



ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • [Электронная библиотека](#)

[Препринты ИПМ](#) • [Препринт № 83 за 2019 г.](#)



ISSN 2071-2898 (Print)
ISSN 2071-2901 (Online)

[Волков Ю.А.](#), [Марков М.Б.](#)

**Кинетические уравнения для
газа фононов**

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Волков Ю.А., Марков М.Б. Кинетические уравнения для газа фононов // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2019. № 83. 15 с. doi:[10.20948/prepr-2019-83](https://doi.org/10.20948/prepr-2019-83)

URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2019-83>

**Ордена Ленина
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
имени М.В. Келдыша
Российской академии наук**

Ю.А. Волков, М.Б. Марков

Кинетические уравнения для газа фононов

Москва – 2019

Волков Ю.А., Марков М.Б.

Кинетические уравнения для газа фононов

Построено уравнение Власова для бесстолкновительного газа фононов в анизотропном кубическом кристалле. Предложено уравнение типа Больцмана в приближении столкновительной релаксации фононов к равновесному распределению. Показано, что в термодинамическом пределе кинетическая модель переходит в уравнения термоупругости. Рассмотрена связь кинетической модели фононного газа с уравнением Каттенео.

Ключевые слова: кристалл, фонон, упругие деформации, уравнение Власова, уравнение Больцмана

Yury Aleksandrovich Volkov, Mikhail Borisovich Markov

Kinetic equations for phonon gas

The Vlasov equation is constructed for a collisionless phonon gas in an anisotropic cubic crystal. An equation of Boltzmann type is proposed in the approximation of the collisional relaxation of phonons to the equilibrium distribution. It is shown that in the thermodynamic limit the kinetic model transforms in the thermoelasticity equations. The relationship between the kinetic model of a phonon gas and the Cattaneo equation is considered.

Key words: crystal, phonon, elastic deformations, Vlasov equation, Boltzmann equation

Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ (грант № 17-01-00301).

Оглавление

Введение	3
1 Дисперсионное соотношение для упругих волн.....	4
2 Уравнение Власова для фононов	10
3 Уравнение Больцмана для фононов	11
Заключение.....	14
Библиографический список.....	14

Введение

Воздействие ионизирующих излучений космического пространства сопровождается рядом физических эффектов, существенно влияющих на космические аппараты. В частности, твердые диэлектрики и полупроводники в составе изделий микроэлектроники подвергаются нестационарному неравномерному радиационному нагреву. Следствием являются перенос тепла, а также деформации и напряжения. Помимо термомеханических наблюдаются также радиационные и электромагнитные эффекты.

Суперкомпьютерное математическое моделирование данных эффектов стало эффективным средством контроля стойкости электронно-компонентной базы космических аппаратов. Это связано с ограниченностью возможностей, большой стоимостью и технической сложностью натуральных и лабораторных экспериментов с ионизирующим излучением.

Физическую картину взаимодействия ионизирующего излучения с веществом активной зоны полупроводникового прибора рассмотрим на примере рассеяния потока электронов с энергией порядка 100 кэВ в кремнии. Электроны такой энергии наблюдаются в естественных радиационных поясах Земли на орбитах спутников связи, а кремний является наиболее используемым материалом в современной микроэлектронике. Распространяясь в кремнии, свободные электроны потока образуют объемный заряд, испытывают упругие и ионизационные столкновения, возбуждают оболочки атомов. Образуется электромагнитное поле. Теряемая свободными электронами энергия передается связанным электронам кристалла. Они преодолевают запрещенную зону, в результате чего в кристалле образуются избыточные электроны проводимости и дырки валентной зоны. Кристалл приобретает радиационную проводимость. Электроны проводимости рассеиваются на дефектах кристаллической решетки кремния, передавая ей свою энергию. В результате образуются неравновесные тепловые и механические поля.

Электромагнитное поле и радиационная проводимость являются электромагнитным и радиационным эффектами воздействия свободных электронов на кристалл. Они моделируются классическими кинетическими уравнениями для свободных электронов, квантовыми кинетическими уравнениями для электронов проводимости и дырок валентной зоны, а также уравнениями Максвелла для электромагнитного поля. Для численного решения кинетических уравнений при этом используется статистический метод частиц. Его неоспоримым преимуществом является эффективная параллельная реализация на суперкомпьютерах с гетерогенной архитектурой.

