УДК 533.9

# НЕРАВНОВЕСНЫЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЭЛЕКТРОНОВ В ТВЕРДОТЕЛЬНОЙ ПЛАЗМЕ И НЕЭКСТЕНСИВНАЯ ТЕРМОДИНАМИКА

***В.И. Карась***
***ННЦ «Харьковский физико-технический институт», 61108 г. Харьков, Украина***
***В.Е. Новиков***
***НТЦ «Электрофизической обработки» НАНУ, а. я. 61002, г. Харьков, Украина***

Присутствие источников и стоков приводит к формированию неравновесного состояния в пространственно однородных системах, обладающего степенными асимптотиками. Получено решение кинетического уравнений для электронов, рассеивающихся на акустических фононах в твердом теле и показана связь степенных ассимптотик решений с потоками частиц или энергии, возникающими в фазовом пространстве. В работе разрабатывается неэкстенсивная термодинамика неравновесной твердотельной плазмы с источниками и стоками и приведена зависимость потока в фазовом пространстве от параметра неэкстенсивности термодинамики Тсаллиса.

## 1. ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время в связи с развитием мощных источников частиц и излучений постоянно растет интерес к свойствам неравновесных систем частиц. Особенно важным в таких системах является изучение стационарных распределений, которые служат аналогами равновесных распределений. Присутствие источников и стоков может вести к формированию неравновесного состояния в пространственно однородных системах, обладающего степенными асимптотиками. Неприменимость в таких ситуациях приближения локального равновесия связана обычно с наличием потоков в фазовом пространстве. В работе изучены асимптотические свойства таких неравновесных состояний и показана их связь с неэкстенсивной термодинамикой Тсаллиса, получена зависимость параметра неэкстенсивности от потока в фазовом пространстве и интенсивностей источников и стоков.

Квазистационарные неравновесные состояния систем частиц могут быть изучены с помощью решения кинетических уравнений [1-2], учитывающих наличие источников и стоков частиц. Существование степенных распределения частиц по энергии было показано впервые теоретически в [3-6], а экспериментально в [7-8]. В работах [3-4] было показано с помощью преобразований подобия, что кинетическое уравнение Больцмана для пространственно однородных систем имеет точные степенные стационарные решения. В работах [5-6] было показано с помощью прямых вычислений интеграла столкновений Больцмана и Ландау, что степенные распределения

$$f(\varepsilon) = A(\varepsilon)^{-s}, \qquad (1)$$

где $s$ – показатель степени, $\varepsilon = \dfrac{mv^2}{2}$ – энергия частиц, $v$ – скорость частиц, $A$ – константа, являются стационарными решениями кинетических уравнений обращающими потоки частиц или энергии в фазовом пространстве в ненулевые константы. Такие состояния частиц подобны колмогоровским спектрам волн в турбулентном состоянии. Причем эти состояния зависят только от интегральных характеристик источника и стока.

В частности, к неравновесным однородным в пространстве системам, имеющим степенную компоненту, относятся электронные подсистемы полупроводников под воздействием электромагнитного поля с энергией кванта порядка запрещенной зоны [9] или электронная подсистема в металлах, находящихся под воздействием постоянных процессов ионизации при распространении альфа-частиц в веществе [7].

В степенных решениях кинетического уравнения Больцмана, полученных в работах [3-6], показатель степени $s$ зависел лишь от показателя степени зависимости потенциала взаимодействия частиц от взаимного расстояния. В этих работах были также проанализированы как дисперсионные свойства плазмы со степенными распределениями электронов, так и ионизационное равновесие в таких неравновесных стационарных состояниях. В [9-10] было показано, что наличие двух компонент функции распределения: равновесной и неравновесной приводит к существованию плазменных колебаний с линейной дисперсией. Наличие таких распределений и плазменных колебаний может быть существенно для многих взаимодействий в плазме полупроводника, в частности, для фононного [11] и плазмонного механизма сверхпроводимости [9].

Точные решения уравнений Больцмана для пространственно однородного газа в случае специальной модели столкновения (газ максвелловских молекул) впервые были получены в [12] и изучались в литературе [13,18].

Физическая ценность математических моделей для интеграла столкновения в кинетических уравнениях заключается в том, что кинетические уравнения, с одной стороны, становятся более поддающимися аналитическому исследованию и с другой стороны, сохраняют присущие полным нелинейным уравнениям существенные свойства типа законов сохранения и $H$-теоремы.

