, S. Gutmann, J. Lapan, A. Lundgren, and D. Preda, 2001, Science **292**, 472.

- [Fermi *et al.*(May 1955)Fermi, Pasta, and Ulam] Fermi, E., J. Pasta, and S. Ulam, May 1955, Document LA-1940 .
- [Fioretto and Mussardo(2010)] Fioretto, D., and G. Mussardo, 2010, New J. of Phys. **12**, 055015.
- [Fisher(1995)] Fisher, D. S., 1995, Phys. Rev. B **51**, 6411.
- [Flesch *et al.*(2008)Flesch, Cramer, McCulloch, Schollwoeck, and Eisert] Flesch, A., M. Cramer, I. McCulloch, U. Schollwoeck, and J. Eisert, 2008, Phys. Rev. A **78**, 033608.
- [Fubini *et al.*(2007)Fubini, Falci, and Osterloh] Fubini, A., G. Falci, and A. Osterloh, 2007, New J. Phys. **9**, 134.
- [Gangardt and Pustilnik(2008)] Gangardt, D. M., and M. Pustilnik, 2008, Phys. Rev. A **77**, 041604(R).
- [Gardiner and Zoller(2004)] Gardiner, C., and P. Zoller, 2004, *Quantum Noise* (Springer-Verlag, Berlin Heidelberg), third edition.
- [Gasenzer(2009)] Gasenzer, T., 2009, European Physical Journal - Special Topics **168**, 89.
- [Ghoshal and Zamolodchikov(1994)] Ghoshal, S., and A. B. Zamolodchikov, 1994, Int. J. Mod. Phys. A **9**, 3841.
- [Girardeau(1969)] Girardeau, M. D., 1969, Phys. Lett. **30A**, 442.
- [Girardeau(1970)] Girardeau, M. D., 1970, Phys. Lett. **32A**, 67.
- [Gogolin *et al.*(2011)Gogolin, M ller, and Eisert] Gogolin, C., M. P. M ller, and J. Eisert, 2011, Phys. Rev. Lett. **106**, 040401.
- [Goldstein *et al.*(2010)Goldstein, Lebowitz, Tumulka, and Zanghi] Goldstein, S., J. L. Lebowitz, R. Tumulka, and N. Zanghi, 2010, European Phys. J. **H 35**, 173.
- [Greentree *et al.*(2006)Greentree, Tahan, Cole, and Hollenberg] Greentree, A. D., C. Tahan, J. H. Cole, and L. C. L. Hollenberg, 2006, Nature Phys. **2**, 856.
- [Greiner *et al.*(2002a)Greiner, Mandel, Esslinger, Hänsch, and Bloch] Greiner, M., O. Mandel, T. Esslinger, T. W. Hänsch, and I. Bloch, 2002a, Nature **415**, 39.
- [Greiner *et al.*(2002b)Greiner, Mandel, Hansch, and Bloch] Greiner, M., O. Mandel, T. W. Hansch, and I. Bloch, 2002b, Nature **419**, 51.
- [Gritsev *et al.*(2007)Gritsev, Demler, Lukin, and Polkovnikov] Gritsev, V., E. Demler, E. Lukin, and A. Polkovnikov, 2007, Phys. Rev. Lett. **99**, 200404.
- [Gritsev and Polkovnikov(2010)] Gritsev, V., and A. Polkovnikov, 2010, in *Understanding Quantum Phase Transitions*, edited by L. Carr (Taylor & Francis, Boca Raton).
- [Gu and Lin(2009)] Gu, S.-J., and H.-Q. Lin, 2009, Europhys. Lett. **87**, 10003.
- [Gurarie(1995)] Gurarie, V., 1995, Nucl. Phys. B **441**, 569.
- [Hillery *et al.*(1984)Hillery, O'Connell, Scully, and Wigner] Hillery, M. A., R. F. O'Connell, M. O. Scully, and E. P. Wigner, 1984, Phys. Rep. **106**, 121.

- [Hindmarsh and Rajantie(2000)] Hindmarsh, M., and A. Rajantie, 2000, Phys. Rev. Lett. **85**, 4660.
- [Ho(1998)] Ho, T. L., 1998, Phys. Rev. Lett. **81**, 742.
