объединенный институт ядерных исследований дубна

Р17-85-487

А.Ф.Андреев,* Д.И.Пушкаров

УРАВНЕНИЯ ДИНАМИКИ МЕТАЛЛОВ

Направлено в "Журнал экспериментальной и теоретической физики"

* Институт физических проблем АН СССР, Москва

1985

ВВЕДЕНИЕ

Во многих задачах теории металлов возникает необходимость использования полной системы динамических уравнений, состоящей из связанных между собой уравнений теории упругости, кинетического уравнения Больцмана для проводящих электронов и уравнений Максвелла для электромагнитного поля. Вывод таких уравнений производился многими авторами, причем наиболее полно и последовательно Конторовичем /см. его работы [1] и цитированную в них литературу/. Речь всюду шла, однако, о линеаризованных уравнениях. Помимо очевидного недостатка линеаризованных уравнений, связанного с невозможностью их приложения к нелинейным задачам, например, о взаимодействии колебательных мод, в данном случае имеются принципиальные вопросы, последовательное решение которых возможно лишь в точной нелинейной постановке.

Наиболее существенный вопрос - это описание динамики электронов в нестационарно деформированной кристаллической решетке. В точном описании все физические величины, характеризующие электрон, как и в недеформированном кристалле, являются периодическими функциями квазиимпульса, однако периоды являются функциями координат и времени. Границы зоны Бриллюэна зависят при этом не только от деформации в данный момент времени, но и от скорости решетки. Если производить разложение всех величин по степеням вектора смещения решетки, то в выражениях для физических величин /энергия и т.д./ возникает кажущаяся непериодичность, вполне аналогичная "вековым" членам в теории нелинейных колебаний. Кинетическое уравнение становится несовместимым с условием периодичности функции распределения. Конторович [1] преодолевал эту трудность путем использования ряда некорректных искусственных приемов /учет неинерциальности сопутствующей системы координат и т.д./, при этом зависимость положения границ зоны Бриллюэна от скорости решетки была упущена. Тем не менее, нельзя не отметить, что найденные Конторовичем окончательные линеаризованные уравнения верны.

В настоящей работе будет получена полная система точных, нелинейных уравнений динамики металлов. Для их применимости требуется лишь, чтобы параметры решетки, электронная функция распределения и напряженности электромагнитного поля являлись медленно меняющимися функциями координат и времени в масштабах межатомного расстояния и атомных времен соответственно.

I. ЭНЕРГИЯ И ФУНКЦИЯ ГАМИЛЬТОНА ЭЛЕКТРОНА

Поставленная задача включает в себя формулировку нелинейной теории упругости. Наиболее удобная для наших целей форма последней заключается в следующем /ср. с [2] /. Пусть $\vec{a}_\alpha(\vec{r},t)$, $\alpha = 1,2,3$, - элементарные векторы трансляции кристаллической решетки в данной точке $\vec{r}$ в данный момент времени t. Введем локальные векторы $\vec{a}^\alpha(\vec{r},t)$ обратной решетки, удовлетворяющие соотношениям

$$\vec{a}_\alpha \vec{a}^\beta = \delta_{\alpha\beta} \quad , \quad a_{\alpha i} a^\alpha_\kappa = \delta_{i\kappa} . \qquad /1/$$

Введем также инвариантный метрический "тензор" $g_{\alpha\beta} = \vec{a}_\alpha \vec{a}_\beta$ и обратный ему в силу /1/ "тензор" $g^{\alpha\beta}$, равный, по определению, $\vec{a}^\alpha \vec{a}^\beta$.

Пусть, далее, N^α - есть целочисленные координаты ионов решетки, измеренные в единицах соответствующих векторов периодичности $\vec{a}_\alpha$, так что физически бесконечно малый /т.е. большой по сравнению с периодом решетки, но малый по сравнению с расстоянием, на котором существенно меняются ее параметры/ дифференциал координат $d\vec{r}$ в заданный момент времени может быть записан в виде

$$d\vec{r} = \vec{a}_\alpha dN^\alpha . \qquad /2/$$

При $dN^\alpha = 0$ зависимость координат $\vec{r}$ от времени определяется, очевидно, скоростью $\vec{v}(\vec{r},t)$ решетки: $d\vec{r} = \vec{v}dt$. Поэтому в общем случае вместо /2/ имеем

$$d\vec{r} = \vec{a}_\alpha dN^\alpha + \vec{v}dt . \qquad /3/$$

Подчеркнем, что величины $N^\alpha = N^\alpha(\vec{r},t)$ являются однозначными функциями координат и времени лишь тогда, когда речь идет о деформации кристалла в отсутствие дислокаций. Именно этот случай мы будем в дальнейшем рассматривать.

