

и др.

В. Л. ГУРЕВИЧ

КИНЕТИКА
ФОНОННЫХ СИСТЕМ

БИБЛИОТЕКА
ИТФ ИМ. П. Д. ЛАНДАУ



МОСКВА «НАУКА»
ГЛАВНАЯ РЕДАКЦИЯ
ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ЛИТЕРАТУРЫ
1980

22.37

Г 95

УДК 539.2

В. Л. Гуревич. *Кинетика фононных систем*.— М.: Наука. Главная редакция физико-математической литературы, 1980.

В книге излагаются основные принципы физической кинетики, ее методы и их применения для описания кинетического поведения фононных систем.

В ней выводится кинетическое уравнение для фононной функции распределения, исследуется симметрия вероятностей фононного рассеяния, получены *H*-теорема и закон диссипации механической энергии для фононных систем.

Излагается теория теплопроводности кристаллических диэлектриков, а также распространения и затухания температурных волн второго звука. Подробно рассматривается диэлектрическая релаксация в совершенных кристаллах и кристаллах с дефектами. Значительное место в книге занимает теория вязкости (внутреннего трения) и различных акустических явлений. Обсуждаются особенности установления равновесия в системе акустических фононов с почти линейным законом дисперсии.

Г 20403 — 043 107-80. 1704060000
053(02)-80

© Издательство «Наука». Главная редакция физико-математической литературы, 1980

Предисловие

Макроскопическая физика, помимо учения о равновесном состоянии макроскопических тел, включает также обширный раздел, изучающий их неравновесные состояния и процессы, протекающие в таких состояниях. Этот раздел макроскопической физики получил название *физической кинетики*.

Составная часть макроскопической физики, физическая кинетика, имеет дело с системами, состоящими из чрезвычайно большого числа частиц. Соответственно, закономерности, которые она описывает, являются статистическими закономерностями; они выполняются тем точнее, чем больше число составляющих систему частиц, и теряют всякий смысл, когда это число мало.

В этой книге будет идти речь о методах кинетического описания одного класса макроскопических физических систем — *фононных систем*. Соответствующие результаты могут относиться к таким физическим объектам, неравновесные (так же как и термодинамические) свойства которых определяются законами дисперсии и взаимодействия колебательных квантов — *фононов*. В первую очередь тут имеются в виду кристаллические диэлектрики. Именно фононы и определяют в значительной мере их кинетическое поведение ¹⁾.

Тем не менее, само слово «диэлектрики» я предпочел не включать в заголовок книги. С одной стороны, кинетическое поведение диэлектриков не всегда, вообще говоря, определяется одними фононами. Тут могут играть определенную роль и экситоны, и некоторые другие виды элементарных возбуждений. А с другой стороны, материал книги может относиться не к одним только кристаллическим диэлектрикам. Мы знаем очень много различных типов конденсированных сред, в которых существуют совершенно разные виды возбужденных состоя-

¹⁾ В таких процессах, которые не изменяют их структуры.

ний. Однако у всех конденсированных сред есть нечто общее, а именно, то, что они состоят из атомов, а эти атомы могут совершать малые колебания относительно своих равновесных положений.

Соответственно, можно указать большое разнообразие кинетических явлений, целиком определяющихся этими колебаниями. В итоге оказывается, что, помимо кристаллических диэлектриков, есть еще ряд физических систем, кинетическое поведение которых при надлежащих обстоятельствах определяется фононами. Сюда можно отнести и сверхтекучий гелий — гелий II — при достаточно низких температурах (о нем также пойдет речь в книге) и (с определенными оговорками) аморфные диэлектрики (стекла), а в ряде случаев и электропроводящие кристаллы (металлы, полупроводники).

С точки зрения кинетического поведения фононные системы проще многих других систем. Однако даже у этих, простейших систем, кинетическое поведение отличается большим богатством и разнообразием. Соответственно, при написании книги я столкнулся с необходимостью произвести отбор из огромного материала, существующего в виде оригинальных статей и обзоров. Принцип отбора заключается, в основном, в следующем.

Главное внимание в книге уделено изложению основных принципов и методов физической кинетики. Те и другие используются для решения и анализа большого числа разнообразных конкретных задач кинетики фононных систем.

При решении конкретных задач сравнительно немного внимания уделяется деталям (например, таким, которые определяются теми или иными специальными характеристиками фононного спектра или взаимодействия или же соотношениями между различными механизмами релаксации). Как правило, не обсуждаются также вопросы, требующие для анализа привлечения большого количества экспериментальных данных.

В книге формулируются методы, позволяющие в принципе получить количественные выражения для наблюдаемых величин таких, например, как различные кинетические коэффициенты. Подробно анализируется зависимость этих величин от температуры, частоты и других параметров, даются их порядковые оценки.

Часто соответствующие методы расчета основаны на применении кинетического уравнения для функции распределения фононов. Возможность получить решение этого интегро-дифференциального уравнения в аналитическом виде есть, скорее, не правило, а исключение. Более того, даже тогда, когда выражение для кинетического коэффициента все же удается представить в замкнутом виде (независимо от того, получилось ли оно в результате решения кинетического уравнения или же путем прямого расчета), в ответ обычно входят ангармонические коэффициенты, для большинства фононных систем в настоящее время неизвестные. Поэтому может возникнуть вопрос, не означает ли данная в книге математическая формулировка кинетических задач простое переписывание символов. Ведь порядковыми оценками¹⁾, к которым в конце концов все дело и сводится, можно было бы ограничиться с самого начала.

На мой взгляд, однако, подход, основанный на одних только оценках, в физической кинетике недостаточен. Во-первых, количественная постановка задачи позволяет дать общее исследование получающихся решений и тем самым выяснить, какие их свойства не зависят от приближений, использованных при оценках. А во-вторых, в настоящее время в физическую кинетику (так же как и в другие разделы физики) интенсивно проникают численные методы расчета. И можно надеяться, что задача вычисления кинетических коэффициентов с достаточной точностью окажется в ряде конкретных случаев доступной для ЭВМ уже в недалеком будущем.

Основные методы анализа кинетических задач, которые используются в книге, — это либо уже упоминавшееся кинетическое уравнение, либо прямой квантовомеханический расчет. Иногда оба метода приводят к одинаковым результатам; во всех таких случаях я старался провести их сопоставление.

В кинетике получил широкое распространение метод Чапмена — Энскога решения кинетических задач при слабонеоднородных и нестационарных условиях. В кни-

¹⁾ Которые дают зависимость кинетических величин от параметров задачи, но, вообще говоря, не позволяют определить сколько-нибудь точно безразмерных численных коэффициентов, входящих в ответ,

ге подробно излагается этот метод применительно к неравновесным фононам на примере таких явлений, как второй звук в диэлектриках и его взаимодействие с обычным звуком.

Изложение большинства вопросов я стремился вести с достаточной полнотой. Поэтому, ссылаясь на оригинальные работы в тексте книги (иногда — в подстрочных примечаниях) я ограничился указанием имен авторов, которым принадлежат соответствующие результаты, и года их публикации. Сам способ вывода этих результатов отнюдь не во всех случаях совпадает с методом оригинала, а вытекает из единого плана, которому подчинена книга.

Более подробные ссылки, данные в подстрочных примечаниях, имеют двойной характер. Это либо ссылки на учебники, где изложены вопросы (относящиеся к смежным разделам физики), которые читатель должен знать, прежде чем приступить к изучению соответствующего места книги. Либо же это ссылки на оригинальные работы или обзоры, призванные помочь читателю, заинтересованному в более углубленном знакомстве с каким-нибудь вопросом, о котором говорится в книге. Они отнюдь не имеют приоритетного характера, а имеют целью дать читателю первоначальную ориентировку в библиографии.

Я буду весьма благодарен читателям за любые критические замечания, касающиеся как содержания книги, так и авторских имен, которые в ней следовало бы дополнить упоминуть. Надеюсь, что в будущем мне представится возможность учесть эти замечания.

Для чтения книги необходимо знакомство с механикой — классической и квантовой, термодинамикой и статической физикой, а также основами электродинамики, гидродинамики и теории упругости.