При исследовании неравновесных состояний электронов в полупроводниковой плазме возможны два существенно отличающихся друг от друга случая. В первом случае источники электронов сосредоточены вблизи энергии Ферми или незначительно превосходят ее, а во втором энергии, при которых возникают неравновесные электроны в полупроводнике, намного превышают энергию Ферми. В первом случае существенными для электронов являются процессы рассеяния на фононах, а во втором можно учитывать только электрон-электронные столкновения в полупроводниковой плазме.

## 2. КИНЕТИКА ЭЛЕКТРОНОВ ПРИ ВЗАИМОДЕЙСТВИИ С ФОНОНАМИ В ПОЛУПРОВОДНИКОВОЙ ПЛАЗМЕ

Исследуем сначала особенности стационарных неравновесных распределений электронов в системах с источниками и стоками при взаимодействии электронов с равновесными фононами в твердотельной плазме.

Для описания кинетики электронов используем пространственно однородное нелинейное (за счет учета квантовой статистики) кинетическое уравнение с источниками и стоками [17,18].

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{1}{4\pi v^2}\frac{\partial}{\partial v}\Pi\{f, v\} + \Psi(v). \qquad (2)$$

Для изотропной среды удобно сделать замену переменной $x = \dfrac{v^2}{2}$, $F(x) = 4\pi\sqrt{2x}\, f(\sqrt{2x})$ (здесь и далее v – скорость частицы, нормированная на среднюю скорость частиц $v_{0t}$ в начальном состоянии).

В этой статье мы рассматриваем важный класс источников – источники, которые локализованы в пространстве энергий $D(x) = Q_i x_i \delta(x - x_i)$. Стоки часто используются в форме $-\nu(x)F(x)$. Воспользовавшись этими моделям, запишем выражение, которое описывает источники и стоки в виде:

$$\Psi(x) = D(x) - \nu(x)F(x). \qquad (3)$$

Для взаимодействующих заряженных частиц (интеграл столкновений Ландау) выражение для потока в кинетическом уравнении имеет особенно простой вид:

$$\Pi(\{f\}, v) = D(v)\frac{\partial f}{\partial v} + F(v)f(v)(1 - f(v) \qquad (4)$$

где *D(v)* – коэффициент диффузии для движения частиц в фазовом пространстве.

В области постоянного потока уравнение для стационарной функции распределения (для указанного выше типа взаимодействия) имеет вид

$$T_0\frac{\partial f}{\partial \varepsilon} + f - f^2 = \frac{P}{\varepsilon^2}. \qquad (5)$$

После замены $f(\varepsilon) = -\dfrac{T_0}{y(\varepsilon)}\dfrac{dy(\varepsilon)}{d\varepsilon}$ это уравнение преобразуется в линейное уравнение второго порядка

$$T_0^2\frac{d^2y(\varepsilon)}{d\varepsilon^2} + T_0\frac{dy(\varepsilon)}{d\varepsilon} + \frac{P}{\varepsilon^2}y(\varepsilon) = 0. \qquad (6)$$

Общее решение уравнения (7) имеет следующий вид

$$y(\varepsilon) = C_1 I_\nu\left(\frac{\varepsilon}{2T}\right) + C_2 K_\nu\left(\frac{\varepsilon}{2T}\right),$$

$$\nu = \sqrt{\frac{1}{4} - \frac{P}{T^2}}. \qquad (7)$$

Константы интегрирования определяются из условия сшивки с равновесными решениями (решениями соответствующими нулевому потоку) в областях вне инерционного интервала.

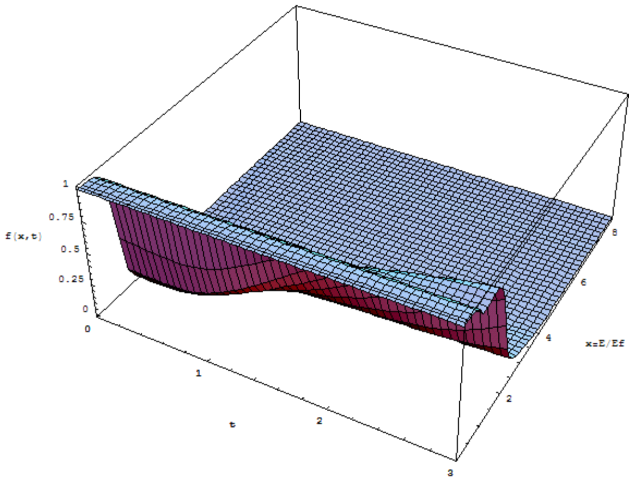

*Рис.1. Поверхность, представляющая зависимость функции распределения от времени и энергии*