- [Hofferberth *et al.*(2007)Hofferberth, Lesanovsky, Fischer, Schumm, and Schmiedmayer] Hofferberth, S., I. Lesanovsky, B. Fischer, T. Schumm, and J. Schmiedmayer, 2007, Nature **449**, 324.
- [Imry(1997)] Imry, Y., 1997, *Introduction to mesoscopic physics* (Oxford University Press).
- [Itin and Törmä(2009a)] Itin, A., and P. Törmä, 2009a, arXiv:0901.4778 .
- [Itin and Törmä(2009b)] Itin, A. P., and P. Törmä, 2009b, Phys. Rev. A **79**, 055602.
- [Iucci and Cazalilla(2009)] Iucci, A., and M. A. Cazalilla, 2009, Phys. Rev. A **80**, 063619.
- [Izrailev and Chirikov(1966)] Izrailev, F. M., and B. V. Chirikov, 1966, Soviet Physics Doklady **11**, 32.
- [Jaynes(1957)] Jaynes, E., 1957, Phys. Rev. **106**, 620.
- [Jo *et al.*(2009)Jo, Lee, Choi, Christensen, Kim, Thywissen, Pritchard, and Ketterle] Jo, G.-B., Y. R. Lee, J.-H. Choi, C. A. Christensen, T. H. Kim, J. H. Thywissen, D. E. Pritchard, and W. Ketterle, 2009, Science **325**, 1521.
- [Kamenev and Levchenko(2009)] Kamenev, A., and A. Levchenko, 2009, Advances in Physics **58**, 197.
- [Kardar(2007)] Kardar, M., 2007, *Statistical Physics of Particles* (Cambridge University Press).
- [Kibble(2007)] Kibble, T., 2007, Physics Today **60**, 47.
- [Kibble(1976)] Kibble, T. W. B., 1976, J. Phys. A **9**, 1387.
- [Kiegel(2009)] Kiegel, C., 2009, *Diploma Thesis: Semiclassical approach to driven many-particle systems* (Institute for Theoretical Physics, University of Cologne, Germany).
- [Kinoshita *et al.*(2006)Kinoshita, Wenger, and Weiss] Kinoshita, T., T. Wenger, and D. S. Weiss, 2006, Nature **440**, 900.
- [Klempt *et al.*(2010)Klempt, Topic, Gebreyesus, Scherer, Henninger, Hyllus, Ertmer, Santos, and Arlt] Klempt, C., O. Topic, G. Gebreyesus, M. Scherer, T. Henninger, P. Hyllus, W. Ertmer, L. Santos, and J. J. Arlt, 2010, Phys. Rev. Lett. **104**, 195303.
- [Klich and Levitov(2009)] Klich, I., and L. Levitov, 2009, Phys. Rev. Lett. **102**, 100502.
- [Klich *et al.*(2006)Klich, Refael, and Silva] Klich, I., G. Refael, and A. Silva, 2006, Phys. Rev. A **74**, 032306.
- [Kollar and Eckstein(2008)] Kollar, M., and M. Eckstein, 2008, Phys. Rev. A **78**, 013626.
- [Kollath *et al.*(2007)Kollath, Läuchli, and Altman] Kollath, C., A. M. Läuchli, and E. Altman, 2007, Phys. Rev. Lett. **98**, 180601.
- [Krapivsky(2010)] Krapivsky, P. L., 2010, J. of Stat. Mech.: Theor. and Experiment , P02014.

- [Kronjäger *et al.*(2005)] Kronjäger, Becker, Brinkmann, Walser, Navez, Bongs, and Sengstock] Kronjäger, J., C. Becker, M. Brinkmann, R. Walser, P. Navez, K. Bongs, and K. Sengstock, 2005, Phys. Rev. A **72**, 063619.
- [Laguna and Zurek(1997)] Laguna, P., and W. H. Zurek, 1997, Phys. Rev. Lett. **78**, 2519.
- [Lamacraft(2007)] Lamacraft, A., 2007, Phys. Rev. Lett. **98**, 160404.
- [Landau(1932)] Landau, L., 1932, Phys. Z. Sowjetunion **1**, 88.
- [Landau and Lifshitz(1981)] Landau, L., and E. Lifshitz, 1981, *Quantum Mechanics: Non-Relativistic Theory, Vol. 3* (Butterworth-Heinemann, Oxford, UK).