В процессе работы над книгой мне оказали большую помощь критикой и советами А. Г. Аронов, С. В. Ганцевич, Л. Э. Гуревич, Ю. Н. Образцов, Д. А. Паршин и Г. Е. Пикус. Им я выражаю свою самую глубокую и сердечную благодарность.

Основные обозначения

- \propto — пропорционально
 \approx — приблизительно равно
 \cong — порядка, равно по порядку величины
 По дважды встречающемуся векторному значку производится суммирование.
 $A_{\gamma\gamma'}$ — матрица гармонических силовых постоянных
 $\mathcal{A}_{\gamma\gamma'}$ — динамическая матрица
 $a_n = n_1 a_1 + n_2 a_2 + n_3 a_3$ — произвольный период решетки,
 a_i — основные периоды решетки, n_i — целые числа, совокупность которых обозначается n
 a — среднее расстояние между атомами решетки
 a — номер акустической ветви колебаний
 $B_{\gamma\gamma'n''}$ — матрица ангармонических силовых постоянных третьего порядка
 $b_{jj'j''}(k, k', k'')$ — ангармонические силовые коэффициенты
 $b = m_1 b_1 + m_2 b_2 + m_3 b_3$ — вектор обратной решетки, b_i — основные векторы обратной решетки, m_i — целые числа.
 C — удельная теплоемкость
 \hat{c}_{kj}^+ , \hat{c}_{kj}^- — операторы рождения и уничтожения фонона
 D — электростатическая индукция
 D' — диссипативная часть электростатической индукции
 $b(k) = d(k\xi)/dk$ — функция, характеризующая дисперсию скорости звука
 E — напряженность электрического поля
 E — плотность механической энергии
 $E^{(s)}$ — плотность энергии упругих колебаний
 \mathcal{E} — полная энергия
 $\mathcal{E}_{кин}$ — кинетическая энергия
 $\mathcal{E}^{(s)}$ — энергия упругих колебаний
 \mathcal{E}_m — механическая энергия
 \mathcal{E}_a — энергия атомного порядка
 $e_\gamma(k, j)$ — вектор поляризации колебания (k, j)
 F — плотность свободной энергии
 $-F_{ij}$ — тензор плотности потока квазимпульса
 $-F'_{ij}$ — диссипативная часть тензора плотности потока квазимпульса
 $f(k'', k, k') = k''\xi(k'') - k\xi(k) - k'\xi(k')$
 G — плотность потока энергии
 $G^{(\Phi)}$ — плотность потока энергии, переносимой фононами
 $G^{(s)}$ — плотность потока энергии упругих колебаний

- $G(k, j; k', j')$ — функция, через которую выражается вероятность рассеяния фонона дефектом
- \mathcal{S} — полный поток энергии, переносимый пучком фононов
- $g = \partial\Omega/\partial k$ — групповая скорость фонона
- H — напряженность магнитного поля
- \mathcal{H} — угловая плотность энергии фононов
- \mathcal{H} — компоненты плотности потока энергии в k -пространстве
- \hat{I} — линейризованный оператор столкновений
- \hat{I}_N — оператор нормальных столкновений
- \hat{I}_U — оператор столкновений по отношению к процессам переброса
- \hat{I} — линейризованный оператор столкновений, действующий на функцию $\Delta N/N_0(N_0 + 1)$
- j — номер колебательной ветви
- k — квазиволновой вектор колебания решетки
- k_0 — предельное значение волнового вектора фононов
- L — характерный размер образца
- l — длина свободного пробега фононов
- \hat{L} — оператор бесконечно малого поворота в k -пространстве
- M — масса элементарной ячейки
- M_p — масса атома решетки сорта p
- m_{ii} — тензор деформационного потенциала
- N_{kj} — число фононов в состоянии (k, j) ; функция распределения фононов
- $N_0(\Omega_{kj})$ — равновесная функция распределения фононов
- ΔN — неравновесная добавка к функции распределения фононов
- НОВ**
- N — полное число элементарных ячеек в кристалле
- N_d — полное число дефектов в кристалле
- n — число элементарных ячеек в единице объема
- n_d — концентрация дефектов
- $n_0(x) = (e^x - 1)^{-1}$ — функция Планка
- o — номер оптической ветви колебаний
- P — поляризация
- P — плотность квазиимпульса
- \mathcal{P} — угловая плотность импульса фононов
- \mathcal{P}_{ij} — плотность потока импульса в k -пространстве
- p — давление
- p — номер атома в элементарной ячейке
- Q — поток тепла
- q — волновой вектор звука
- $R_{npi} = R_{ny}$ — i -я компонента вектора смещения p -го атома в n -й элементарной ячейке
- $\mathcal{R} = (1 - \kappa V/v) T^{-1}$ — обратная эффективная температура
- r — радиус-вектор с компонентами r_1, r_2, r_3
- S — плотность энтропии
- \mathcal{S} — энтропия
- s — число атомов в элементарной ячейке
- s — угловая плотность энтропии
- T — температура

- U — плотность внутренней энергии
- $U^{(e)}$ — плотность упругой внутренней энергии
- \mathcal{U}_2 — потенциальная энергия решетки в гармоническом приближении
- $\mathcal{U}_3, \mathcal{U}_4$ — ангармоническая потенциальная энергия решетки третьего и четвертого порядка
- u — вектор смещения сплошной среды
- u_{ii} — тензор деформации
- $u = \frac{\rho}{v} \frac{\partial v}{\partial \rho}$
- V — дрейфовая скорость
- \mathcal{V} — объем системы
- v — скорость звука в гелии II
- \bar{v} — средняя скорость звука в кристалле
- v_l — скорость продольного звука
- v_t — скорость поперечного звука
- v — объем элементарной ячейки
- W — вероятность квантовомеханического перехода в единицу времени
- w — вектор, пропорциональный относительно смещению под решеток
- w_{II} — скорость второго звука
- w_0 — вероятность рассеяния фонона в единицу времени отдельным дефектом
- x_1, x_2, \dots — обобщенные координаты физической системы
- X_1, X_2, \dots — обобщенные силы, соответствующие этим координатам
- Z — относительное изменение эффективной температуры фононов
- α — коэффициент поглощения электромагнитной энергии
- α_{ii} — тензор коэффициентов теплового расширения
- $\beta_{i,lm}$ — тензор пьезоэлектрических модулей
- $\beta_{ii} = \partial^2 \tilde{U} / \partial w_i \partial E_i$
- $\beta_{jj'j''}(k, k', k'') = \frac{\pi \hbar}{4\rho\Omega\Omega'\Omega''} |b_{jj'j''}(k, k', k'')|^2$
- γ — коэффициент поглощения звука
- γ_{ab} — кинетические коэффициенты
- ϵ_{ii} — тензор диэлектрической проницаемости
- $\epsilon^{(0)}$ — статистическая диэлектрическая проницаемость полярного диэлектрика
- $\epsilon^{(\infty)}$ — диэлектрическая проницаемость полярного диэлектрика при $\omega \gg \Omega_l$
- ϵ'' — мнимая часть диэлектрической проницаемости
- ζ_{ii} — тензор коэффициентов диэлектрической релаксации
- η_{ilmn} — тензор коэффициентов вязкости
- Θ — температура Дебая
- $\kappa = k/k$ — единичный вектор в направлении k
- κ_{ii} — тензор теплопроводности
- $\Lambda_{jj'}(k)$ — электрофононный потенциал
- $\Lambda'_{jj'}(k) = \chi \Lambda_{jj'}(k)$

λ_{ilmn} — тензор модулей упругости
 μ_{ilmn} — тензор поперечной вязкости
 ν_{ilmn} — тензор фонон-гидродинамической вязкости

$$d\xi_k \equiv \sum_j \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}$$

$\xi(k)$ — функция, характеризующая отклонение фононного закона дисперсии от линейного

$d\theta$ — элемент телесного угла

ρ — плотность

σ_{il} — тензор упругих напряжений

σ'_{il} — диссипативная часть тензора упругих напряжений

$$\sigma(N) = (N+1) \ln(N+1) - N \ln N$$

$d\sigma$ — дифференциальное сечение рассеяния фонона дефектом

τ — время свободного пробега фононов

τ_N — время свободного пробега по отношению к нормальным процессам

τ_U — время свободного пробега по отношению к процессам переброса

τ_{\parallel} — продольное время релаксации

τ_{\perp} — поперечное время релаксации

χ — диэлектрическая восприимчивость

χ_{il} — тензор фонон-гидродинамической теплопроводности

$$\psi_{il} = \partial^2 \tilde{U} / \partial w_i \partial w_l$$

$\psi_{i,lm}$ — тензор пьезоэлектрической вязкости

$\Omega_j(k) = \Omega_k$ — частота колебания

Ω_l — предельная частота продольных оптических фононов

Ω_t — предельная частота поперечных оптических фононов

Ω_D — предельная частота колебаний решетки в дебаевской модели

ω — частота изменения электрического поля, частота звука

ω_0 — частота колебаний фононов, захваченных полем звуковой волны

Кинетическое описание системы фононов

§ 1. Колебания кристаллической решетки

В настоящем разделе будут рассмотрены колебания атомов кристалла относительно своих положений равновесия¹⁾.