Путем использования соотношений /1/ из /3/ получаем

$$dN^\alpha = \vec{a}^\alpha d\vec{r} - \vec{a}^\alpha \vec{v} dt ,$$

так что

$$\vec{a}^\alpha = \nabla N^\alpha \quad , \quad \vec{v} = -\vec{a}_\alpha \dot{N}^\alpha . \qquad /4/$$

Три функции $N^\alpha(\vec{r},t)$ полностью определяют, таким образом, конфигурацию и скорость решетки. Их использование /вместо трех компонент вектора смещения/ в качестве искомых функций более удобно в формулировке нелинейной теории упругости.

Следствием соотношений /1/ и /4/ являются следующие выражения для временных производных векторов трансляций

$$\dot{\vec{a}}_\alpha = -(\vec{v}\nabla)\vec{a}_\alpha + (\vec{a}_\alpha\nabla)\vec{v} , \qquad /5/$$

$$\dot{a}^\alpha_i = -(\vec{v}\nabla)a^\alpha_i - \frac{\partial v_\kappa}{\partial x_i} a^\alpha_\kappa .$$

Плотность решетки равна

$$\rho_L = M g^{-1/2} , \qquad /6/$$

где M - масса ионов в элементарной ячейке, $g = det\, g_{\alpha\beta}$. Используя тождество $dg = -g\, g_{\alpha\beta}\, dg^{\alpha\beta}$, легко убедиться в том, что из формул /4/,/5/ автоматически следует уравнение непрерывности

$$\dot{\rho}_L + div\, \rho_L \vec{v} = 0 . \qquad /7/$$

Прежде чем переходить к нахождению фигурирующей в уравнении Больцмана функции Гамильтона H и энергии $\tilde{\varepsilon}$ электрона, заметим следующее. В развиваемой теории предполагается медленность изменения величин $\vec{a}_\alpha$ и $\vec{v}$ в пространстве и во времени и производится разложение по их производным. При этом в выражениях для H и $\tilde{\varepsilon}$ достаточно удержать лишь члены нулевого порядка. В этом приближении величины H и $\tilde{\varepsilon}$ совпадают с их значениями в решетке с произвольными, но постоянными значениями векторов $\vec{a}_\alpha$ и $\vec{v}$, т.е. в однородно деформированном /периодическом/ и равномерно движущемся кристалле.

Пусть сначала $\vec{v} = 0$. Волновая функция электрона, принадлежащего к определенной энергетической зоне и совершающего квазиклассическое движение, должна рассматриваться /см. [3] / как функция дискретных координат N^α, причем

$$\Psi(N^\alpha, t) \sim exp\left\{\frac{i}{\hbar} S_0(N^\alpha, t)\right\} ,$$

где S_0 - классическое действие. В периодической неподвижной решетке, о которой сейчас идет речь, функция Гамильтона, как известно, совпадает с энергией $\varepsilon = \varepsilon(\kappa_\alpha, g^{\alpha\beta})$, являющейся периодической функцией инвариантного квазиимпульса κ_α с периодами $2\pi\hbar$, и зависящей от инвариантных характеристик элементарной ячейки, определяемых величинами $g^{\alpha\beta}$. Производные действия при этом равны

$$\left(\frac{\partial S_0}{\partial t}\right)_{N^\alpha} = -\varepsilon(\kappa_\alpha, g^{\alpha\beta}) , \left(\frac{\partial S_0}{\partial N^\alpha}\right)_t = \kappa_\alpha . \qquad /8/$$

При $\vec{v} \neq 0$ действие S может быть найдено с помощью известного [4] закона преобразования одноэлектронных волновых функций при галилеевских преобразованиях. Имеем

$$S = S_0 + m\vec{v}\vec{r} - \frac{mv^2}{2} t , \qquad /9/$$

где m - масса свободного электрона.