- [Landau and Lifshitz(1982)] Landau, L., and E. Lifshitz, 1982, *Mechanics: Course of Theoretical Physics Vol. 1* (Butterworth-Heinemann, Oxford, UK).
- [Landau and Lifshitz(1980)] Landau, L. D., and E. M. Lifshitz, 1980, *Statistical Physics, Third Edition, Part 1: Volume 5* (Butterworth-Heinemann, Oxford, UK).
- [Leitner and Wolynes(1996)] Leitner, D. M., and P. G. Wolynes, 1996, Phys. Rev. Lett. **76**, 216.
- [Leroux *et al.*(2010)] Leroux, Schleier-Smith, and Vuletić] Leroux, I. D., M. H. Schleier-Smith, and V. Vuletić, 2010, Phys. Rev. Lett. **104**, 073602.
- [Lignier *et al.*(2007)] Lignier, Sias, Ciampini, Singh, Zenesini, Morsch, and Arimondo] Lignier, H., C. Sias, D. Ciampini, Y. Singh, A. Zenesini, O. Morsch, and E. Arimondo, 2007, Phys. Rev. Lett. **99**, 220403.
- [Linden *et al.*(2009)] Linden, Popescu, Short, and Winter] Linden, N., S. Popescu, A. Short, and A. Winter, 2009, Phys. Rev. E **79**, 061103.
- [Logan and Wolynes(1990)] Logan, D. E., and P. G. Wolynes, 1990, J. Chem. Phys. **93**, 4994.
- [Luo *et al.*(2007)] Luo, Clancy, Joseph, Kinast, and Thomas] Luo, L., B. Clancy, J. Joseph, J. Kinast, and J. E. Thomas, 2007, Phys. Rev. Lett. **98**, 080402.
- [Majorana(1932)] Majorana, E., 1932, Nuovo Cimento **9**, 43.
- [Maniv *et al.*(2003)] Maniv, Polturak, and Koren] Maniv, A., E. Polturak, and G. Koren, 2003, Phys. Rev. Lett. **91**, 197001.
- [Manmana *et al.*(2007)] Manmana, Wessel, Noack, and Muramatsu] Manmana, S. R., S. Wessel, R. M. Noack, and A. Muramatsu, 2007, Phys. Rev. Lett. **98**, 210405.
- [Mathey and Polkovnikov(2010)] Mathey, L., and A. Polkovnikov, 2010, Phys. Rev. A **81**, 033605.
- [Mazur(1968)] Mazur, P., 1968, Physica **43**, 533.
- [Meiser *et al.*(2008)] Meiser, Ye, and Holland] Meiser, D., J. Ye, and M. J. Holland, 2008, New J. of Phys. **10**, 073014.
- [Moeckel and Kehrein(2008)] Moeckel, M., and S. Kehrein, 2008, Phys. Rev. Lett. **100**, 175702.
- [Moeckel and Kehrein(2009)] Moeckel, M., and S. Kehrein, 2009, Ann. Phys. **324**, 2146.

- [Moeckel and Kehrein(2010)] Moeckel, M., and S. Kehrein, 2010, New J. of Phys. **12**, 055016.
- [Monaco *et al.*(2006)Monaco, Aaroe, Mygind, Rivers, and Koshelets] Monaco, R., M. Aaroe, J. Mygind, R. J. Rivers, and V. P. Koshelets, 2006, Phys. Rev. B **74**, 144513.
- [Monaco *et al.*(2002)Monaco, Mygind, and Rivers] Monaco, R., J. Mygind, and R. J. Rivers, 2002, Phys. Rev. Lett. **89**, 080603.
- [Monaco *et al.*(2009)Monaco, Mygrind, Rivers, and Koshelets] Monaco, R., J. Mygrind, R. J. Rivers, and V. P. Koshelets, 2009, Phys. Rev. B **80**, 180501.
- [Mondal *et al.*(2008)Mondal, Sen, and Sengupta] Mondal, S., D. Sen, and K. Sengupta, 2008, Phys. Rev. B **78**, 045101.
- [Mondal *et al.*(2009)Mondal, Sengupta, and Sen] Mondal, S., K. Sengupta, and D. Sen, 2009, Phys. Rev. B **79**, 045128.
- [Mostame *et al.*(2007)Mostame, Schaller, and Schu tzhold] Mostame, S., G. Schaller, and R. Schu tzhold, 2007, Phys. Rev. A **76**, 030304(R).