Равновесные положения атомов кристалла образуют пространственно-периодическую структуру, так называемую *кристаллическую решетку*. Если считать кристалл бесконечным, отвлекаясь пока от наличия у него внешней огранки, то он совмещается сам с собой при трансляции (параллельном перемещении) на любой период решетки — вектор a^n , который можно выразить следующим образом:

$$a^n = a_1 n_1 + a_2 n_2 + a_3 n_3. \quad (1.1)$$

Здесь n_1, n_2, n_3 — любые целые положительные или отрицательные числа (их совокупность мы будем часто обозначать n), а a_1, a_2, a_3 — так называемые *основные периоды* кристаллической решетки.

Параллелепипед, построенный на трех векторах a_1, a_2, a_3 , называется *элементарной ячейкой* решетки²⁾. Всю решетку можно получить пространственным повторением ее элементарных ячеек, уложенных вплотную друг к другу. Все элементарные ячейки, таким образом, тождественны друг другу; каждая из них содержит одинаковое число атомов, одинаковым образом расположенных друг относительно друга. Для дальнейшего описания удобно совместить один из атомов с вершиной

¹⁾ Классическая теория колебаний кристаллической решетки была разработана Борном и фон Карманом (M. Born, T. von Karman, 1912).

²⁾ Полезно отметить, что симметрия элементарной ячейки, вообще говоря, не обязательно совпадает с симметрией кристаллической решетки.

параллелепипеда. Положение элементарной ячейки можно задать с помощью вектора a_n , характеризующего координаты ее вершины относительно вершины «нулевой» ячейки, которая выбрана за начало координат.

В каждой элементарной ячейке может быть несколько атомов. Их число мы будем обозначать s , а номер атома в ячейке — p . Равновесное положение p -го атома в n -й ячейке определяется вектором

$$a_n + d_p \quad (p = 1, 2, \dots, s).$$

Вектор d_p не зависит от n — он характеризует положение различных атомов в элементарной ячейке относительно вершины этой ячейки.

Потенциальная энергия кристаллической решетки зависит от взаимного расположения атомов. Равновесному положению соответствует минимальное значение потенциальной энергии \mathcal{U}_0 . Если атомы смещены из положения равновесия, то потенциальная энергия \mathcal{U} такой деформированной решетки должна быть больше, чем \mathcal{U}_0 .

Обозначим через R_{np} смещение из положения равновесия p -го атома в n -й элементарной ячейке. i -ю компоненту этого вектора мы будем обозначать R_{npi} . В дальнейшем для более компактной записи совокупности пар индексов p и i мы часто будем обозначать греческой строчной буквой γ , так что

$$R_{n\gamma} = R_{npi}.$$

Если все смещения $R_{n\gamma}$ гораздо меньше межатомных расстояний, то разность $\mathcal{U} - \mathcal{U}_0$ можно разложить по степеням $R_{n\gamma}$, удержав в разложении только несколько первых степеней. Линейные члены в этом разложении должны обратиться в нуль, так как в равновесии, при $R_{n\gamma} = 0$, потенциальная энергия имеет минимум. Мы пока ограничимся учетом квадратичных членов в разложении потенциальной энергии по степеням смещений $R_{n\gamma}$. Такое приближение называется *гармоническим*. Следующие члены разложения, содержащие произведения трех, четырех и т. д. смещений $R_{n\gamma}$, называют соответственно *ангармоническими* членами третьего, четвертого, и т. д. порядка. Роль ангармонических членов будет рассмотрена ниже в § 6.

В гармоническом приближении

$$\mathcal{U}_2 = \mathcal{U} - \mathcal{U}_0 = \frac{1}{2} \sum_{nn'} \sum_{\gamma\gamma'} A_{\gamma\gamma'}^{nn'} R_{n\gamma} R_{n'\gamma'}. \quad (1.2)$$

$A_{\gamma\gamma'}^{nn'}$ — это силовые постоянные, характеризующие взаимодействие между атомами. Они зависят в силу трансляционной симметрии кристалла только от разностей $n - n'$:

$$A_{\gamma\gamma'}^{nn'} \equiv A_{\gamma\gamma'}^{n-n'}.$$

Обычно они достаточно велики, если соответствующие атомы являются близкими соседями, и сравнительно быстро совпадают с расстоянием¹⁾.

Матрица силовых постоянных $A_{\gamma\gamma'}^{nn'}$ представляет собой вторую производную от потенциальной энергии по смещениям. Поэтому она обладает следующим свойством симметрии:

$$A_{\gamma\gamma'}^{nn'} = A_{\gamma'\gamma}^{n'n}. \quad (1.3)$$

Получим еще одно важное свойство матрицы силовых постоянных $A_{\gamma\gamma'}^{nn'}$. Для этого определим силу F_{np} , действующую на p -й атом в n -й элементарной ячейке при смещении атомов из положения равновесия²⁾:

$$F_{npi} = - \frac{\partial \mathcal{U}_2}{\partial R_{npi}} = - \sum_{n'\gamma'} A_{\gamma'p'i}^{n'n'} R_{n'\gamma'}. \quad (1.4)$$

Предположим теперь, что смещение R не зависит от n и p :

$$R_{npi} = R_i.$$

Такое смещение описывает трансляцию всей решетки

¹⁾ Распространение длинноволновых колебаний решетки может сопровождаться появлением макроскопических электрических полей. Это значит, что далекие атомы, участвующие в таком колебании, могут заметным образом взаимодействовать друг с другом. Роль макроскопических полей будет подробно рассмотрена в § 2. Здесь мы не будем учитывать этих полей явным образом.

²⁾ Всюду ниже (если не оговорено противное) подразумевается суммирование по дважды встречающемуся векторному индексу.

как целого. При этом, очевидно, $F = 0$. Отсюда получаем¹⁾

$$\sum_{n'p'} A_{\gamma\gamma'}^{nn'} = 0. \quad (1.5)$$

Зная силу, действующую на атом, нетрудно записать уравнения движения, описывающие малые колебания решетки:

$$M_p \ddot{R}_{n\gamma} = - \sum_{n'\gamma'} A_{\gamma\gamma'}^{nn'} R_{n'\gamma'}, \quad (1.6)$$

где M_p — масса атома p -го сорта.

Решение уравнения (1.6) ищем в виде бегущих плоских волн²⁾

$$R_{n\gamma} = e_\gamma \exp(-i\Omega t + ika_n). \quad (1.7)$$

Здесь Ω — есть частота рассматриваемого колебания решетки, вектор k характеризует закон пространственного изменения смещения в волне, а вектор e_p , который мы будем называть *вектором поляризации* колебания, характеризует величину и направление смещения атома p , участвующего в колебании.