Одним из возможных способов описания переноса термомеханической энергии в кристалле является моделирование распространения упругих волн. В теории твердого тела их отождествляют с фононами кристаллической решетки – квазичастицами, обладающими координатами и квазиимпульсом. Рассмотрен-

ние функции распределения фононов и построение для нее кинетического уравнения позволит моделировать не только электромагнитные и радиационные, но и термомеханические эффекты воздействия ионизирующего излучения на кристаллы в рамках единого математического описания.

Данная работа посвящена построению кинетического уравнения для фононов, описывающего распространение радиационно-индуцированных термомеханических возбуждений в кристалле.

1 Дисперсионное соотношение для упругих волн

Рассмотрим $u_\alpha = (u_x, u_y, u_z)$ – механическое смещение в кристалле. Смещения u_α определяют плотность энергии деформаций

$$W = \frac{1}{2} E^{\alpha\beta\mu\nu} u_{\alpha\beta} u_{\mu\nu} \quad (1)$$

через тензор деформаций:

$$u_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_\alpha}{\partial x^\beta} + \frac{\partial u_\beta}{\partial x^\alpha} \right), \quad (2)$$

где $\mathbf{r} = \{x_\alpha\}$, $\alpha = (1, 2, 3)$, и тензор модулей упругости второго порядка

$$E^{\alpha\beta\mu\nu} = E^{\beta\alpha\mu\nu} = E^{\alpha\beta\nu\mu} = E^{\mu\nu\alpha\beta}. \quad (3)$$

Тензоры напряжений $\sigma_{\alpha\beta}$ и деформаций (2) связаны законом Гука:

$$\sigma_{\alpha\beta} = \frac{\partial W}{\partial u^{\alpha\beta}} = E_{\alpha\beta\mu\nu} u^{\mu\nu}. \quad (4)$$

Рассмотрим уравнение упругих смещений [1], [2]:

$$\rho \frac{\partial^2 u_\alpha}{\partial t^2} = \frac{\partial \sigma_{\alpha\beta}}{\partial x_\beta}, \quad (5)$$

где ρ – плотность вещества, t – время.

Подставляя (5) в (4), получим:

$$\rho \frac{\partial^2 u_\alpha}{\partial t^2} = E_{\alpha\beta\mu\nu} \frac{\partial^2 u^\nu}{\partial x_\beta \partial x_\mu}. \quad (6)$$

Рассмотрим решение уравнений (6) в виде плоских волн

$$\mathbf{u} = \mathbf{e} \exp[i(\mathbf{k}\mathbf{x} - \omega t)] \quad (7)$$

с волновым вектором \mathbf{k} и частотой $\omega(\mathbf{k})$. Здесь \mathbf{e} – единичный вектор поляризации. После подстановки (7) уравнения (6) принимают вид

$$\rho\omega^2 e_\alpha = E^{\alpha\beta\mu\nu} k_\beta k_\mu e_\nu. \quad (8)$$

Однородная система (8) имеет нетривиальное решение при условии равенства нулю определителя

$$\det \|E^{\alpha\beta\mu\nu} k_\beta k_\mu - \rho\omega^2 \delta_{\alpha\nu}\| = 0. \quad (9)$$

Уравнение (9) имеет три корня $\omega_1(\mathbf{k})$, $\omega_2(\mathbf{k})$, $\omega_3(\mathbf{k})$, определяющие закон дисперсии волн. Система (8) имеет три решения $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3$, соответствующие трем различным поляризациям волн. Поляризации \mathbf{e}_ℓ , $\ell=1,2,3$ волн с одним и тем же волновым вектором \mathbf{k} взаимно перпендикулярны.

Введем для упругих модулей представление Фойгта с двумя индексами. Двойной индекс $\alpha\beta$ в данном представлении заменяется одним индексом, меняющимся от 1 до 6 по схеме

$$11-1, 22-2, 33-3, 23-4, 13-5, 12-6.$$

Это означает, что $c_{11} = E^{xxxx}$, $c_{12} = E^{xxyy}$ и т.д.