Путем дифференцирования S находим квазиимпульс

$$\vec{p} = \left(\frac{\partial S}{\partial \vec{r}}\right)_t = \kappa_\alpha \nabla N^\alpha + m\vec{v} = a^\alpha \kappa_\alpha + m\vec{v},$$

откуда $\kappa_\alpha = \vec{a}_\alpha(\vec{p} - m\vec{v})$, и функцию Гамильтона

$$H(\vec{p},\vec{r},t) = -\left(\frac{\partial S}{\partial t}\right)_{\vec{r}} = -\kappa_\alpha \dot{N}^\alpha + \varepsilon + \frac{mv^2}{2} = \varepsilon + \vec{p}\,\vec{v} - \frac{mv^2}{2}. \qquad /10/$$

Здесь $\varepsilon = \varepsilon(\vec{a}_\alpha(\vec{p} - m\vec{v}), g^{\alpha\beta})$ - периодическая функция квазиимпульса $\vec{p}$ с периодами $2\pi\hbar\,\vec{a}^\alpha$, определяемыми локальными значениями векторов обратной решетки.

Энергия электрона $\tilde{\varepsilon}$ определяется непосредственно формулой преобразования Галилея

$$\tilde{\varepsilon} = \frac{mv^2}{2} + \vec{v}\vec{p}_0 + \varepsilon,$$

где $\vec{p}_0$ - среднее значение импульса электрона в системе с $\vec{v} = 0$. Это значение равно произведению массы электрона на его скорость, равную производной функции Гамильтона по квазиимпульсу. В результате $\vec{p}_0 = m\,\partial\varepsilon/\partial\vec{p}$, так что

$$\tilde{\varepsilon} = \varepsilon + m\vec{v}\frac{\partial\varepsilon}{\partial\vec{p}} + \frac{mv^2}{2}. \qquad /11/$$

Энергия $\tilde{\varepsilon}$ является периодической функцией квазиимпульса $\vec{p}$.

Функция Гамильтона /10/ непериодична. Именно такая функция обеспечивает совместность кинетического уравнения с условием периодичности функции распределения. Действительно, запишем кинетическое уравнение для электронной функции распределения $f(\vec{p},\vec{r},t)$ с учетом электрического $\vec{E}$ и магнитного $\vec{B}$ полей:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial\vec{r}}\frac{\partial H}{\partial\vec{p}} - \frac{\partial f}{\partial\vec{p}}\frac{\partial H}{\partial\vec{r}} - \frac{\partial f}{\partial\vec{p}}\left\{e\vec{E} + \frac{e}{c}\left[\frac{\partial H}{\partial\vec{p}}\vec{B}\right]\right\} = \hat{I}f, \qquad /12/$$

где $\hat{I}$ - оператор столкновений.

Условие периодичности функции распределения

$$f(\vec{p},\vec{r},t) = f(\vec{p} + 2\pi\hbar\vec{a}^\alpha(\vec{r},t), \vec{r}, t)$$

совместимо с уравнением /12/, поскольку функция, фигурирующая в правой части последнего равенства, удовлетворяет, как нетрудно проверить, тому же уравнению /12/, что и $f(\vec{p},\vec{r},t)$.

Непериодические величины можно вообще исключить из рассмотрения, если в качестве аргумента f вместо $\vec{p}$ ввести величины κ_α.

Функция $f(\kappa_\alpha,\vec{r},t)$ удовлетворяет уравнению

$$\frac{\partial f}{\partial t} + (\vec{v}\nabla)f + \vec{a}_\alpha\nabla f\frac{\partial\varepsilon}{\partial\kappa_\alpha} - \qquad /13/$$

$$- \frac{\partial f}{\partial\kappa_\alpha}\left\{\vec{a}_\alpha\frac{\partial\varepsilon}{\partial\vec{r}} + \vec{a}_\alpha e\vec{E}' + \frac{e}{c}\frac{\partial\varepsilon}{\partial\kappa_\beta}[\vec{a}_\alpha\vec{a}_\beta]\vec{B}'\right\} = \hat{I}f,$$

где $\vec{B}' = \vec{B} - \frac{mc}{e}\,\mathrm{rot}\,\vec{v}$, $e\vec{E}' = e\vec{E} + m\dot{\vec{v}}$,

и дифференцирование всех величин по координатам и времени происходит при постоянных κ_α. Все фигурирующие в уравнении /13/ величины периодичны по κ_α.