Подставляя (1.7) в (1.6), мы получаем

$$\Omega^2 M_p e_\gamma = \sum_{n'\gamma'} A_{\gamma\gamma'}^{n-n'} \exp(-ika_{n-n'}) e_{\gamma'}, \quad (1.8)$$

где

$$a_{n-n'} = a_n - a_{n'}.$$

Введем так называемую *динамическую матрицу*

$$\mathcal{A}_{\gamma\gamma'}(k) = \sum_n A_{\gamma\gamma'}^n \exp(-ika_n). \quad (1.9)$$

Уравнения (1.8) запишутся с ее помощью в следующем виде:

$$\Omega^2 M_p e_\gamma = \sum_{\gamma'} \mathcal{A}_{\gamma\gamma'}(k) e_{\gamma'}. \quad (1.10)$$

¹⁾ Компоненты матрицы $A_{\gamma\gamma'}^{n-n'}$ удовлетворяют еще и соотношениям другого типа, вытекающим из условия, чтобы сила взаимодействия между атомами была равна нулю, если R описывает поворот кристаллической решетки как целого относительно любой точки. Мы не будем выписывать этих соотношений.

²⁾ Считается, как обычно, что смещение есть вещественная часть этого комплексного выражения.

Система уравнений (1.10) имеет ненулевое решение, только если ее определитель равен нулю:

$$|\Omega^2 M_p \delta_{\gamma\gamma'} - \mathcal{A}_{\gamma\gamma'}(k)| = 0. \quad (1.11)$$

При заданном значении k это есть алгебраическое уравнение степени $3s$ относительно Ω^2 . Решения уравнения (1.11) мы будем нумеровать индексом j . Функцию $\Omega_j(k)$ называют *законом дисперсии* j -й колебательной ветви, а уравнение (1.11) — *дисперсионным уравнением*.

Элементы динамической матрицы $\mathcal{A}_{\gamma\gamma'}(k)$ — непрерывные функции k . А это значит, что $\Omega_j(k)$ — также непрерывные функции k всюду, за исключением, может быть, только таких точек, линий или поверхностей в k -пространстве, где значения двух или нескольких функций $\Omega_j(k)$ совпадают, т. е. где происходит, как говорят, *контакт* различных колебательных ветвей. Наличие такого контакта может быть следствием симметрии кристалла. В этом случае геометрическое место точек контакта может быть определено методами теории групп, и его положение не зависит от значений, которые принимают элементы матрицы силовых постоянных $A_{\gamma\gamma'}^{nn'}$. Контакт может также не быть связан с симметрией кристалла. В этом случае его называют случайным; положением точек, в которых он имеет место, определяется гармоническим потенциалом взаимодействия атомов решетки.

Рассмотрим свойства динамической матрицы $\mathcal{A}_{\gamma\gamma'}(k)$:

1. Матрица $\mathcal{A}_{\gamma\gamma'}(k)$ эрмитова:

$$\mathcal{A}_{\gamma\gamma'}(k) = \mathcal{A}_{\gamma'\gamma}^*(k). \quad (1.12)$$

Действительно,

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_{\gamma\gamma'}(k) &= \sum_n A_{\gamma\gamma'}^n e^{-ika_n} = \sum_n A_{\gamma'\gamma}^{n-n'} e^{-ika_n} = \\ &= \sum_n A_{\gamma'\gamma}^n e^{ika_n} = \left(\sum_n A_{\gamma'\gamma}^n e^{-ika_n} \right)^* = \mathcal{A}_{\gamma'\gamma}^*(k). \end{aligned}$$

2. Матрица \mathcal{A} удовлетворяет соотношению

$$\sum_{p'} \mathcal{A}_{pip'}(0) = 0, \quad (1.13)$$

которое является непосредственным следствием соотношения (1.5).

3. Из определения (1.9) матрицы \mathcal{A} и соотношения (1.12) вытекает свойство:

$$\mathcal{A}(-\mathbf{k}) = \mathcal{A}^*(\mathbf{k}) = \mathcal{A}^T(\mathbf{k}), \quad (1.14)$$

где \mathcal{A}^T — транспонированная матрица, т. е.

$$(\mathcal{A}^T)_{\gamma\gamma'} = \mathcal{A}_{\gamma'\gamma}.$$

Отсюда вытекает важное соотношение, которому должен удовлетворять закон дисперсии¹⁾

$$\Omega_j(-\mathbf{k}) = \Omega_j(\mathbf{k}). \quad (1.15)$$

Отсюда следует также, что векторы $e_\gamma(\mathbf{k})$ (которые из системы уравнений (1.8) определяются с точностью до постоянного множителя) можно всегда выбрать так, чтобы они удовлетворяли соотношению

$$e_\gamma(-\mathbf{k}, j) = e_\gamma^*(\mathbf{k}, j), \quad (1.16)$$

которые мы в дальнейшем будем считать выполненным.

Соотношения (1.15) являются следствием важного свойства симметрии, которым обладают уравнения колебаний кристаллической решетки, а именно: *симметрии относительно обращения времени*. Будучи второго порядка по времени, уравнения (1.6) инвариантны относительно замены $t \rightarrow -t$. Это значит, в частности, что если колебание, в котором вектор смещения пропорционален

$$\exp(i\mathbf{k}\mathbf{a}_n - i\Omega_{\mathbf{k}j}t) + \text{к. с.},$$

удовлетворяет уравнениям движения, то им удовлетворяет также и колебание, в котором вектор смещения пропорционален

$$\exp(i\mathbf{k}\mathbf{a}_n + i\Omega_{\mathbf{k}j}t) + \text{к. с.} = \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{a}_n - i\Omega_{\mathbf{k}j}t) + \text{к. с.}$$

Последняя экспонента описывает колебание с вектором $-\mathbf{k}$ и той же самой частотой $\Omega_{\mathbf{k}j}$. О таком колебании говорят как об обратном по времени по отношению к колебанию (1.7).

Симметрия относительно обращения времени, будучи общим свойством уравнений механики, сохраняется и при

¹⁾ Вектор \mathbf{k} мы иногда будем писать как аргумент частоты Ω , а иногда в виде нижнего индекса: $\Omega_{\mathbf{k}j}$.

наличии нарушений регулярности кристаллической решетки, а также при учете ангармонических членов в разложении потенциальной энергии решетки. Следствия симметрии относительно обращения времени в этих случаях будут рассмотрены в § 7.

Для формулировки еще одного свойства матрицы $\mathcal{A}(\mathbf{k})$ введем понятие *векторов обратной решетки* \mathbf{b} . Это совокупность векторов в \mathbf{k} -пространстве, обладающих тем свойством, что все скалярные произведения вида $\mathbf{b}\mathbf{a}_n$ кратны 2π :

$$\mathbf{a}_1\mathbf{b} = 2\pi m_1, \quad \mathbf{a}_2\mathbf{b} = 2\pi m_2, \quad \mathbf{a}_3\mathbf{b} = 2\pi m_3,$$

где m_1, m_2, m_3 — некоторые целые числа (положительные, отрицательные или равные нулю). Отсюда общее выражение для вектора обратной решетки имеет вид

$$\mathbf{b} = m_1\mathbf{b}_1 + m_2\mathbf{b}_2 + m_3\mathbf{b}_3. \quad (1.17)$$

Здесь $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3$ — так называемые основные периоды обратной решетки, равные

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{\nu}[\mathbf{a}_2\mathbf{a}_3], \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{\nu}[\mathbf{a}_3\mathbf{a}_1], \quad \mathbf{b}_3 = \frac{2\pi}{\nu}[\mathbf{a}_1\mathbf{a}_2], \quad (1.18)$$

где ν — объем элементарной ячейки. Совокупность точек в \mathbf{k} -пространстве, определяемых выражением (1.17), называется *обратной решеткой*.