Матрица c_{ij} , $i, j = 1, 2, \dots, 6$, включает только независимые компоненты тензора модулей упругости $E^{\alpha\beta\mu\nu}$ и действует на шестикомпонентный вектор $\varepsilon = (\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3, \varepsilon_4, \varepsilon_5, \varepsilon_6) = (u_{11}, u_{22}, u_{33}, 2u_{23}, 2u_{13}, 2u_{12})$. В этих обозначениях имеем $\sigma = \hat{c}\varepsilon$ для напряжений и $W = \varepsilon \hat{c} \varepsilon / 2$ для плотности энергии. В случае кристаллов кубической симметрии имеется только три независимых модуля c_{11} , c_{12} , c_{44} , а плотность энергии деформаций имеет вид [3]

$$W = \frac{1}{2} c_{11} (u_{xx}^2 + u_{yy}^2 + u_{zz}^2) + c_{12} (u_{xx} u_{yy} + u_{xx} u_{zz} + u_{yy} u_{zz}) + \frac{1}{2} c_{44} (u_{xy}^2 + u_{xz}^2 + u_{yz}^2). \quad (10)$$

Пользуясь (10) и определением (5), получим замкнутые уравнения для компонент поля смещений в кубическом кристалле

$$\begin{aligned}
\rho \frac{\partial^2 u_x}{\partial t^2} &= c_{11} \frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + c_{44} \left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial z^2} \right) + (c_{12} + c_{44}) \left(\frac{\partial^2 u_y}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial x \partial z} \right), \\
\rho \frac{\partial^2 u_y}{\partial t^2} &= c_{11} \frac{\partial^2 u_y}{\partial y^2} + c_{44} \left(\frac{\partial^2 u_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial z^2} \right) + (c_{12} + c_{44}) \left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial y \partial z} \right), \\
\rho \frac{\partial^2 u_z}{\partial t^2} &= c_{11} \frac{\partial^2 u_z}{\partial z^2} + c_{44} \left(\frac{\partial^2 u_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial y^2} \right) + (c_{12} + c_{44}) \left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial x \partial z} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial y \partial z} \right).
\end{aligned} \tag{11}$$

Если выполнено условие

$$c_{11} = c_{12} + 2c_{44}, \tag{12}$$

то кристалл изотропен. Отклонение от равенства (12) является мерой анизотропии кристалла [2].

Для изотропного кристалла уравнения (11) существенно упрощаются

$$\rho \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2} = c_{44} \Delta \mathbf{u} + (c_{11} - c_{44}) \text{grad div } \mathbf{u}. \tag{13}$$

Уравнения (13) определяют собственные моды упругих волн, свободно распространяющиеся в изотропном теле. Одним из решений (13) будет продольная волна $u_x = u_1 \mathbf{e}_x \exp\{i\omega t - ikx\}$ в направлении $\mathbf{e}_x = (1, 0, 0)$. Дисперсионное соотношение и скорость распространения продольных волн имеют вид

$$\omega = kc_1, \quad c_1 = (c_{11}/\rho)^{1/2}. \tag{14}$$

Двумя другими решениями являются поперечные волны

$$u_y = u_2 \mathbf{e}_y \exp\{i\omega t - ikx\}, \quad u_z = u_3 \mathbf{e}_z \exp\{i\omega t - ikx\}$$

с одной и той же скоростью распространения

$$\omega = kc_{2(3)}, \quad c_2 = c_3 = (c_{44}/\rho)^{1/2}. \tag{15}$$

Решение системы (11) также можно искать в виде $\mathbf{u} = \mathbf{u}_0(\mathbf{kx}) \exp(-i\omega t)$. Здесь строгое разделение на продольные и поперечные волны возможно только для некоторых выделенных направлений. Для направления [100] – вдоль главных осей имеют место формулы (14,15). Вдоль диагонали грани куба [110] скорости распространения имеют вид:

$$c_1 = ((c_{11} + c_{12} + 2c_{44})/2\rho)^{1/2}, \quad c_2 = ((c_{11} - c_{12})/2\rho)^{1/2}, \quad c_3 = (c_{44}/\rho)^{1/2}. \tag{16}$$

Вдоль пространственной диагонали куба [111]:

$$c_1 = ((c_{11} + 2c_{12} + 4c_{44})/3\rho)^{1/2}, \quad c_{2,3} = ((c_{11} - c_{12} + c_{44})/3\rho)^{1/2}. \quad (17)$$

Поперечные волны в направлениях [100] и [111] двукратно вырождены. В общем случае произвольного волнового вектора \mathbf{k} по отношению к его направлению волны не являются ни чисто продольными, ни чисто поперечными.