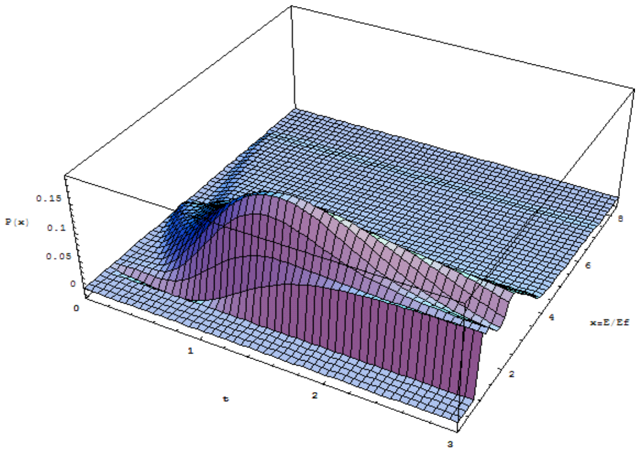

*Рис.2. Поверхность, представляющая зависимость потока частиц в фазовом пространстве от времени и энергии электронов*

Анализ неравновесного решения показывает, что отклонения от равновесия при ненулевых значениях потока сосредоточены в области энергий порядка энергии Ферми- $E_F$.

Характер эволюции функции распределения продемонстрирован на рис. 1-2. На рис. 1 и 2 показана эволюция функции распределения и потока частиц в фазовом пространстве к своим стационарным значениям под воздействием источников и стоков. Как видно, в конце эволюции по времени образуются области с квазипостоянным по энергии потоком в фазовом пространстве, а в области постоянства потока образуются квазистепенные участки на функции распределения. Области нулевого потока (см. рис. 2) соответствует равновесная функция Ферми (см. рис. 1).

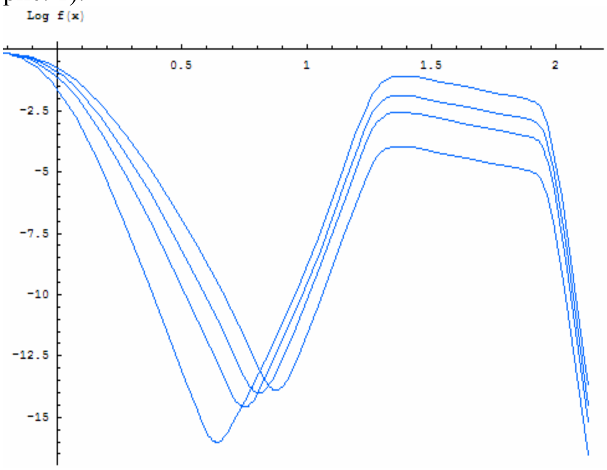


*Рис.3. Графики функций распределения в двойном логарифмическом масштабе при* $T_e$ *=0.1. Кривые соответствуют P=-1.81,-0.81,-0.4, -0.1*

В неравновесной области функции распределения хорошо аппроксимируются степенными функциями распределения при этом показатель степени практически не изменяется с ростом интенсивности источника, что хорошо видно из рис. 3, на котором изображена стационарная функция распределения в двойном логарифмическом масштабе между источником и стоком.

## 3. НЕЭКСТЕНСИВНАЯ ТЕРМОДИНАМИКА ТСАЛЛИСА

Как уже отмечалось выше, стационарные неравновесные распределения частиц в фазовом пространстве для пространственно однородных систем играют такую же роль, как и распределение Максвелла в термодинамике Гиббса. Наличие таких сильных отклонений от экспоненциальной зависимости должны приводить к серьезным изменениям в термодинамических свойствах систем.

Отметим, что в изучении термодинамики сильно неравновесных систем в последние 15 лет были сделаны большие достижения, также приводящие к негиббсовским распределениям (степенным) в термодинамике. Ниже приведем краткий обзор результатов, необходимых нам для дальнейшего.

В 1988 г. в работе [14] Константино Тсаллисом была предпринята попытка расширить область применения термодинамики и статистической механики на системы, в которых энтропия не обладает свойством экстенсивности.

Как известно, в стандартной формулировке термодинамики состояние равновесия отвечает максимально возможному значению энтропии при данных значениях энергии, объема и т.д. Кроме того предполагается, что энтропия является экстенсивной величиной, что сразу приводит к ряду нетривиальных утверждений.