Из определения динамической матрицы $\mathcal{A}(\mathbf{k})$ следует, что она обладает свойством

$$\mathcal{A}(\mathbf{k}) = \mathcal{A}(\mathbf{k} + \mathbf{b}). \quad (1.19)$$

Аналогичным свойством обладают и фоновые частоты: $\Omega_j(\mathbf{k}) = \Omega_j(\mathbf{k} + \mathbf{b})$. Эти соотношения вместе с (1.7) позволяют выяснить физический смысл вектора \mathbf{k} . Как видно из (1.7), вектор \mathbf{k} характеризует пространственную зависимость смещений атомов кристалла, участвующих в данном колебании. С этой точки зрения он аналогичен обычному волновому вектору, характеризующему, например, зависимость смещения (или скорости) сплошной среды от координаты при распространении звукового колебания. Однако волновой вектор звука \mathbf{k} однозначно связан с длиной волны λ соотношением

$$\mathbf{k} = 2\pi/\lambda.$$

В нашем же случае такой однозначной связи нет: как

является из (1.19), векторы \mathbf{k} и $\mathbf{k} + \mathbf{b}$ физически эквивалентны. Эта неоднозначность связана с тем, что на пространственную периодичность смещений $R_{n\gamma}$, задаваемую вектором \mathbf{k} , накладывается пространственная периодичность расположения элементарных ячеек дискретной кристаллической решетки; она и обуславливает различие между вектором \mathbf{k} в (1.7) и обыкновенным волновым вектором. Соответственно, вектор \mathbf{k} мы будем называть *квазиволновым вектором*¹⁾; такое название и отражает указанную неоднозначность. В теории используется также величина $\hbar\mathbf{k}$, имеющая размерность импульса и называемая *квазиимпульсом* колебания решетки.

В дальнейшем нам будет удобно устранить неоднозначность в значениях квазиволнового вектора с помощью следующего приема. Будем задавать значения квазиволнового вектора, лежащие в ограниченной области \mathbf{k} -пространства, так называемой *основной ячейке обратной решетки*. Если выбрать оси координат по трем основным периодам обратной решетки, то основная ячейка задается неравенствами²⁾:

$$-\frac{b_1}{2} \leq k_1 \leq \frac{b_1}{2}, \quad -\frac{b_2}{2} \leq k_2 \leq \frac{b_2}{2}, \quad -\frac{b_3}{2} \leq k_3 \leq \frac{b_3}{2}. \quad (1.20)$$

Векторы $e_p(\mathbf{k}, j)$ обладают свойством ортогональности, которое мы сейчас получим. Рассмотрим для этого два разных колебания, соответствующих одному значению волнового вектора \mathbf{k} , но принадлежащих к разным коле-

¹⁾ Нередко, тем не менее, ради краткости мы будем опускать приставку квази.

²⁾ Основная ячейка обратной решетки обладает, вообще говоря, более низкой симметрией относительно поворотов и отражений, чем сама обратная решетка. Поэтому наряду с понятием основной ячейки обратной решетки пользуются также понятием *первой зоны Бриллюэна* (или просто *зоны Бриллюэна*). Она представляет собой многогранник в \mathbf{k} -пространстве с центром симметрии в точке $\mathbf{k} = 0$, симметрия которого относительно поворотов и отражений совпадает с симметрией обратной решетки. Внутренние точки этого многогранника (и часть точек на его поверхности) соответствуют всем неэквивалентным значениям вектора \mathbf{k} . Объем зоны Бриллюэна $(2\pi)^3/v$, естественно, совпадает с объемом основной ячейки обратной решетки.

бательным ветвям j и j' . Мы имеем

$$\begin{aligned} \Omega_j^2 M_p e_\gamma(\mathbf{k}, j) &= \sum_{\gamma'} \mathcal{A}_{\gamma\gamma'} e_{\gamma'}(\mathbf{k}, j), \\ \Omega_{j'}^2 M_p e_\gamma^*(\mathbf{k}, j') &= \sum_{\gamma'} \mathcal{A}_{\gamma\gamma'}^* e_{\gamma'}^*(\mathbf{k}, j'). \end{aligned} \quad (1.21)$$

Умножим первое из этих соотношений на $e_\gamma^*(\mathbf{k}, j')$, а второе — на $e_\gamma(\mathbf{k}, j)$ и просуммируем по γ . Вычитая затем второе из первого, получим

$$(\Omega_j^2 - \Omega_{j'}^2) \sum_p M_p e_p(\mathbf{k}, j) e_p^*(\mathbf{k}, j') = 0.$$

Отсюда при $\Omega_j \neq \Omega_{j'}$, следует, что

$$\sum_p M_p e_p^*(\mathbf{k}, j') e_p(\mathbf{k}, j) = 0.$$

При $j = j'$ подчиним векторы e_p условию нормировки:

$$\sum_p M_p |e_p(\mathbf{k}, j)|^2 = M,$$

где $M = \sum_{p=1}^s M_p$ — масса элементарной ячейки. Объединяя два последних равенства, напишем

$$\sum_p M_p e_p^*(\mathbf{k}, j') e_p(\mathbf{k}, j) = M \delta_{jj'}, \quad (1.22)$$

где $\delta_{jj'}$ есть символ Кронекера.

Умножая (1.22) на $e_{p'}(\mathbf{k}, j')$ и суммируя по j' , можно получить еще одно полезное соотношение между векторами поляризации

$$\sum_j e_\gamma^*(\mathbf{k}, j) e_{\gamma'}(\mathbf{k}, j) = \frac{M}{M_p} \delta_{\gamma\gamma'}. \quad (1.23)$$

Соотношения ортогональности (1.22) и (1.23) являются фактически следствиями того, что векторы $e_\gamma(\mathbf{k}, j)$ суть собственные векторы эрмитовой матрицы $\mathcal{A}_{\gamma\gamma'}(\mathbf{k})$. Появление же в этих соотношениях весовых множителей M_p обусловлено тем, что частоты Ω_j^2 суть собственные значения не матрицы $\mathcal{A}_{\gamma\gamma'}$, а, как легко видеть, матрицы $\mathcal{A}_{\gamma\gamma'}/\sqrt{M_p M_{p'}}$, причем соответствующими собственными векторами оказываются величины $\sqrt{M_p} e_\gamma$.

При выводе этих соотношений мы полагали, что при заданном значении \mathbf{k} частоты $\Omega_j(\mathbf{k})$, относящиеся к разным колебательным ветвям, различны. Если же две или большее число частот при каком-то значении \mathbf{k} совпадают, то векторы \mathbf{e}_r , соответствующие этим колебаниям, не могут быть определены однозначным образом. Однако, как известно¹⁾, их всегда можно выбрать так, чтобы и для них выполнялись соотношения ортогональности и нормировки (1.22).

До сих пор мы отвлекались от того обстоятельства, что кристалл имеет конечные размеры, т. е. представляет собой колебательную систему с конечным числом степеней свободы. Чтобы учесть это обстоятельство, удобнее всего воспользоваться следующим формальным приемом. Пусть, например, кристалл представляет собой прямоугольный параллелепипед с ребрами L_1, L_2, L_3 , направленными вдоль координатных осей. Будем считать, что рассматриваемый кристалл есть часть бесконечной кристаллической решетки. Однако на все допустимые колебания в ней наложим условия периодичности с периодами L_1, L_2, L_3 вдоль трех координатных осей. Это означает, что компоненты волнового вектора k_1, k_2, k_3 могут принимать значения

$$k_1 = \frac{2\pi l_1}{L_1}, \quad k_2 = \frac{2\pi l_2}{L_2}, \quad k_3 = \frac{2\pi l_3}{L_3}, \quad (1.24)$$

где l_1, l_2, l_3 — положительные или отрицательные целые числа.

Подчеркнем, что периодические граничные условия не имеют динамического смысла, а нужны только для подсчета числа степеней свободы колебательной системы. Физически они означают, что рассматриваются только такие колебательные движения, когда вдоль каждого из ребер параллелепипеда укладывается целое число волн. При этом получается правильное число степеней свободы, равное $3sN$, где N — число элементарных ячеек в кристалле. Рассматриваемая система, таким образом, отличается от реального кристалла только краевыми эф-

¹⁾ См., например, Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. — М.: Наука, 1974, стр. 47; Шифф Л. Квантовая механика. — М.: ИЛ, 1957, стр. 59.

фектами, несущественными для анализа объемных свойств кристалла, если число элементарных ячеек N достаточно велико, а взаимодействие между атомами, т. е. силовые константы $A_{\gamma\gamma'}^{n-n'}$, достаточно быстро спадает с расстоянием $n - n'$. Допустимые значения вектора \mathbf{k} равномерно распределены по основной ячейке \mathbf{k} -пространства, причем полное число возможных значений вектора \mathbf{k} с компонентами k_1, k_2, k_3 в небольшом интервале $\Delta^3 k = \Delta k_1 \Delta k_2 \Delta k_3$ есть

$$\frac{L_1 L_2 L_3}{(2\pi)^3} \Delta k_1 \Delta k_2 \Delta k_3 = \frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^3} \Delta^3 k, \quad (1.25)$$

где \mathcal{V} — объем кристалла¹⁾.