В общем случае плотность энергии деформации можно представить [2] в виде ряда, обобщающего формулу (2):

$$W = \frac{1}{2} E^{\alpha\beta\mu\nu} u_{\alpha\beta} u_{\mu\nu} + \frac{1}{3} E^{\alpha\beta\mu\nu\eta\xi} u_{\alpha\beta} u_{\mu\nu} u_{\eta\xi} + \dots \quad (18)$$

Сохраняя конечное число членов в разложении (18), можно получать различные приближения теории гиперупругости, в том числе, оставаться в рамках гармонического приближения. Коэффициенты $E^{\alpha\beta\mu\nu\eta\xi}$ называются модулями упругости третьего порядка.

Кристаллы с алмазоподобной решеткой обладают шестью независимыми модулями упругости третьего порядка. Поправка к плотности энергии за счет ангармонических (кубических по деформациям) членов в обозначениях Фойгта имеет вид [4]:

$$\begin{aligned} W^a = & \frac{1}{6} c_{111} (\varepsilon_1^3 + \varepsilon_2^3 + \varepsilon_3^3) + c_{123} \varepsilon_1 \varepsilon_2 \varepsilon_3 + c_{456} \varepsilon_4 \varepsilon_5 \varepsilon_6 + \\ & + \frac{1}{2} c_{112} [\varepsilon_1^2 (\varepsilon_2 + \varepsilon_3) + \varepsilon_2^2 (\varepsilon_1 + \varepsilon_3) + \varepsilon_3^2 (\varepsilon_1 + \varepsilon_2)] + \\ & + \frac{1}{2} c_{144} (\varepsilon_1 \varepsilon_4^2 + \varepsilon_2 \varepsilon_5^2 + \varepsilon_3 \varepsilon_6^2) + \\ & + \frac{1}{2} c_{166} [\varepsilon_1 (\varepsilon_5^2 + \varepsilon_6^2) + \varepsilon_2 (\varepsilon_5^2 + \varepsilon_6^2) + \varepsilon_3 (\varepsilon_5^2 + \varepsilon_6^2)] + \\ & + \frac{1}{2} c_{11} (\varepsilon_1^3 + \varepsilon_2^3 + \varepsilon_3^3) + \frac{1}{2} c_{12} [\varepsilon_1^2 (\varepsilon_2 + \varepsilon_3) + \varepsilon_2^2 (\varepsilon_1 + \varepsilon_3) + \varepsilon_3^2 (\varepsilon_1 + \varepsilon_2)]. \end{aligned} \quad (19)$$

Источником новых членов в формуле (19) служит ангармоничность колебаний атомов твердого тела. Соответствующие поправки в дисперсионные соотношения можно получить, используя соотношения Неймана-Дюамеля [1]:

$$\begin{aligned} \sigma_1 &= c_{11} \varepsilon_1 + c_{12} \varepsilon_2 + c_{12} \varepsilon_3, \\ \sigma_2 &= c_{12} \varepsilon_1 + c_{11} \varepsilon_2 + c_{12} \varepsilon_3, \\ \sigma_3 &= c_{12} \varepsilon_1 + c_{12} \varepsilon_2 + c_{11} \varepsilon_3. \end{aligned} \quad (20)$$

Для вычисления поправок δc_{11} и δc_{12} достаточно найти соответствующие члены в выражениях $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$. Из формул (5), (19) следует, что

$$\begin{aligned}\sigma_1^a = & \frac{1}{2} \left[\left(c_{111} + \frac{3}{2} c_{11} \right) \varepsilon_1 + (c_{112} + c_{12}) \varepsilon_2 + (c_{112} + c_{12}) \varepsilon_3 \right] \varepsilon_1 + \\ & + \frac{1}{2} \left[(c_{112} + c_{12}) \varepsilon_1 + (c_{112} + c_{12}) \varepsilon_2 + c_{123} \varepsilon_3 \right] \varepsilon_2 + \\ & + \frac{1}{2} \left[(c_{112} + c_{12}) \varepsilon_1 + c_{123} \varepsilon_2 + (c_{112} + c_{12}) \varepsilon_3 \right] \varepsilon_3.\end{aligned}$$