- [Mukerjee *et al.*(2006)Mukerjee, Oganessian, and Huse] Mukerjee, S., V. Oganessian, and D. Huse, 2006, Phys. Rev. B **73**, 035113.
- [Mukherjee *et al.*(2007)Mukherjee, Divakaran, Dutta, and Sen] Mukherjee, V., U. Divakaran, A. Dutta, and D. Sen, 2007, Phys. Rev. B **76**, 174303.
- [Mukherjee *et al.*(2008)Mukherjee, Dutta, and Sen] Mukherjee, V., A. Dutta, and D. Sen, 2008, Phys. Rev. B **77**, 214427.
- [Mussardo(2009)] Mussardo, G., 2009, *Statistical Field Theory. An Introduction to Exactly Solved Models in Statistical Physics* (Oxford University Press).
- [Neuenhahn and Marquardt(2010)] Neuenhahn, C., and F. Marquardt, 2010, arXiv:1007.5306 .
- [von Neumann(1929)] von Neumann, J., 1929, Z. Phys. **57**, 30.
- [Oganessian and Huse(2007)] Oganessian, V., and D. A. Huse, 2007, Phys. Rev. B **75**, 155111.
- [Ohmi and Machida(1998)] Ohmi, T., and K. Machida, 1998, J. Phys. Soc. Jpn. **67**, 1822.
- [Olshanii and Yurovsky(2009)] Olshanii, M., and V. Yurovsky, 2009, arXiv:0911.5587 .
- [Pal and Huse(2010)] Pal, A., and D. A. Huse, 2010, Phys. Rev. B **82**, 174411.
- [Peraan and Silva(2009)] Paraan, F. N. C., and A. Silva, 2009, Phys. Rev. E **80**, 061130.
- [Patanè *et al.*(2009a)Patanè, Amico, Silva, Fazio, and Santoro] Patanè, D., L. Amico, A. Silva, R. Fazio, and G. E. Santoro, 2009a, Phys. Rev. B **80**, 024302.
- [Patanè *et al.*(2008)Patanè, Silva, Amico, Fazio, and Santoro] Patanè, D., A. Silva, L. Amico, R. Fazio, and G. E. Santoro, 2008, Phys. Rev. Lett. **101**, 175701.
- [Patanè *et al.*(2009b)Patanè, Silva, Sols, and Amico] Patanè, D., A. Silva, F. Sols, and L. Amico, 2009b, Phys. Rev. Lett. **102**, 245701.
- [Pauli and Fierz(1937)] Pauli, W., and M. Fierz, 1937, Z. Phys. **106**, 572.

- [Peres(1984)] Peres, A., 1984, Phys. Rev. A **30**, 504.
- [Plimak *et al.*(2001)Plimak, Fleischhauer, Olsen, and Collett] Plimak, L. I., M. Fleischhauer, M. K. Olsen, and M. J. Collett, 2001, arXiv:cond-mat/0102483 .
- [Poilblanc *et al.*(1993)Poilblanc, Ziman, Bellissard, Mila, and Montambaux] Poilblanc, D., T. Ziman, J. Bellissard, F. Mila, and G. Montambaux, 1993, Europhys. Lett. **22** (7), 537.
- [Polkovnikov(2005)] Polkovnikov, A., 2005, Phys. Rev. B **72**, 161201(R).
- [Polkovnikov(2008a)] Polkovnikov, A., 2008a, Ann. of Phys. **326**, 486.
- [Polkovnikov(2008b)] Polkovnikov, A., 2008b, Phys. Rev. Lett. **101**, 220402.
- [Polkovnikov(2010)] Polkovnikov, A., 2010, Annals of Phys. **325**, 1790.
- [Polkovnikov and Gritsev(2008)] Polkovnikov, A., and V. Gritsev, 2008, Nat. Phys. **4**, 477.
- [Pollmann *et al.*(2010)Pollmann, Mukerjee, Green, and Moore] Pollmann, F., S. Mukerjee, A. G. Green, and J. E. Moore, 2010, Phys. Rev. E **81**, 020101.
- [Popescu *et al.*(2006)Popescu, Short, and Winter] Popescu, S., A. J. Short, and A. Winter, 2006, Nature Physics **2**, 745.