Для разложения уравнений по степеням деформации следует положить $N^\alpha = N_0^\alpha - u^\alpha$, где $N_0^\alpha = \vec{a}_0^\alpha\vec{r}$, $\vec{a}_0^\alpha$ - векторы обратной решетки недеформированного кристалла. Величина $\vec{u} = \vec{a}_{0\alpha}u^\alpha$ является тогда вектором смещения обычной теории упругости. Дифференцируя по координатам и времени, найдем линейные по $\vec{u}$ отклонения всех величин от их значений в недеформированном кристалле

$$\delta\vec{a}^\alpha = -\delta\vec{a}_\alpha = -a_{0\kappa}^\alpha\frac{\partial u_\kappa}{\partial\vec{r}}, \qquad \vec{v} = \dot{\vec{u}}$$

$$\delta g_{\alpha\beta} = -\delta g^{\alpha\beta} = 2a_{0i}^\alpha a_{0\kappa}^\beta u_{i\kappa},$$

где $u_{i\kappa}$ - тензор деформации. Линеаризуя формулу /10/, получим

$$H = \varepsilon_0(\vec{p}) + \left(\lambda_{i\kappa}(\vec{p}) + p_i\frac{\partial\varepsilon}{\partial p_\kappa}\right)\frac{\partial u_\kappa}{\partial x_i} + \vec{u}\left(\vec{p} - m\frac{\partial\varepsilon_0}{\partial\vec{p}}\right). \qquad /14/$$

Здесь $\varepsilon_0(\vec{p})$ и $\lambda_{i\kappa}(\vec{p})$ есть соответственно значения функции $\varepsilon(\vec{a}_{0\alpha}\vec{p}, g^{\alpha\beta})$ и ее производные по $u_{i\kappa}$ при $u_{i\kappa} = 0$.

Формула /14/ была впервые получена Л.Д.Ландау и использовалась в работах Конторовича [1].

2. ВЫВОД УРАВНЕНИЙ ДИНАМИКИ РЕШЕТКИ ИЗ ЗАКОНОВ СОХРАНЕНИЯ

Плотности энергии и импульса металла в приближении квазинейтральности, в котором следует пренебрегать током смещения в уравнениях Максвелла, определяются формулами

$$\mathcal{E} = \rho_L\frac{v^2}{2} + \mathcal{E}_L(g^{\alpha\beta}) + \langle\tilde{\varepsilon}f\rangle + \frac{B^2}{8\pi}, \qquad /15/$$

$$\vec{P} = \rho_L\vec{v} + m\left\langle\frac{\partial H}{\partial\vec{p}}f\right\rangle = \rho\vec{v} + m\left\langle\frac{\partial\varepsilon}{\partial\vec{p}}f\right\rangle, \qquad /16/$$

где ρ_L, H, $\tilde{\varepsilon}$ заданы соотношениями /6/, /10/, /11/; $\mathcal{E}_L(g^{\alpha\beta})$ – упругая энергия неподвижной решетки,

$$\langle F \rangle \equiv 2(2\pi\hbar)^{-3}\int d^3p\, F.$$

Интегрирование здесь производится по зоне Бриллюэна, соответствующей локальным векторам $\vec{a}^{\alpha}$, причем границы зоны можно с равным успехом считать или не считать сдвинутыми на $m\vec{v}$, поскольку все интегрируемые в формулах /15/, /16/ величины периодичны по $\vec{p}$.

Уравнения динамики решетки содержатся в уравнении сохранения импульса

$$\dot{P}_i + \frac{\partial \Pi_{ik}}{\partial x_k} = 0, \qquad /17/$$

где Π_{ik} – симметричный тензор потока импульса. Последний определяется, как обычно, условием, чтобы из уравнения /17/, кинетического уравнения /12/ и уравнений Максвелла автоматически следовало сохранение полной энергии, т.е. равенство вида

$$\dot{\mathcal{E}} + div\,\vec{Q} = 0 \qquad /18/$$

с некоторым $\vec{Q}$. Для фактического нахождения этого условия необходимо продифференцировать выражение /15/ по времени и выразить временные производные от всех величин через пространственные производные. При этом важно иметь в виду следующее обстоятельство.