Здесь сохранены члены, не изменяющие поляризацию. Сравнение с (20) показывает, что выражение в квадратных скобках в первой строке формулы дает поправку δc_{11} , вторая и третья строки – поправки δc_{12} . Аналогично,

$$\begin{aligned}\sigma_2^a = & \frac{1}{2} \left[(c_{112} + c_{12}) \varepsilon_1 + (c_{112} + c_{12}) \varepsilon_2 + c_{123} \varepsilon_3 \right] \varepsilon_1 + \\ & + \frac{1}{2} \left[(c_{112} + c_{12}) \varepsilon_1 + \left(c_{111} + \frac{3}{2} c_{11} \right) \varepsilon_2 + c_{123} \varepsilon_3 \right] \varepsilon_2 + \\ & + \frac{1}{2} \left[c_{123} \varepsilon_1 + (c_{112} + c_{12}) \varepsilon_2 + (c_{112} + c_{12}) \varepsilon_3 \right] \varepsilon_3, \\ \sigma_3^a = & \frac{1}{2} \left[(c_{112} + c_{12}) \varepsilon_1 + c_{123} \varepsilon_2 + (c_{112} + c_{12}) \varepsilon_3 \right] \varepsilon_1 + \\ & + \frac{1}{2} \left[c_{123} \varepsilon_1 + (c_{112} + c_{12}) \varepsilon_2 + (c_{112} + c_{12}) \varepsilon_3 \right] \varepsilon_2 + \\ & + \frac{1}{2} \left[(c_{112} + c_{12}) \varepsilon_1 + (c_{112} + c_{12}) \varepsilon_2 + \left(c_{111} + \frac{3}{2} c_{11} \right) \varepsilon_3 \right] \varepsilon_3.\end{aligned}$$

Усредняя по равноправным направлениям, получим

$$\delta c_{11} = \frac{1}{6} (c_{111} + 3c_{11} + 2c_{112} + 2c_{12}) \text{divu}, \quad (21)$$

$$\delta c_{12} = \frac{1}{6} (2c_{112} + 2c_{12} + c_{123}) \text{divu}. \quad (22)$$

Для напряжений сдвига имеем

$$\begin{aligned}\sigma_6^a &= (c_{166} \varepsilon_1 + c_{166} \varepsilon_2 + c_{144} \varepsilon_3) \varepsilon_6, \\ \sigma_5^a &= (c_{166} \varepsilon_1 + c_{144} \varepsilon_2 + c_{166} \varepsilon_3) \varepsilon_5,\end{aligned}$$

$$\sigma_4^a = (c_{144}\varepsilon_1 + c_{166}\varepsilon_2 + c_{166}\varepsilon_3)\varepsilon_4.$$

Снова усредняя по направлениям, для модуля сдвига получим

$$\delta C_{44} = \frac{1}{3}(2C_{166} + C_{144})\text{div}\mathbf{u}. \quad (23)$$

Все модули третьего порядка отрицательны (см. таблицу 1, в круглых скобках теоретические значения). Поэтому все поправки к модулям второго порядка также отрицательны.

Таблица 1

Упругие модули третьего порядка для германия и кремния [4], [5]

Упругие модули третьего порядка (10^{11} н/м ²)	Si	Ge
C_{111}	-8.34±0.11(-8.21)	-7.10 (-7.38)
C_{112}	-5.31±0.32(-4.45)	-3.89 (-3.54)
C_{123}	-0.02±0.18 (-0.64)	-0.18 (-0.26)
C_{144}	-0.95±0.24(+0.14)	-0.23 (-0.10)
C_{166}	-2.96±0.12(-3.43)	-2.92 (-3.08)
C_{456}	-0.074±0.22(-0.33)	-0.53 (-0.28)

Используя формулы (14)-(15) и (21)-(23), получим поправку к скоростям продольного и поперечного звука

$$v_1 = c_1 \left(1 - \frac{\delta c_{11}}{2c_{11}} \text{div}\mathbf{u} \right) = c_1 (1 - \gamma_1 \text{div}\mathbf{u}), \quad (24)$$

$$v_{2,3} = c_{2,3} \left(1 - \frac{\delta c_{44}}{2c_{44}} \text{div}\mathbf{u} \right) = c_{2,3} (1 - \gamma_{2,3} \text{div}\mathbf{u}). \quad (25)$$

Все поправки зависят только от дилатации $\phi = \text{div}\mathbf{u}$. Таким образом, скорость звука в деформированном состоянии является локальной величиной, зависящей от точки наблюдения \mathbf{x} . В [6] рассматривалось дисперсионное соотношение

$$\omega_\ell(\mathbf{k}) = c_\ell k (1 - \gamma \text{div}\mathbf{u}) \quad (26)$$

с единственной константой Грюнайзена γ , не зависящей от поляризации. Здесь $\gamma = aK/C_V$, где $K = 1/3(C_{11} + 2C_{12})$ – модуль всестороннего сжатия, C_V – теплоемкость единицы объема вещества, a – коэффициент теплового расширения.