Далее нам часто будут встречаться суммы по \mathbf{k} от функций, плавно зависящих от \mathbf{k} , т. е. мало меняющихся при переходе от какого-то дискретного значения \mathbf{k} к «соседнему» значению. В таких случаях обычно переходят от суммирования по \mathbf{k} к интегрированию по $d^3 k$ с помощью соотношения

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

Исследуем, как ведут себя решения уравнения (1.10) при $\mathbf{k} \rightarrow 0$. Для этого, устремив \mathbf{k} к нулю, просуммируем (1.10) по p и воспользуемся соотношением (1.13). В результате мы получим

$$\Omega_j^2(0) \sum_p M_p R_p = 0. \quad (1.26)$$

Отсюда явствует, что при $\mathbf{k} \rightarrow 0$ либо

$$\Omega_j(0) = 0, \quad (1.27)$$

либо

$$\sum_p M_p R_p = 0. \quad (1.28)$$

Колебательные ветви, у которых при $\mathbf{k} \rightarrow 0$ частота обращается в нуль, называются *акустическими*, поскольку

¹⁾ Выраженное через объем кристалла \mathcal{V} , это число уже не зависит от сделанного предположения, что кристалл имеет форму прямоугольного параллелепипеда, а справедливо для кристалла произвольной формы.

в случае длинных (по сравнению с постоянной решетки) волн они представляют собой обычные звуковые колебания.

При распространении длинноволнового акустического колебания все атомы, принадлежащие к одной элементарной ячейке, колеблются в фазе. Иными словами, векторы поляризации e длинноволновых акустических колебаний не зависят от p — номера атома в элементарной ячейке. Учитывая это, нетрудно получить дисперсионное уравнение для длинноволновых акустических колебаний непосредственно из уравнения (1.10).

Чтобы найти решения e_i уравнений (1.10), не зависящие от p , просуммируем эти уравнения по p :

$$\Omega_j^2 e_i = \frac{1}{M} \sum_{pp'} \mathcal{A}_{pp' i} e_{i'}. \quad (1.29)$$

Сумму по p и p' от динамической матрицы $\mathcal{A}_{pp'}$, фигурирующую в правой части, разложим по степеням вектора k . Нулевой член разложения равен нулю в силу (1.13). Первый член (учитывая, что матрица $A_{\gamma\gamma'}^{nn'}$ зависит от разности $n - n'$) можно представить в виде

$$-\frac{i}{N} k \sum_{pp'} \sum_{nn'} A_{\gamma\gamma'}^{nn'} a_n + \frac{i}{N} k \sum_{pp'} \sum_{nn'} A_{\gamma\gamma'}^{nn'} a_{n'}.$$

Оба слагаемых в этом выражении равны нулю в силу соотношения (1.5).

Нужно, таким образом, учитывать квадратичные члены разложения, которые мы запишем в виде

$$\frac{1}{M} \sum_{pp'} \mathcal{A}_{pp' i} (k) = \frac{1}{\rho} \lambda_{ii' i' i}^{(0)} k_i k_{i'}. \quad (1.30)$$

Отсюда получается следующая система уравнений для векторов поляризации e_i :

$$\Omega^2 e_i = \frac{1}{\rho} \lambda_{ii' i' i}^{(0)} k_i k_{i'} e_{i'}. \quad (1.31)$$

Приравняв нулю определитель системы, мы получаем уравнение третьего порядка относительно Ω^2 , которое определяет законы дисперсии трех акустических колеба-

тельных ветвей $\Omega_a(k)$ ¹⁾ (номер акустической ветви будет обозначаться индексом a):

$$|\rho \Omega^2 \delta_{ii'} - \lambda_{ii' i' i}^{(0)} k_i k_{i'}| = 0. \quad (1.32)$$

Решения этого уравнения $\Omega_a(k)$ представляют собой однородные функции первого порядка от волнового вектора k . Учитывая это, мы можем заключить, что векторы поляризации длинноволновых акустических колебаний, определяемые системой уравнений (1.31), не зависят от величины вектора k , а зависят только от его направления $\kappa = k/k$. Соотношения ортогональности и нормировки приобретают для них следующий вид:

$$e_a^*(\kappa) e_{a'}(\kappa) = \delta_{aa'}. \quad (1.33)$$

Колебательные ветви, частота которых $\Omega_j(k)$ при $k \rightarrow 0$ стремится к отличному от нуля пределу, называются *оптическими*²⁾. Как явствует из формулы (1.28), атомы одной элементарной ячейки, участвующие в длинноволновом оптическом колебании, колеблются так, что центр тяжести ячейки остается в покое.

Поскольку число акустических колебательных ветвей равно трем, число оптических ветвей есть $3(s - 1)$.

Соотношения ортогональности и нормировки для векторов поляризации длинноволновых оптических колебаний имеют вид

$$\sum_p M_p e_p^*(\kappa, o) e_p(\kappa, o') = M \delta_{oo'}, \quad (1.34)$$

где символ o обозначает номер оптической ветви. Опять-таки векторы $e_p(\kappa, o)$ зависят только от направления волнового вектора k относительно кристаллографических осей, но не от его величины.

¹⁾ Как явствует из сравнения (1.32), с дисперсионным уравнением (2.5) следующего раздела, которое дает теория упругости для акустических колебаний, коэффициенты $\lambda_{ii' i' i}^{(0)}$ в разложении (1.31) — не что иное, как модули упругости кристалла плотности ρ , причем по смыслу вывода — это модули упругости при нулевой температуре.

²⁾ Происхождение названия связано с тем, что законы дисперсии длинноволновых оптических колебаний определяют особенности оптических свойств диэлектриков в инфракрасной области — см. §§ 2, 25.

Соотношения (1.34) можно переписать в более компактном виде для важного случая, когда в элементарной ячейке имеются два атома, 1 и 2. В силу (1.28) векторы e_1 и e_2 связаны соотношением

$$M_1 e_1 + M_2 e_2 = 0, \quad (1.35)$$

с учетом которого (1.34) переписывается в виде

$$e_1^*(\kappa, o) e_1(\kappa, o') = \frac{M_2}{M_1} \delta_{oo'}.$$

Поэтому, если ввести приведенный вектор поляризации оптического колебания o :

$$e(\kappa, o) = \left(\frac{M_1}{M_2}\right)^{1/2} e_1 = -\left(\frac{M_2}{M_1}\right)^{1/2} e_2, \quad (1.36)$$

не зависящий от номера атома в элементарной ячейке, то для приведенных векторов $e(\kappa, o)$ получаются следующие соотношения ортогональности и нормировки:

$$e^*(\kappa, o) e(\kappa, o') = \delta_{oo'}. \quad (1.37)$$

§ 2. Длинноволновые колебания решетки и их взаимодействие с электромагнитным полем

В настоящем разделе будут изучены особенности распространения длинноволновых колебаний, акустических и оптических, у которых волновой вектор k удовлетворяет условиям

$$ka_i \ll 1$$

(a_i — основные периоды решетки). Макроскопическая теория длинноволновых колебаний решетки использует для их описания не смещение отдельных атомов (как в § 1), а смещение отдельных участков решетки.

При описании акустических колебаний диэлектрик рассматривается как сплошная среда, механическое движение которой можно охарактеризовать, задавая смещения ее точек как функции времени t и непрерывных пространственных координат: вектора r с компонентами r_1, r_2, r_3 . При описании длинноволновых оптических колебаний рассматриваются смещения отдельных подрешеток, образующих кристаллическую решетку, друг относительно-

но друга. Эти смещения также считаются функциями r и t .

Кроме того, в данном разделе мы рассмотрим вопрос об электрических полях, которые могут возникать в кристаллах определенной симметрии при распространении длинноволновых колебаний, акустических и оптических. В § 1 мы рассматривали взаимодействие атомов, быстро спадающее с расстоянием. В случае длинноволновых колебаний может играть роль также и взаимодействие далеких атомов. Оно описывается посредством введения электрических полей, возникающих вследствие поляризации больших (т. е. включающих много элементарных ячеек) объемов решетки, участвующих в колебании. Мы выясним, как учесть эти поля в теории распространения длинноволновых колебаний решетки.