Интегрирование по $\vec{p}$ происходит в области, зависящей от координат и времени. Поэтому операция $\langle\ \rangle$ интегрирования некоммутативна, вообще говоря, с дифференцированием по $\vec{r}$ и t. Коммутаторы определяются некоторыми интегралами от функции распределения по границе зоны Бриллюэна. Аналогичные интегралы возникают при исключении $\dot{f}$ с помощью уравнения /12/ после интегрирования по частям /по $\vec{p}$/ членов, пропорциональных произведению $\partial f/\partial\vec{p}$ на непериодический множитель $\partial H/\partial\vec{r}$. Каждый из этих интегралов равен нулю для металлов с замкнутой чисто электронной поверхностью Ферми, поскольку в этом случае вблизи границ зоны Бриллюэна существует достаточно большая область, в которой $f = 0$. При наличии открытых или дырочных поверхностей это не так, но и в общем случае все поверхностные интегралы взаимно сокращаются. В этом проще всего убедиться, если вместо функции $f(\vec{p},\vec{r},t)$ и уравнения /12/ использовать уравнение /13/ для функции $f(\kappa_\alpha,\vec{r},t)$ с универсальными периодами, провести все необходимые дифференцирования и интегрирования по частям, а затем в выражениях для потоков $\vec{Q}$, Π_{ik} вернуться к первоначальному представлению. При таком порядке вычислений поверхностные интегралы вообще не возникают. Правильные выражения для $\vec{Q}$ и Π_{ik} в общем случае можно получить, если работать в $\vec{p}$ -представлении и иметь в виду простейший случай замкнутых электронных поверхностей Ферми.

Дифференцируем энергию /15/ по времени, используя тождество /7/ и уравнения Максвелла

$$div\,\vec{B} = 0,\quad rot\,\vec{B} = \frac{4\pi}{c}\vec{j},\quad rot\,\vec{E} = -\frac{1}{c}\dot{\vec{B}}, \qquad /19/$$

где $\vec{j}$ – плотность электрического тока, в силу условия электронейтральности равная

$$\vec{j} = -e\langle \frac{\partial\varepsilon}{\partial\vec{p}} f\rangle. \qquad /20/$$

Получаем

$$\dot{\mathcal{E}} = \rho_L\vec{v}\dot{\vec{v}} - \frac{v^2}{2}div\,\rho_L\vec{v} + \dot{\mathcal{E}}_L + m\vec{v}\dot{\vec{v}}\langle f\rangle + m\vec{v}\langle\frac{\partial\dot{\varepsilon}}{\partial\vec{p}}f\rangle +$$
$$+ m\dot{\vec{v}}\langle\frac{\partial\varepsilon}{\partial\vec{p}}f\rangle + \langle\dot{\varepsilon}f\rangle + \langle\tilde{\varepsilon}\dot{f}\rangle - div\,\vec{S} - \vec{E}\vec{j} \qquad /21/$$

где $\vec{S}$ – вектор Пойнтинга.

Поскольку $\varepsilon = \varepsilon(\kappa_\alpha, g^{\alpha\beta})$, где $\kappa_\alpha = \vec{a}_\alpha(\vec{p}-m\vec{v})$, при $\vec{p} = const$ имеем

$$d\varepsilon = \frac{\partial\varepsilon}{\partial\kappa_\alpha}\left\{(\vec{p}-m\vec{v})d\vec{a}_\alpha - m\vec{a}_\alpha d\vec{v}\right\} + 2\lambda_{\alpha\beta}\vec{a}^{\alpha}d\vec{a}^{\beta}. \qquad /22/$$

Здесь

$$\lambda_{\alpha\beta}(\vec{p}) = (\partial\varepsilon/\partial g^{\alpha\beta})_{\kappa_\alpha}.$$