2 Уравнение Власова для фононов

Упругой волне $\exp\{i\omega(\mathbf{k})t - i\mathbf{k}\mathbf{r}\}$ с дисперсионным соотношением $\omega = \omega_\ell(\mathbf{k})$ поставим в соответствие квазичастицу – фонон поляризации ℓ с квазиимпульсом $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ и энергией $\varepsilon = \hbar\omega_\ell(\mathbf{k})$, где $\ell = 1, 2, 3$, \hbar – постоянная Планка. Фонон является элементарным возбуждением с энергией $\hbar\omega_\ell$, то есть упругая волна состоит из целого числа фононов. Рассмотрим газ фононов с функцией распределения $f_\ell(t, \mathbf{r}, \mathbf{p})$. Здесь фонон следует рассматривать как классическую квазичастицу, обладающую траекторией. Введение функции распределения означает квазиклассический переход от суммы по квантовым числам заполнения к интегралу по фазовому объему. В частности, для плотности энергии фононов поляризации ℓ имеем

$$w_\ell = \frac{1}{V} \sum_{k_n} \hbar k_n c_\ell f_{k_n} \rightarrow \int \hbar k_\ell c_\ell f_\ell(t, \mathbf{r}, \mathbf{p}) \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3}. \quad (27)$$

Здесь f_{k_n} – числа заполнения состояний, V – объем системы. Так как квазиимпульс фонона однозначно определен только в зоне Бриллюэна [7], [3], то с ней совпадает область интегрирования по квазиимпульсам в (27). В случае идеального газа, когда фононы движутся свободно, без взаимодействия друг с другом, полная энергия фононного газа сводится к сумме энергий отдельных квазичастиц. В следующем приближении энергия фононов должна определяться с учетом их взаимодействия. Взаимодействуют фононы через поле деформаций (26). Тогда энергия фонона следующим образом выражается через его квазиимпульс и скорость:

$$H_\ell = \hbar\omega_\ell = pc_\ell(1 - \gamma\phi). \quad (28)$$

Следствием (28) являются уравнения движения фононов

$$\dot{\mathbf{v}}_\ell = \partial H / \partial \mathbf{p} = c_\ell(1 - \gamma\phi)(\mathbf{p}/p), \quad \dot{\mathbf{p}} = -\partial H / \partial \mathbf{r} = \gamma pc_\ell \nabla \phi. \quad (29)$$

Точка над символом означает полную производную по времени. Отсюда следует кинетическое уравнение для фононного газа

$$\frac{\partial f_\ell}{\partial t} + \operatorname{div}_{\mathbf{r}}(\mathbf{v}_\ell f) + \operatorname{div}_{\mathbf{p}}(\gamma p c_\ell \nabla \phi f_\ell) = 0, \quad (30)$$

где символы $\operatorname{div}_{\mathbf{r}}$ и $\operatorname{div}_{\mathbf{p}}$ обозначают дивергенции в пространствах координат и квазиимпульсов, соответственно.

Уравнение (30) должно быть дополнено уравнениями для поля смещений. Полная энергия поля деформаций в объеме V :

$$S_u = \frac{1}{2} \int_V d\mathbf{r} E^{\alpha\beta\mu\nu} u_{\alpha\beta} u_{\mu\nu}. \quad (31)$$

Энергию взаимодействия фононов всех поляризаций с полем деформаций, согласно (26), (27), можно записать в виде

$$S_{ph-u} = \frac{\gamma}{2} \int_V d\mathbf{r} w u_{\alpha\alpha}, \quad w = \sum_\ell w_\ell. \quad (32)$$

Используя (31) и (32), определим действие поля деформаций

$$S = \int_{t_1}^{t_2} dt \int_V d\mathbf{r} \left\{ \frac{1}{2} \sum_\alpha \rho \left(\frac{\partial u_\alpha}{\partial t} \right)^2 - E^{\alpha\beta\mu\nu} u_{\alpha\beta} u_{\mu\nu} + \gamma w u_{\alpha\alpha} \right\}. \quad (33)$$

Варьируя (33) по u_α и полагая вариацию $\delta_{u_\alpha} S = 0$, получим уравнение для поля деформаций

$$\rho \frac{\partial^2 u_\alpha}{\partial t^2} = E^{\alpha\beta\mu\nu} \frac{\partial^2 u_\nu}{\partial x_\beta \partial x_\mu} - \gamma \frac{\partial w}{\partial x_\alpha}. \quad (34)$$

Уравнения (30) и (34) образуют систему уравнений Власова для бесстолкновительного газа фононов с фононов с функцией распределения $f_\ell(t, \mathbf{r}, \mathbf{p})$ в самосогласованном поле деформаций u_α .