Напомним определение экстенсивной величины. Пусть наша система состоит из двух *независимых* подсистем A и B, тогда энтропию всей системы можно получить сложением энтропий подсистем:

$$S(A+B)=S(A)+S(B). \tag{6}$$

В статистической физике энтропия выражается через число микросостояний системы. Привлекая гипотезу молекулярного хаоса (любые сталкивающиеся молекулы были *до столкновения* никак не скоррелированы) можно получить выражение Больцмана для энтропии замкнутой системы

$$S=-\sum_i p_i \ln(p_i)\,; \tag{7}$$

здесь $i$ – номер микросостояния системы, $p_i$ – вероятность нахождения системы в этом микросостоянии.

После работы [14] было изучено большое количество систем, для которых нарушается экстенсивность энтропии и больцмановская термодинамика. Такими системами является, например, холодное облако межзвездной пыли достаточно больших размеров, системы адронов при высокоэнергетических столкновениях, из-за больших корреляций при взаимодействии (см. [15])]). Существуют и другие системы, которые не могут быть описаны больцмановской термодинамикой. Причины, по которым термодинамика Больцмана неприменима, могут быть разными. Это могут быть, например, "эффекты памяти", когда эволюция системы в данный момент времени зависит не только от параметров системы в этот конкретный момент времени, но и от ее параметров некоторое время назад.

"Эффекты" памяти могут легко привести к нарушению гипотезы молекулярного хаоса. Эти эффекты означают, что отдельные частицы перед столкновением "помнят" друг друга, их движение не является полностью нескорелированным и необходимы уточнения термодинамических соотношений с учетом дополнительных корреляций. Попытка такого пересмотра и содержится в термодинамике Тсаллиса. Формально, Тсаллис взял стандартное выражение для энтропии и функции распределения и вместо логарифма и экспоненты ввел новые функции на основе степенной зависимости:

$$\ln(x)\to \ln_q(x)=\frac{x^{1-q}-1}{1-q} \tag{8}$$

$$\exp(x)\to \exp_q(x)=\left(1+(1-q)\,x\right)^{1/(1-q)} \tag{9}$$

с неким числовым параметром $q$. Заметим, что при $q$, стремящемся к 1, $\ln_q(x)$ и $\exp_q(x)$ переходят в настоящие логарифм и экспоненту, в чем можно убедиться простым дифференцированием. Новая формула для $q$-энтропии выглядит так:

$$S_q=-\sum_i p_i^q \ln_q(p_i)=\frac{1-\sum_i p_i^q}{q-1}. \tag{10}$$

Если $q$–>1, то $q$ – энтропия переходит в стандартную больцмановскую энтропию.

Главное следствие такой замены: $q$ – энтропия является уже не экстенсивной функцией. Если всю систему разбить на две независимых подсистемы A и B, то мы получим:

$$S_q(A+B) = S_q(A) + S_q(B) + (1-q)S_q(A)S_q(B) \quad .(11)$$

Итак, параметр $q$ – это мера неэкстенсивности системы. Как видно, величина $q$ пока ничем не ограничена и может принимать любые вещественные значения, однако некоторые ограничения могут возникнуть в той или иной конкретной задаче.

Показано (см. [15]), что условие максимума $q$-энтропии приводит к степениподобным функциям

$$p(\varepsilon) = \exp_q\left(-\left(\varepsilon/T\right)\right). \tag{12}$$

Выбранная функциональная форма $q$-энтропии достаточно произвольна и ее основной смысл состоит в моделировании неэкстенсивности.

Обычная термодинамика получается из при значении параметра $q$=1. Если же $q$ отлично от 1, то мы уже имеем физическую ситуацию, качественно отличающуюся от равновесной термодинамики.

## 4. ОСОБЕННОСТИ КИНЕТИКИ ЭЛЕКТРОНОВ В ПОЛУПРОВОДНИКОВОЙ ПЛАЗМЕ ПРИ ЭНЕРГИЯХ, ПРЕВЫШАЮЩИХ ЭНЕРГИЮ ФЕРМИ

При изучении релаксации электронов в области больших энергий в полупроводниковой плазме наиболее адекватной является форма кинетического уравнения в виде нелинейного уравнения Фоккер-Планка с интегралом столкновений в форме Ландау. Наиболее удобной для анализа является его дивергентная форма (2) с приведенным к симметричному виду потоком [16]:

$$\Pi(v,\{f(v)\}) = -\frac{1}{v}\frac{\partial}{\partial v}\int_0^v [f(v)P(x) - f(x)P(v)]x^2 dx,$$

$$P(x) = 2\int_v^\infty f(x)x\,dx \tag{13}$$

Вычислим поток (13) в пространстве скоростей для степениподобной функции (12). Результат вычисления дает функцию:

$$\Pi(v,q) = A\Bigg(C_2\,{}_2F_1\left(\frac{3}{2},\frac{1}{q-1};\frac{5}{2};-(q-1)v^2\right) - 3\left(5C_1 - C_2\exp_q(v^2)\,{}_2F_1\left(\frac{5}{2},\frac{1}{q-1};\frac{7}{2};-(q-1)v^2\right)\right)\Bigg) \tag{14}$$

где константы:

$$A = \frac{(q-1)^2 v^{\frac{q-3}{q-1}}\left(1+(q-1)v^2\right)^{\frac{1+q}{1-q}}\Gamma\left(\frac{1}{q-1}\right)\Gamma\left(\frac{2-q}{q-1}\right)}{15\pi^3\Gamma^2\left(\frac{5-3q}{2q-2}\right)}$$

$$C_1 = v^{\frac{2}{q-1}} + 2(q-1)v^{\frac{2q}{q-1}} + (q-1)^2 v^{2+\frac{2q}{q-1}} -$$

$$-\left(\frac{1}{q-1}\right)^{\frac{1-2q}{q-1}}\left(1+\frac{1}{(q-1)v^2}\right)^{\frac{1}{1-q}}\left((q-1)^{-\frac{q}{q-1}} + (q-1)^{-\frac{1}{q-1}}v^2\right)^2$$

$$C_2 = 2(q-1)v^{2+\frac{2q}{q-1}}\exp_q(v^2)$$

Эта функция представляет собой поверхность в пространстве *(v,q),* изображенную на рис. 4. Стационарным состояниям соответствуют области, в которых поток не зависит от скорости. Из рисунка видно, что существуют две такие области. Первая область – *q=1* – соответствует равновесному максвелловскому решению*,* а вторая область соответствует состояниям со степенными асимптотиками, полученными в работах [3-6]

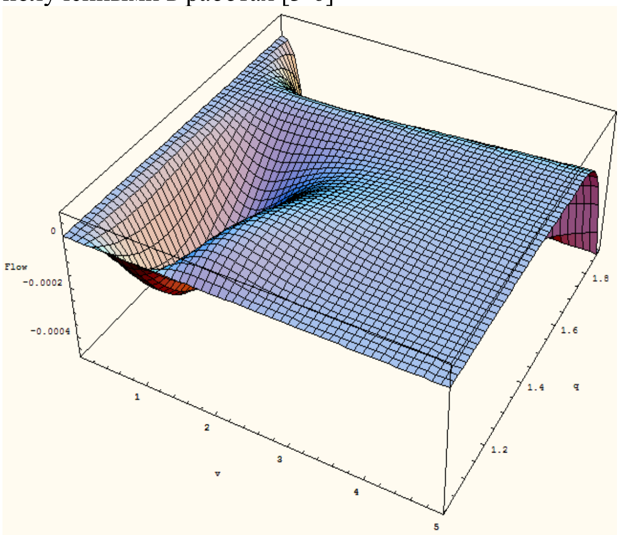


*Рис. 4. Поверхность, представляющая зависимость потока частиц в фазовом пространстве от скорости и параметра неэкстенсивности*

Отметим, что формальное обобщение равновесной функции распределения Максвелла-Гиббса с помощью функции (12) на неравновесные состояния в случае квантовой статистики становится неоднозначным. Действительно, равновесную функцию Ферми можно представить в двух эквивалентных формах:

$$f(\varepsilon) = \frac{1}{1+\exp\left(\frac{\varepsilon - E_f}{T}\right)} = \frac{\exp\left(-\frac{\varepsilon - E_f}{2T}\right)}{\exp\left(\frac{\varepsilon - E_f}{2T}\right) + \exp\left(-\frac{\varepsilon - E_f}{2T}\right)}.$$

Заменяя экспоненту в этих представлениях на функцию (12), мы получаем два неэквивалентных обобщения на неравновесные состояния для функции Ферми. Обе эти функции при $q \to 1$ переходят в функцию распределения Ферми, однако, функция распределения

$$f_q(\varepsilon) = \frac{\exp_q\left(-\frac{\varepsilon - E_f}{2T}\right)}{\exp_q\left(\frac{\varepsilon - E_f}{2T}\right) + \exp_q\left(-\frac{\varepsilon - E_f}{2T}\right)} \tag{15}$$