Используя тождество /22/, находим

$$\dot{\varepsilon} = -(\vec{v}\nabla)\varepsilon - m\frac{\partial\varepsilon}{\partial\vec{p}}\dot{\vec{v}} + \frac{\partial v_i}{\partial x_k}\Big(p_i\frac{\partial\varepsilon}{\partial p_k} - mv_i\frac{\partial\varepsilon}{\partial p_k} - mv_k\frac{\partial\varepsilon}{\partial p_i} -$$
$$- 2\lambda_{\alpha\beta}a_i^{\alpha}a_k^{\beta}\Big). \qquad /23/$$

Аналогичным образом преобразуем временную производную от упругой энергии решетки

$$\dot{\mathcal{E}}_L = -(\vec{v}\nabla)\mathcal{E}_L - \frac{\partial v_i}{\partial x_k}2\sigma_{\alpha\beta}a_i^{\alpha}a_k^{\beta},$$

где $\sigma_{\alpha\beta} = \partial\mathcal{E}_L/\partial g^{\alpha\beta}$.

Подстановка в /21/ показывает, что производная $\dot{\vec{v}}$ входит в выражение для $\dot{\mathcal{E}}$ с тем же коэффициентом, что и в выражение $\vec{v}\dot{\vec{P}}$, которое можно получить путем дифференцирования формулы /16/. Это дает возможность легко исключить $\dot{\vec{v}}$. Выражая затем $\dot{\vec{P}}$ и $\dot{f}$ через пространственные производные с помощью соответственно уравнений /17/ и /12/, получим после несложных преобразований

$$\dot{\mathcal{E}} + div\left\{\vec{v}\mathcal{E}_L + \langle\varepsilon\frac{\partial H}{\partial\vec{p}}f\rangle - \frac{v^2}{2}\vec{P} + v_k(\Pi_{ik} + t_{ik}) + \vec{S}\right\} =$$

$$= \frac{\partial v_i}{\partial x_k} \Big\{ \Pi_{ik} + t_{ik} - \rho v_i v_k + \frac{m}{e}(v_i j_k + v_k j_i) + \mathcal{E}_L \delta_{ik} -$$

$$- 2\sigma_{\alpha\beta} a_i^\alpha a_k^\beta - 2\langle \lambda_{\alpha\beta} f\rangle a_i^\alpha a_k^\beta \Big\} + \langle \varepsilon \hat{I} f\rangle, \qquad /24/$$

где $t_{ik} = (1/4\pi)\left(B_i B_k - \frac{1}{2} B^2 \delta_{ik} \right)$ – максвелловский тензор магнитного поля.

В случае, когда $\hat{I}$ есть оператор упругих столкновений электронов с дефектами решетки или между собой, имеем $\langle \varepsilon \hat{I} f\rangle = 0$. При наличии электрон-фононных столкновений электронная энергия не сохраняется, и необходимо включить в рассмотрение фононы. Все предыдущие уравнения, включая кинетическое уравнение /12/, фактически применимы к любым квазичастицам в кристаллах и, в частности, к фононам. Для учета фононов в формулы, содержащие интегралы от электронной функции распределения, достаточно подставить сумму соответствующих интегралов от электронной и фононной функций распределения. Следует, конечно всюду учесть, что для фононов $m = e = 0$. Последний член в формуле /24/ при этом будет равен сумме $\langle \varepsilon \hat{I} f\rangle + \langle \varepsilon_{Ph} \hat{I}_{Ph} f_{Ph} \rangle$, которая обращается в нуль в силу сохранения суммарной энергии квазичастиц.

Сравнение /24/ с /18/ дает возможность определить неизвестные потоки

$$Q_i = v_i \mathcal{E}_L + \langle \varepsilon \frac{\partial H}{\partial p_i} \rangle - \frac{v^2}{2} P_i + v_k (\Pi_{ik} + t_{ik}) + S_i \,, \qquad /25/$$

$$\Pi_{ik} = - t_{ik} + \rho v_i v_k + 2\sigma_{\alpha\beta} a_i^\alpha a_k^\beta - \mathcal{E}_L \delta_{ik} + 2\langle \lambda_{\alpha\beta} f\rangle a_i^\alpha a_k^\beta -$$