3 Уравнение Больцмана для фононов

Уравнение (30) не описывает процессы диссипации, в частности, релаксацию квазиимпульса фононов. Это означает, что термосопротивление кристалла равно нулю, а теплопроводность бесконечна. Значение теплопроводности становится конечным, если учесть трехфононные процессы слияния и распада. Будем использовать модель «серого» вещества. Это не повлияет на окончательные результаты и выводы. В модели «серого» вещества поляризации фононов не

различаются, соответственно индекс поляризации далее опускается. Остаются два основных параметра – усредненная скорость звука c_s

$$\frac{1}{c_s^3} = \frac{1}{3} \left(\frac{1}{c_1^3} + \frac{1}{c_2^3} + \frac{1}{c_3^3} \right)$$

и среднее время релаксации квазиимпульса за счет трехфононных процессов τ .

В приближении «серого» вещества кинетическое уравнение для фононного газа имеет вид

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \gamma p c_s \nabla \phi \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = - \frac{f - f_p}{\tau}. \quad (35)$$

Здесь f_p – равновесная функция распределения фононов. Интеграл рассеяния в правой части (35) должен сохранять энергию фононов, но не их квазиимпульс.

Обозначим w – плотность энергии, \mathbf{q} – плотность потока энергии фононного газа. Данные величины являются суммарными по всем поляризациям.

$$w = \int p v f \, d\mathbf{p} / (2\pi\hbar)^3, \quad \mathbf{q} = \int \mathbf{v} p v f \, d\mathbf{p} / (2\pi\hbar)^3. \quad (36)$$

Умножим обе части (35) на $p v$ и проинтегрируем по квазиимпульсам. В результате получим

$$\frac{\partial w}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial \mathbf{r}} = 0. \quad (37)$$

Условие сохранения энергии при рассеянии

$$\int \frac{p v f}{\tau} \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} = \int \frac{p v f_p}{\tau} \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \quad (38)$$

теперь неявно определяет температуру фононного газа в равновесной функции распределения. Это определение однозначно, так как плотность энергии является монотонно растущей функцией температуры.

Следуя [8], рассмотрим стационарное кинетическое уравнение

$$\mathbf{v} \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{r}} + \gamma p c_s \nabla \phi \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{p}} = - \frac{f_0 - f_p}{\tau}. \quad (39)$$

Полагая, что стационарное распределение в правой части (39) есть локально равновесное распределение Планка

$$f_p = \frac{1}{\exp\{-pc_s(1-\gamma\phi)/\kappa_B T\} - 1} = \frac{1}{\exp\{-pv/\kappa_B T\} - 1},$$

получим, что функция $f_0 = f_p$ является решением (39). Здесь T – температура, κ_B – постоянная Больцмана. Если температура (или плотность энергии) станет медленно меняющейся функцией времени и координат, то в том же приближении

$$\frac{\partial w}{\partial t} = \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \gamma T \frac{\partial \phi}{\partial t} \right) \int pv \frac{\partial f_p}{\partial T} \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} = C_v \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \gamma T \frac{\partial \phi}{\partial t} \right), \quad (40)$$

где

$$C_v = \int pv \frac{\partial f_p}{\partial T} \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} = \kappa_B \int \frac{(pv)^2}{\kappa_B^2 T^2} \frac{\exp(-pv/\kappa_B T)}{[\exp(-pv/\kappa_B T) - 1]^2} \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3}$$

есть удельная теплоемкость фононного газа [9,10].