при отклонении от равновесия имеет изменения сосредоточенные вблизи окрестности энергии Ферми, а вторая функция

$$f_q(\varepsilon) = \frac{1}{1+\exp_q\left(\frac{\varepsilon - E_f}{T}\right)} \tag{16}$$

с ростом неравновесности имеет степенную асимптотику при больших энергиях. Можно убедиться, что функция распределения (15) хорошо аппроксимирует функцию распределения для электронов, формирующуюся при взаимодействии с фононами, а функция распределения (16) аппроксимирует стационарные неравновесные решения кинетического уравнения типа Ландау (13) с учетом поправок, связанных со статистикой Ферми.

## 5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Как правило, термодинамические соотношения для макроскопических переменных не зависимы от специфического потенциала взаимодействия в системе. Мы надеемся что, макроскопические характеристики стационарных неравновесных состояний, обладают такими же свойствами универсальности и точные решения кинетических уравнений с источниками и стоками имеют фундаментальное значение для интерпретации неравновесной статистической термодинамики в открытых системах, далеких от локальных состояний равновесия.

## ЛИТЕРАТУРА


1. Б.А. Трубников *// Вопросы теории плазмы* / Под ред. М.А. Леонтовича. Вып.1, 1963, с. 98, М.: Госатомиздат.
2. В.П. Силин *// Введение в кинетическую теорию газов*. М.: Наука, 1971.
3. А.В. Кац, В.М. Конторович, С.С. Моисеев, В.Е. Новиков. Степенные решения кинетического уравнения Больцмана, описывающие распределение частиц с потоками по спектру // *Письма в ЖЭТФ.* 1975, т.21, с.13.
4. В.И.Карась, С.С.Моисеев, В.Е.Новиков. Механизм образования “быстрых электронов” эмиссии из металла, индуцированного лазером // *Письма в ЖЭТФ*. 1975 т.21, с.525.
5. Е.Н. Батракин, И.И. Залюбовский, В.И. Карась, С.И. Кононенко. // Исследование вторичной электронной эмиссии из тонких пленок Al, Cu, Be, индуцированной пучком протонов 1 MeV // *ЖЭТФ.* 1985, т. 89, стр.1098.
6. Е.Н. Батракин, И.И. Залюбовский, С.С. Моисеев и др. // *Поверхность.* 1986, №12, с.82.
7. В.Е.Новиков, С.С.Моисеев, В.П.Семиноженко. О возможности индуцирования акустических плазменных колебаний в неравновесных полупроводниках // *Физика и техника полупроводников.* 1980, т.14, вып.2, с.402-403.
8. В.Е. Новиков, С.С. Моисеев и др. Стационарные неравновесные состояния частиц максвелловского типа с потоками по спектру // *Радиофизика и радиоастрономия.* 1999, т.4, №2, с.160-168.
9. В.И. Карась, В.Е. Новиков, С.С. Моисеев, В.П. Семиноженко. Роль локально неравновесных по энергии распределений электронных возбуждений в повышении Тс // *ФНТ.* 1977, т.3, с.696.
10. А.В.Бобылев // *ДАН СССР.* 1976, т.20, с.820.
11. М. Эрнст Точные решения нелинейного уравнения Больцмана и близких кинетических уравнений // *Уравнения Больцмана*. М.: Мир, 1986.
12. C.Tsallis // *J.Stat.Phys*. 1988, v.52, p.479.
13. C.Tsallis // *Brazilian J.Phys.* 1999, v.29, p.1.
14. В.И. Карась, И.Ф. Потапенко. Численное моделирование формирования стационарных неравновесных распределений частиц со степенными потенциалами взаимодействия // *Физика Плазмы*, 2002, т.28, вып.10, с.1-10.
15. В.Е. Новиков, С.С. Моисеев, А.В. Тур, В.В. Яновский. Универсальные неравновесные распределения фотонов и динамика их образования // *ЖЭТФ.* 1984, т.86, вып.3, с.920-928.
16. В.Е. Новиков, А.В. Тур, В.В. Яновский. "Скейлинг" в турбулентности и кинетике // *Проблемы теоретической физики*. Киев, Наукова думка, 1986, с.164-173.
17. Д. Петрина, А. Мищенко // *ДАН СССР*. 1988, т.228, с.338-342.