$$- \frac{m}{e}(v_i j_k + v_k j_i)\,.$$

Полная система уравнений динамики металла состоит из кинетического уравнения /12/, уравнения сохранения импульса /17/, уравнений Максвелла /19/ и условия квазинейтральности. Последнее имеет вид $(z/M)\rho_L = \langle f\rangle$, где z –суммарный заряд ионов элементарной ячейки. Путем перехода здесь к интегрированию по инвариантному квазиимпульсу κ_α получаем $\langle f\rangle = g^{-1/2}\langle f\rangle_\kappa$, где

$$\langle F\rangle = 2(2\pi\hbar)^{-3} \int d^3\kappa\, F.$$

Подстановка выражения /6/ для плотности решетки позволяет переписать условие квазинейтральности в более удобной форме:

$$\langle f\rangle_\kappa = z = const. \qquad /26/$$

3. ПЛОТНОСТЬ ТОКА В ДЕФОРМИРУЕМОМ МЕТАЛЛЕ

В случае исчезающе малой длины ℓ свободного пробега электронов решением кинетического уравнения является локально равновесная функция $f = f_0(\varepsilon - \mu(\vec{r}, t))$, где $\mu(\vec{r},t)$ – химический потенциал, f_0 – фермиевская функция /для простоты считаем T = 0/. Зависимость от координат и времени определяется условием квазинейтральности /26/.

В силу симметрии однородно деформированной решетки относительно преобразования инверсии плотность тока /20/ в состоянии с $f = f_0$ обращается в нуль, а вместе с ней – и последний член в выражении /25/ для Π_{ik}. Предпоследний член можно преобразовать следующим образом.

Вычислим производную по $g^{\alpha\beta}$ от плотности электронной энергии

$$\mathcal{E}_{el} = \langle \varepsilon f_0 \rangle = g^{-1/2}\langle \varepsilon f_0\rangle_\kappa .$$

Имеем

$$\frac{\partial \mathcal{E}_{el}}{\partial g^{\alpha\beta}} = \mathcal{E}_{el}\sqrt{g}\,\frac{\partial g^{-1/2}}{\partial g^{\alpha\beta}} + g^{-1/2}\Big\{ \langle \lambda_{\alpha\beta} f_0\rangle_\kappa + \langle \varepsilon \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \frac{\partial(\varepsilon - \mu)}{\partial g^{\alpha\beta}} \rangle_\kappa \Big\}.$$

Последний член в фигурной скобке обращается в нуль в силу δ-образного характера производной $\partial f_0/\partial\varepsilon$ и условия /26/. В результате получаем

$$\frac{\partial \mathcal{E}_{el}}{\partial g^{\alpha\beta}} = \frac{1}{2}\mathcal{E}_{el} g_{\alpha\beta} + \langle \lambda_{\alpha\beta} f_0\rangle.$$

Видно, что предпоследний член в выражении для Π_{ik} обусловливает в рассматриваемом случае перенормировку $\mathcal{E}_L \to \mathcal{E}_L + \mathcal{E}_{el}$ энергии, и уравнение /17/ переходит, как и должно быть, в обычное уравнение нелинейной теории упругости.

Для вычисления плотности тока необходимо перейти к следующему по $1/\ell$ приближению и учесть отклонение δf функции распределения от локально-равновесного значения f_0. Вычисление δf удобно производить, исходя из кинетического уравнения /13/. Подставляя в него $f = f_0 + \delta f$ и удерживая δf лишь в интеграле столкновений и в члене с полем $\vec{B}'$, получим

$$-\vec{a}_\alpha \frac{\partial f_0}{\partial \kappa_\alpha}(e\vec{E}' + \nabla\mu) = \hat{I}\delta f + \frac{\partial \delta f}{\partial \kappa_\alpha}\frac{\partial \varepsilon}{\partial \kappa_\beta}\frac{e}{c}\vec{B}'[\vec{a}_\alpha \vec{a}_\beta]. \qquad /27/$$

В левой части этого уравнения опущены члены, четные относительно инверсии $\kappa_\alpha \to -\kappa_\alpha$. Эти члены были бы существенны при вычислении электронной вязкости. В выражение же для тока они вклада не дают. Из вида уравнения /27/ непосредственно следует, что плотность тока равна

$$\vec{j} = \hat{\sigma}(\vec{B} - \frac{mc}{e}\,\mathrm{rot}\,\vec{v})\left\{\vec{E} + \frac{1}{c}[\vec{v}\vec{B}] + \frac{1}{e}\nabla\mu + \frac{m}{e}\frac{d\vec{v}}{dt}\right\},$$

где $d\vec{v}/dt = \dot{\vec{v}} + (\vec{v}\nabla)\vec{v}$, $\hat{\sigma}(\vec{B})$ – тензор проводимости неподвижного однородно-деформированного металла. Плотность тока, как и должно быть в нейтральной системе, галилеевски-инвариантна.