Начнем с рассмотрения акустических колебаний. Длинноволновые акустические колебания твердого тела описываются уравнениями теории упругости¹⁾

$$\rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} = \frac{\partial \sigma_{il}}{\partial r_l}. \quad (2.1)$$

Здесь ρ — плотность кристалла, u_i — компонента вектора $u(r, t)$ — вектора упругого смещения сплошной среды, σ_{il} — тензор упругих напряжений.

Из термодинамического тождества

$$dU = T dS + \sigma_{il} du_{il}, \quad (2.2)$$

где U — внутренняя энергия, а S — энтропия единицы объема сплошной среды, u_{il} — тензор деформации, мы находим, что

$$\sigma_{il} = (\partial U / \partial u_{il})_S.$$

Мы ограничимся линейным (гармоническим) приближением теории упругости. В этом приближении

$$u_{il} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial r_l} + \frac{\partial u_l}{\partial r_i} \right). \quad (2.3)$$

Чтобы вычислить σ_{il} в том же приближении, запишем U

¹⁾ См. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теория упругости.— М.: Наука, 1965, стр. 130; Зоммерфельд А. Механика деформируемых сред.— М.: ИЛ, 1954, стр. 134.

с точностью до квадратичных по тензору деформации членов

$$U = U_0(S) + \frac{1}{2} \lambda_{ilmn} u_{il} u_{mn}, \quad (2.4)$$

где U_0 — плотность внутренней энергии в отсутствие деформации. Отсюда

$$\sigma_{ii} = \lambda_{ilmn} u_{mn}.$$

Тензор λ_{ilmn} есть тензор адиабатических модулей упругости. Через него непосредственно выражается тензор напряжений при условии, что деформация производится адиабатически, т. е. при постоянной энтропии. Звуковые колебания обычно с достаточной точностью можно считать адиабатическими (см. §§ 30, 32), и тогда их дисперсионное уравнение, согласно (2.1), имеет вид

$$|\rho \Omega_a^2 \delta_{im} - \lambda_{ilmn} k_i k_n| = 0. \quad (2.5)$$

Его решение дает закон дисперсии трех акустических колебательных ветвей $\Omega_a(k)$.

Укажем соотношение между адиабатическими модулями λ_{ilmn} и изотермическими модулями упругости $\lambda_{ilmn}^{(T)}$ (последние характеризуют связь между упругими напряжениями и деформацией, производимой при постоянной температуре). Это соотношение потребуется нам в дальнейшем.

Рассмотрим плотность свободной энергии упругой сплошной среды $F(T, u_{il})$, для дифференциала которой имеет место следующее соотношение:

$$dF = -S dT + \sigma_{il} du_{il}. \quad (2.6)$$

Запишем разложение этой величины с точностью до членов, квадратичных по деформации. В это разложение мы, вообще говоря, должны включить и слагаемое, линейное по деформации, которое описывает эффект теплового расширения кристалла, т. е. деформацию, возникающую при изменении его температуры. Вид этого слагаемого, однако, не вполне однозначен. Неоднозначность связана с тем, что надо условиться, при какой температуре состояние твердого тела следует считать недеформированным. Если обозначить эту температуру через T_0 , то разложение

плотности свободной энергии F запишется в виде

$$F_0(T) + \frac{1}{2} \lambda_{ilmn}^{(T)} u_{il} u_{mn} - \lambda_{ilmn}^{(T)} \alpha_{il} u_{mn} (T - T_0). \quad (2.7)$$

Здесь α_{il} — симметричный тензор, физический смысл которого мы сейчас выясним. С этой целью определим зависимость от температуры тензора деформации в «свободном» кристалле, где $\sigma_{ii} = 0$.

Дифференцируя выражение (2.7) по u_{il} при постоянном T , получаем для тензора напряжений

$$\sigma_{il}(u_{mn}, T) = \left(\frac{\partial F}{\partial u_{il}} \right)_T = \lambda_{ilmn}^{(T)} u_{mn} - \lambda_{ilmn}^{(T)} \alpha_{mn} (T - T_0). \quad (2.8)$$

Приравнявая эту величину нулю, имеем

$$u_{im} = \alpha_{im} (T - T_0). \quad (2.9)$$

Симметричный тензор деформации u_{im} можно привести к главным осям; его собственные значения дают относительные удлинения кристалла вдоль направлений главных осей. Тензор α_{im} определяет величину этих относительных удлинений на единицу изменения температуры; его, таким образом, можно назвать *тензором коэффициентов теплового расширения* кристаллов.

Далее, тензор адиабатических модулей упругости есть

$$\begin{aligned} \lambda_{ilmn}^{-1} &= \left(\frac{\partial \sigma_{il}}{\partial u_{mn}} \right)_S = \left(\frac{\partial \sigma_{il}}{\partial u_{mn}} \right)_T + \left(\frac{\partial \sigma_{il}}{\partial T} \right)_{u_{mn}} \left(\frac{\partial T}{\partial u_{mn}} \right)_S = \\ &= \lambda_{ilmn}^{(T)} - \frac{\partial^2 F}{\partial u_{il} \partial T} \left(\frac{\partial T}{\partial S} \right)_{u_{mn}} \left(\frac{\partial S}{\partial u_{mn}} \right)_T. \end{aligned}$$

Но

$$(\partial T / \partial S)_{u_{im}} = T/C,$$

где C — удельная теплоемкость при постоянном объеме¹⁾, и мы получаем окончательно

$$\lambda_{ilmn} = \lambda_{ilmn}^{(T)} + \frac{T}{C} \lambda_{ilab}^{(T)} \lambda_{cdmn}^{(T)} \alpha_{ab} \alpha_{cd}. \quad (2.10)$$

Физическая причина различия между изотермическим и адиабатическим модулями упругости заключается в следующем. При адиабатической деформации сжатия и раз-

¹⁾ Точнее, при постоянной деформации.

режения кристаллической решетки сопровождаются изменением температуры. Последнее, благодаря тепловому расширению, создает добавочную деформацию и, тем самым, дополнительный вклад в модуль упругости.

Перейдем теперь к изучению электрических полей, сопровождающих распространение звука в диэлектриках. Кристаллы, в которых при деформировании возникают электрические поля, пропорциональные деформации, называются *пьезоэлектриками*. Соответственно, и звуковые волны, распространяющиеся в пьезоэлектриках, сопровождаются электрическими полями, обладающими пространственной и временной периодичностью деформации в звуковой волне. Эти поля сказываются, в частности, на законе дисперсии звука в пьезоэлектриках.

Чтобы найти выражение для dU в пьезоэлектриках, нужно к (2.4) добавить слагаемое, происходящее от изменения электрической индукции D при постоянных энтропии и деформации. Это слагаемое, как известно¹⁾, имеет вид

$$\frac{1}{4\pi} E dD,$$

где E — напряженность электрического поля, так что мы имеем

$$dU = T dS + \sigma_{il} du_{il} + \frac{1}{4\pi} E dD. \quad (2.41)$$

Наряду с U введем величину

$$\tilde{U} = U - \frac{1}{4\pi} ED, \quad (2.42)$$

для которой имеем

$$d\tilde{U} = T dS + \sigma_{il} du_{il} - \frac{1}{4\pi} D dE. \quad (2.43)$$

Отсюда

$$\sigma_{il} = \left(\frac{\partial \tilde{U}}{\partial u_{il}} \right)_{S,E}, \quad D = -4\pi \left(\frac{\partial \tilde{U}}{\partial E} \right)_{S,u_{il}}. \quad (2.44)$$

¹⁾ См., например, Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Электродинамика сплошных сред.— М.: Гостехиздат, 1957, стр. 71; Самойлович А. Г. Термодинамика и статистическая физика.— М.: Гостехиздат, 1955, с. 80.