Плотность потока энергии получается в следующем приближении, учитывая поправку, антисимметричную по импульсу

$$\frac{\partial f_1}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{r}} + \gamma pc_s \nabla \phi \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{p}} + \mathbf{v} \frac{\partial f_0}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial \mathbf{r}} = -\frac{f_1}{\tau(\omega)}. \quad (41)$$

Учитывая, что второй и третий члены в левой части (41) в сумме равны нулю для любой $f(H)$, окончательно получим для поправки f_1

$$\frac{\partial f_1}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f_0}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial \mathbf{r}} = -\frac{f_1}{\tau}. \quad (42)$$

Умножая (42) на $\mathbf{v}pv$ и интегрируя по квазиимпульсу, для плотности потока энергии получим уравнение типа Каттанео

$$\tau \frac{\partial q_\alpha}{\partial t} + (1-\gamma\phi)^2 \lambda_{\alpha\beta} \frac{\partial T}{\partial x_\beta} = -q_\alpha, \quad \lambda_{\alpha\beta} = \int \tau pc_s c_{s\alpha} c_{s\beta} \frac{\partial f_0}{\partial T} \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3},$$

где $\lambda_{\alpha\beta}$ – симметричный тензор теплопроводности фононного газа [7,9,10]. Можно показать, что это диагональный тензор, то есть $\lambda_{\alpha\beta} = (\lambda/3)\delta_{\alpha\beta}$. Под-

ставляя (40) в (37) и удерживая только линейные по дилатации члены, окончательно получим

$$C_v \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \gamma T \frac{\partial}{\partial t} \operatorname{div} \mathbf{u} \right) + \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial \mathbf{r}} = 0, \quad (43)$$

$$\tau \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} + (1 - 2\gamma \operatorname{div} \mathbf{u}) \lambda \nabla T = -\mathbf{q}. \quad (44)$$

Уравнения (43), (44) и (35) составляют замкнутую систему уравнений термоупругости, вытекающую из кинетических уравнений для газа фононов.

Заключение

Получены уравнения кинетической модели, описывающей бесстолкновительную динамику фононного газа в приближении среднего поля. Эффект коллективного взаимодействия фононов через поле деформаций учтен путем введения поправок к уравнениям свободного движения. Поправки приводят к уравнениям термоупругости.

Сама постановка задачи для системы, включающей кинетическое уравнение типа Власова для фононов (30) и уравнение для поля деформаций (34), нетривиальна при наличии внешнего воздействия на кристалл. В частности, рассеяние ионизирующего излучения в кристалле приводит к выделению энергии в его объеме. В этом случае в правой части кинетического уравнения (30) появляется источник, моделирующий приток фононов в кристалл [11-12]. Приток фононов определяется плотностью мощности энергии, выделяемой ионизирующим излучением в кристалле. Граничные условия к системе (30), (34) также должны отражать обмен тепловой энергией, то есть фононами, с примыкающими к кристаллу телами.

Построено кинетическое уравнение типа Больцмана для газа фононов с интегралом столкновений в приближении релаксации к равновесному распределению. В приближении «серого» вещества из уравнения Больцмана выведены макроскопические уравнения термоупругости.

Библиографический список

- 1 Nowacki W. Thermoelasticity. N.-Y.: Pergamon Press, 1986. 578 p.
- 2 Leibfried G., Breuer N. Point Defects in Metals. Berlin: Springer-Verlag, 1978.
- 3 Kittel C. Introduction to Solid State Physics. John Wiley and Sons, Inc. 8 Edition, 2005, 792 pp.
- 4 Keating P.N. Theory of the third-order elastic constants of diamond-like crystals // Phys. Rev. 1966. v. 149. №2. p. 674-678.

5 Philip J., Breazeale M.A. Temperature variation of some combinations of thirdorder elastic constants of silicon between 300 and 3K // J. Appl. Phys. 1981. v. 52. p. 3383-3387.

6 Reissland J.A. The Physics of Phonons. New York: John Wiley and Sons Ltd. 1973.

7 Peierls R.E. Quantum Theory of Solids. Oxford: Clarendon Press, 1955.

8 Дмитриев А.С. Тепловые процессы в наноструктурах. М.: Издательский дом МЭИ, 2012, 303с.

9 Klemens P.G. Thermal conductivity and lattice vibration modes. Encyclopedia of Physics, V.14, Springer-Verlag, Berlin, 1956, p. 198.

10 Callaway J. Model for lattice thermal conductivity at low temperatures // Phys. Rev. 1959.v. 113. №3. p. 1046-1051.

11 A. V. Berezin, A. S. Vorontsov, M. E. Zhukovskiy, M. B. Markov, S. V. Parot'kin, Particle method for electrons in a scattering medium, Comput. Math. Math. Phys., 55:9 (2015), 1534–1546.

12 Berezin A.V., Volkov Yu.A., Markov M.B. Tarakanov I.A. Simulation of the Electron-Phonon Interaction in Silicon // Mathematical Models and Computer Simulations, 2019, Vol. 11, No. 4, pp. 542–550.