- [Porter *et al.*(2009)Porter, Zabusky, Hu, and Campbell] Porter, M., N. Zabusky, B. Hu, and D. Campbell, 2009, American Scientist **97**, 214.
- [Refael and Moore(2004)] Refael, G., and J. E. Moore, 2004, Phys. Rev. Lett. **93**, 260602.
- [Regal(2006)] Regal, S., 2006, experimental realization of BCS-BEC crossover physics with a Fermi gas of atoms, PhD. Thesis, University of Colorado, Boulder, 2006; C. Regal, D. S. Jin, arXiv:cond-mat/0601054.
- [Reimann(2008)] Reimann, P., 2008, Phys. Rev. Lett. **101**, 190403.
- [Rey *et al.*(2005)Rey, Hu, Calzetta, and Clark] Rey, A. M., B. L. Hu, E. Calzetta, and C. W. Clark, 2005, Phys. Rev. A **72**, 023604.
- [Rezakhani *et al.*(2010)Rezakhani, Abasto, Lidar, and Zanardi] Rezakhani, A. T., D. F. Abasto, D. A. Lidar, and P. Zanardi, 2010, Phys. Rev. A **82**, 012321.
- [Rezakhani *et al.*(2009)Rezakhani, Kuo, Hamma, Lidar, and Zanardi] Rezakhani, A. T., W.-J. Kuo, A. Hamma, D. A. Lidar, and P. Zanardi, 2009, Phys. Rev. Lett. **103**, 080502.
- [Riedel *et al.*(2010)Riedel, Böhi, Li, Hänsch, Sinatra, and Treutlein] Riedel, M. F., P. Böhi, Y. Li, T. W. Hänsch, A. Sinatra, and P. Treutlein, 2010, Nature **464**, 1170.
- [Rigol(2009)] Rigol, M., 2009, Phys. Rev. Lett. **103**, 100403.
- [Rigol *et al.*(2008)Rigol, Dunjko, and Olshanii] Rigol, M., V. Dunjko, and M. Olshanii, 2008, Nature **452**, 854.
- [Rigol *et al.*(2007)Rigol, Dunjko, Yurovsky, and Olshanii] Rigol, M., V. Dunjko, V. Yurovsky, and M. Olshanii, 2007, Phys. Rev. Lett. **98**, 050405.
- [Rigol and Santos(2010)] Rigol, M., and L. F. Santos, 2010, Phys. Rev. A **82**, 011604(R).

- [Rigolin *et al.*(2008)Rigolin, Ortiz, and Ponce] Rigolin, G., G. Ortiz, and V. H. Ponce, 2008, Phys. Rev. A **78**, 052508.
- [Rivers(2001)] Rivers, R., 2001, J. of Low Temp. Phys. **124**, 41.
- [Rossini *et al.*(2010)Rossini, Silva, Mussardo, and Santoro] Rossini, D., A. Silva, G. Mussardo, and G. Santoro, 2010, Phys. Rev. B **82**, 144302.
- [Rossini *et al.*(2009)Rossini, Silva, Mussardo, and Santoro] Rossini, D., A. Silva, G. Mussardo, and G. E. Santoro, 2009, Phys. Rev. Lett. **102**, 127204.
- [Roux(2009)] Roux, G., 2009, Phys. Rev. A **79**, 021608.
- [Roux(2010)] Roux, G., 2010, Phys. Rev. A **81**(5), 053604.
- [Sachdev(1999)] Sachdev, S., 1999, *Quantum Phase Transitions* (Cambridge University Press).
- [Sadler *et al.*(2006)Sadler, Higbie, Leslie, Vengalattore, and Stamper-Kurn] Sadler, L. E., J. M. Higbie, S. R. Leslie, M. Vengalattore, and D. M. Stamper-Kurn, 2006, Nature **443**, 312.
- [Saito *et al.*(2007)Saito, Kawaguchi, and Ueda] Saito, H., Y. Kawaguchi, and M. Ueda, 2007, Phys. Rev. A **76**, 043613.
- [Santos and Rigol(2010a)] Santos, L. F., and M. Rigol, 2010a, Phys. Rev. E **81**, 036206.
- [Santos and Rigol(2010b)] Santos, L. F., and M. Rigol, 2010b, Phys. Rev. E **82**, 031130.
- [Schmittmann and Zia(1995)] Schmittmann, B., and R. Zia, 1995, *Phase transitions and critical phenomena vol. 17 (editors C. Domb and J. Lebowitz)* (Academic Press, London), chapter Statistical mechanics of driven diffusive systems.