В заключение выражаем благодарность Я.Б.Зельдовичу, М.И.Каганову, Л.П.Питаевскому и Ю.В.Шарвину за полезное обсуждение работы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Конторович В.М. УФН, 1984, 142, с.265 ; ЖЭТФ, 1963, 45, с.1638 ; 1970, 59, 2116.
2. А.Ф.Андреев, М.Ю.Каган, ЖЭТФ, 1984, 86, с.546
3. Лифшиц И.М.,Азбель М.Я., Каганов М.И. "Электронная теория металлов" М."Наука", 1971, с.13.
4. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. "Квантовая механика" - М."Наука", 1974, задача к § 17.

Рукопись поступила в издательский отдел
24 июня 1985 года.

ТЕМАТИЧЕСКИЕ КАТЕГОРИИ ПУБЛИКАЦИЙ ОБЪЕДИНЕННОГО ИНСТИТУТА ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

Индекс	Тематика
1.	Экспериментальная физика высоких энергий
2.	Теоретическая физика высоких энергий
3.	Экспериментальная нейтронная физика
4.	Теоретическая физика низких энергий
5.	Математика
6.	Ядерная спектроскопия и радиохимия
7.	Физика тяжелых ионов
8.	Криогеника
9.	Ускорители
10.	Автоматизация обработки экспериментальных данных
11.	Вычислительная математика и техника
12.	Химия
13.	Техника физического эксперимента
14.	Исследования твердых тел и жидкостей ядерными методами
15.	Экспериментальная физика ядерных реакций при низких энергиях
16.	Дозиметрия и физика защиты
17.	Теория конденсированного состояния
18.	Использование результатов и методов фундаментальных физических исследований в смежных областях науки и техники
19.	Биофизика

В Объединенном институте ядерных исследований начал выходить сборник *"Краткие сообщения ОИЯИ"*. В нем будут помещаться статьи, содержащие оригинальные научные, научно-технические, методические и прикладные результаты, требующие срочной публикации. Будучи частью "Сообщений ОИЯИ", статьи, вошедшие в сборник, имеют, как и другие издания ОИЯИ, статус официальных публикаций.

Сборник "Краткие сообщения ОИЯИ" будет выходить регулярно.

The Joint Institute for Nuclear Research begins publishing a collection of papers entitled *JINR Rapid Communications* which is a section of the JINR Communications and is intended for the accelerated publication of important results on the following subjects:

Physics of elementary particles and atomic nuclei.
Theoretical physics.
Experimental techniques and methods.
Accelerators.
Cryogenics.
Computing mathematics and methods.
Solid state physics. Liquids.
Theory of condenced matter.
Applied researches.

Being a part of the JINR Communications, the articles of new collection like all other publications of the Joint Institute for Nuclear Research have the status of official publications.

JINR Rapid Communications will be issued regularly.

Андреев А.Ф., Пушкаров Д.И. Р17-85-487

Уравнения динамики металлов

Найдена система точных, нелинейных уравнений динамики металлов, состоящая из связанных между собой уравнений теории упругости, кинетического уравнения для проводящих электронов и уравнений Максвелла. Вычислена плотность электрического тока в металле при наличии произвольной, зависящей от времени, деформации.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1985

Перевод авторов

Andreev A.F., Pushkarov D.I. P17-85-487

Metal Dynamics Equations

An exact set of nonlinear metal dynamics equations is obtained consisting of elasticity theory equations, the kinetic equation for conductivity electrons and Maxwell equations. The current density in metals with an arbitrary time-dependent deformation is calculated.

The investigation has been performed at the Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1985