- [Schollwöck(2005)] Schollwöck, U., 2005, Rev. Mod. Phys. **77**, 259.
- [Schollwöck and White(2006)] Schollwöck, U., and S. White, 2006, in *Effective models for low-dimensional strongly correlated systems*, edited by G. G. Batrouni and D. Poilblanc (AIP, Melville, New York), chapter Methods for Time Dependence in DMRG, p. 155.
- [Schwandt *et al.*(2009)Schwandt, Alet, and Capponi] Schwandt, D., F. Alet, and S. Capponi, 2009, Phys. Rev. Lett. **103**, 170501.
- [Sen *et al.*(2008)Sen, Sengupta, and Mondal] Sen, D., K. Sengupta, and S. Mondal, 2008, Phys. Rev. Lett. **101**, 016806.
- [Sen and Vishveshwara(2010)] Sen, D., and S. Vishveshwara, 2010, Europhys. Lett. **91**, 66009.
- [Sengupta *et al.*(2004)Sengupta, Powell, and Sachdev] Sengupta, K., S. Powell, and S. Sachdev, 2004, Phys. Rev. A **69**, 053616.
- [Sengupta and Sen(2009)] Sengupta, K., and D. Sen, 2009, Phys. Rev. A **80**, 032304.
- [Sengupta *et al.*(2008)Sengupta, Sen, and Mondal] Sengupta, K., D. Sen, and S. Mondal, 2008, Phys. Rev. Lett. **100**, 077204.
- [Sensarma *et al.*(2010)Sensarma, Pekker, E.Altman, Demler, Strohmaier, Greif, Jördens, Tarruell, Moritz] Sensarma, R., D. Pekker, E. Altman, E. Demler, N. Strohmaier, D. Greif, R. Jördens, L. Tarruell, H. Moritz, and T. Esslinger, 2010, Phys. Rev. B **82**, 224302.

- [Silva(2008)] Silva, A., 2008, Phys. Rev. Lett. **101**, 120603.
- [Sondhi *et al.*(1997)]Sondhi, Girvin, Carini, and Shahar] Sondhi, S. L., S. M. Girvin, J. P. Carini, and D. Shahar, 1997, Rev. Mod. Phys. **69**, 315.
- [Sorensen *et al.*(2001)]Sorensen, Duan, Cirac, and Zoller] Sorensen, A., L. M. Duan, J. I. Cirac, and P. Zoller, 2001, Nature **409**, 63.
- [Srednicki(1994)] Srednicki, M., 1994, Phys. Rev. E **50**, 888.
- [Srednicki(1999)] Srednicki, M., 1999, J. Phys. A: Math. Gen. **32**, 1163.
- [Strohmaier *et al.*(2010)]Strohmaier, Greif, Jö"rdens, Tarruell, Moritz, and Esslinger] Strohmaier, N., D. Greif, R. Jö"rdens, L. Tarruell, H. Moritz, and T. Esslinger, 2010, Phys. Rev. Lett. **104**, 080401.
- [Stückelberg(1932)] Stückelberg, E. C. G., 1932, Helv. Phys. Acta **5**, 369.
- [Sutherland(2004)] Sutherland, B., 2004, *Beautiful Models* (Wold Scientific).
- [Suzuki(1971)] Suzuki, M., 1971, Physica **51**, 277.
- [Tabor(1989)] Tabor, M., 1989, *Chaos and Integrability in Nonlinear Dynamics: An Introduction* (Wiley, New York).
- [Talkner *et al.*(2007)]Talkner, Lutz, and Hänggi] Talkner, P., E. Lutz, and P. Hänggi, 2007, Phys. Rev. E **75**, 050102.
- [Thirring(2002)] Thirring, W., 2002, *Quantum Mathematical Physics* (Springer, New York).
- [Trotzky *et al.*(2008)]Trotzky, Cheinet, Fölling, Feld, Schnorrberger, Rey, Polkovnikov, Demler, Lukin, and Trotzky, S., P. Cheinet, S. Fölling, M. Feld, U. Schnorrberger, A. M. Rey, A. Polkovnikov, E. A. Demler, M. D. Lukin, and I. Bloch, 2008, Science **319**, 295.
- [Trotzky *et al.*(2011)]Trotzky, Chen, Flesch, McCulloch, Schollwöck, Eisert, and Bloch] Trotzky, S., Y.-A. Chen, A. Flesch, I. P. McCulloch, U. Schollwöck, J. Eisert, and I. Bloch, 2011, arXiv:1101.2659 .
- [Tuchman *et al.*(2006)]Tuchman, Orzel, Polkovnikov, and Kasevich] Tuchman, A. K., C. Orzel, A. Polkovnikov, and M. Kasevich, 2006, Phys. Rev. A **74**, 051601.
- [Vengalattore *et al.*(2007)]Vengalattore, Higbie, Leslie, Guzman, Sadler, and Stamper-Kurn] Vengalattore, M., J. M. Higbie, S. R. Leslie, J. Guzman, L. E. Sadler, and D. M. Stamper-Kurn, 2007, Phys. Rev. Lett. **98**, 200801.
- [Vengalattore *et al.*(2008)]Vengalattore, Leslie, Guzman, and Stamper-Kurn] Vengalattore, M., S. R. Leslie, J. Guzman, and D. M. Stamper-Kurn, 2008, Phys. Rev. Lett. **100**, 170403.
- [Venuti and Zanardi(2007)] Venuti, L. C., and P. Zanardi, 2007, Phys. Rev. Lett. **99**, 095701.
- [Verstraete *et al.*(2008)]Verstraete, Murg, and Cirac] Verstraete, F., V. Murg, and J. Cirac, 2008, Advances in Physics **57**, 143.
- [Vidal(2003)] Vidal, G., 2003, Phys. Rev. Lett. **91**, 147902.
- [Vidal(2004)] Vidal, G., 2004, Phys. Rev. Lett. **93**, 040502.

- [Vidal *et al.*(2003)Vidal, Latorre, Rico, and Kitaev] Vidal, G., J. I. Latorre, E. Rico, and A. Kitaev, 2003, Phys. Rev. Lett. **90**, 227902.
- [Vitanov(1999)] Vitanov, N. V., 1999, Phys. Rev. A **59**, 988.
- [Vitanov and Garraway(1996)] Vitanov, N. V., and B. M. Garraway, 1996, Phys. Rev. A **53**, 4288.
- [Vojta(2003)] Vojta, M., 2003, Rep. Prog. Phys. **66**, 2069.
- [Walls and Milburn(1994)] Walls, D., and G. Milburn, 1994, *Quantum Optics* (Springer-Verlag, Berlin).
- [Weiler *et al.*(2008)Weiler, Neely, Sherer, Bradley, Davis, and Anderson] Weiler, C. N., T. W. Neely, D. R. Sherer, A. S. Bradley, M. J. Davis, and B. P. Anderson, 2008, Nature **455**, 948.
- [White(1992)] White, S., 1992, Phys. Rev. Lett. **69**, 2863.
- [Widera *et al.*(2008)Widera, Trotzky, Cheinet, Fölling, Gerbier, and Bloch] Widera, A., S. Trotzky, P. Cheinet, S. Fölling, F. Gerbier, and I. Bloch, 2008, Phys. Rev. Lett. **100**, 140401.
- [Yates and Zurek(1998)] Yates, A., and W. H. Zurek, 1998, Phys. Rev. Lett. **80**, 5477.
- [Zabusky and Kruskal(1965)] Zabusky, N. J., and M. D. Kruskal, 1965, Phys. Rev. Lett. **15**, 240.
- [Zakharov *et al.*(1992)Zakharov, L’vov, and Falkovich] Zakharov, V., V. L’vov, and G. Falkovich, 1992, *Kolmogorov spectra of turbulence, Vol. 1* (Springer-Verlag, Berlin).
- [Zener(1932)] Zener, C., 1932, Proc. R. Soc. London, Ser. A **137**, 696.
- [Zurek(1985)] Zurek, W. H., 1985, Nature **317**, 505.
- [Zurek(1996)] Zurek, W. H., 1996, Phys. Rep. **276**, 177.
- [Zurek(2003)] Zurek, W. H., 2003, Rev. Mod. Phys. **75**, 715.
- [Zurek *et al.*(2005)Zurek, Dorner, and Zoller] Zurek, W. H., U. Dorner, and P. Zoller, 2005, Phys. Rev. Lett. **95**, 105701.