Разложение величины \tilde{U} по степеням u_{il} и E_i с точностью до квадратичных членов имеет вид

$$\tilde{U} = U_0 + \frac{1}{2} \lambda_{ilmn} u_{il} u_{mn} - \frac{1}{8\pi} \varepsilon_{il} E_i E_l - \frac{1}{4\pi} E D_0 + \beta_{i,lm} E_i u_{lm}, \quad (2.15)$$

откуда

$$\begin{aligned} \sigma_{il} &= \lambda_{ilmn} u_{mn} + \beta_{m,il} E_m, \\ D_i &= D_{0i} + \varepsilon_{il} E_l - 4\pi \beta_{i,lm} u_{lm}. \end{aligned} \quad (2.16)$$

(2.15) представляет собой самую общую форму квадратичного разложения, удовлетворяющую условию, чтобы в отсутствие деформации и электрического поля упругие напряжения были бы равны нулю; электрическая же индукция D_0 при этом может быть отлична от нуля в кристаллах определенной симметрии, так называемых *пьезоэлектриках*.

Таким образом, связь упругих и электрических свойств описывается тензором третьего ранга $\beta_{i,lm}$ (так называемым *тензором пьезоэлектрических модулей*). Наличие отличного от нуля тензора $\beta_{i,lm}$ допускают далеко не все типы кристаллической симметрии. В частности, тензор $\beta_{i,lm}$, очевидно, равен нулю во всех кристаллах, обладающих центром симметрии.

Уравнения движения теории упругости (2.1) для пьезоэлектриков приобретают следующий вид:

$$\rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} = \lambda_{ilmn} \frac{\partial u_{mn}}{\partial r_l} + \beta_{l,im} \frac{\partial E_l}{\partial r_m}, \quad (2.17)$$

в то время как уравнение $\operatorname{div} D = 0$ дает

$$\varepsilon_{il} \frac{\partial E_i}{\partial r_l} - 4\pi \beta_{i,lm} \frac{\partial u_{lm}}{\partial r_i} = 0. \quad (2.18)$$

Чтобы записать уравнение для напряженности электрического поля E , учтем, что скорость звука в твердых телах гораздо меньше скорости света. Поэтому с точностью до поправок, содержащих это малое отношение, мы можем пренебречь взаимодействием звуковых волн в пьезоэлектрике с поперечными электрическими полями, т. е. считать поле E чисто продольным:

$$\operatorname{rot} E = 0. \quad (2.19)$$

Таким образом, E выражается через электростатический потенциал φ :

$$E = -\nabla\varphi. \quad (2.20)$$

Полагая, что в звуковой волне тензор деформации и электрическое поле пропорциональны $e^{i(kr-\Omega t)}$, и подставляя такую зависимость в (2.17) и (2.18), мы получаем следующую систему алгебраических уравнений:

$$\begin{aligned} \rho\Omega^2 u_i &= \lambda_{imn} k_i k_n u_m - \beta_{i,im} k_i k_m \varphi, \\ \epsilon_{ijk} k_j \varphi + 4\pi\beta_{i,im} k_i k_m u_m &= 0. \end{aligned} \quad (2.21)$$

Исключив отсюда φ и приравняв определитель полученной системы нулю, мы получаем уравнение

$$\left| \rho\Omega^2 \delta_{ii} - \lambda_{imn} k_m k_n - 4\pi \frac{\beta_{a,bi} k_a k_b \beta_{c,di} k_c k_d}{\epsilon_{fjk} k_j k_g} \right| = 0. \quad (2.22)$$

Это уравнение определяет закон дисперсии трех акустических колебательных ветвей в пьезодиэлектрике. Скорость звука в пьезодиэлектрике является сложной функцией углов, однако зависимость между частотой и длиной волнового вектора по-прежнему остается линейной.

Переходим к анализу длинноволновых оптических колебаний в кристаллах. Число оптических ветвей равно $3(s-1)$. Как явствует из соотношения (1.28), при длинноволновом оптическом колебании центр тяжести элементарной ячейки покоится. Рассмотрим подробнее вопрос об описании оптических колебаний в простейшем случае, когда число s атомов в элементарной ячейке равно двум (Kun Huang, 1950).

Будем характеризовать относительное смещение подрешеток, участвующих в оптическом колебании, величиной

$$w = \left(\frac{\rho_1 \rho_2}{\rho} \right)^{1/2} (R_1 - R_2) = \left(\frac{M_1 M_2}{M} \right)^{1/2} \nu^{-1/2} (R_1 - R_2), \quad (2.23)$$

где $\rho_1 = M_1/\nu$ — плотность атомов сорта 1, $\rho_2 = \rho - \rho_1$. Величину w мы, в соответствии со сказанным выше, будем рассматривать как непрерывную функцию r и t . Плотность кинетической энергии относительного движе-

ния подрешеток есть

$$E_{\text{кин}} = \frac{N}{2\nu} (M_1 \dot{R}_1^2 + M_2 \dot{R}_2^2).$$

С учетом (1.28) это выражение переписывается как

$$E_{\text{кин}} = \frac{1}{2} \dot{w}^2. \quad (2.24)$$

Коэффициент в выражении (2.23), определяющем w , и выбран таким образом, чтобы выражение для $E_{\text{кин}}$ имело как можно более простой вид.

Для дифференциала плотности внутренней энергии решетки можно написать

$$dU = f dw + \frac{1}{4\pi} E dD. \quad (2.25)$$

Здесь f — величина, пропорциональная плотности объемной силы¹⁾, действующей со стороны одной подрешетки на другую, если производить их смещение друг относительно друга при постоянной индукции D .

Длинноволновые оптические колебания представляют собой колебания подрешеток друг относительно друга, причем они могут, как уже говорилось, сопровождаться переменными электрическими полями. Уравнения движения, описывающие эти колебания, имеют вид

$$\ddot{w} = f.$$

Чтобы определить f , рассмотрим величину

$$\tilde{U} = U - \frac{1}{4\pi} ED$$

как функцию переменных E и w . Мы имеем

$$d\tilde{U} = f dw - \frac{1}{4\pi} D dE, \quad (2.26)$$

так что

$$f = \left(\frac{\partial \tilde{U}}{\partial w} \right)_E, \quad D = -4\pi \left(\frac{\partial \tilde{U}}{\partial E} \right)_w. \quad (2.27)$$

¹⁾ Коэффициент пропорциональности, как явствует из определения (2.23) вектора w , равен $(\rho_1 \rho_2 / \rho)^{1/2}$.

Разложение \tilde{U} по степеням компонент E и w запишем в виде

$$\tilde{U} = U_0 + \frac{1}{2} \psi_{ii} w_i w_i + \beta_{ii} w_i E_i - \frac{1}{8\pi} \gamma_{ii} E_i E_i. \quad (2.28)$$

В этом разложении мы ограничились квадратичными членами; линейные члены отсутствуют, так как предполагается, что в равновесии $w = E = 0$. Тензоры второго ранга $\psi_{ii} = \partial^2 \tilde{U} / \partial w_i \partial w_i$ и $\gamma_{ii} = -4\pi \partial^2 \tilde{U} / \partial E_i \partial E_i$ — коэффициенты в этом разложении — очевидно, симметричны; в то же время тензор β_{ii} , вообще говоря, может быть и несимметричным.

В итоге явный вид уравнений, описывающих длинноволновые оптические колебания, получается следующим:

$$\ddot{w}_i = -\psi_{ii} w_i - \beta_{ii} E_i. \quad (2.29)$$

В некоторых случаях симметрия кристаллической решетки такова, что

$$\beta_{ii} = 0, \quad (2.30)$$

и тогда система уравнений (2.29) становится замкнутой. Так, например, обстоит дело, если в элементарной ячейке имеются два одинаковых атома, а решетка обладает центром симметрии, причем преобразование инверсии переводит две неэквивалентные подрешетки друг в друга. Такой симметрией обладает, например, решетка типа алмаза, относящаяся к пространственной группе O_h^7 .

В указанном случае преобразование симметрии переводит вектор R_1 в $-R_2$, а вектор R_2 — в $-R_1$, так что вектор w остается инвариантным относительно такого преобразования. В то же время вектор E при преобразовании инверсии изменяет знак, так что сам он не может входить в уравнение (2.29), а только его пространственные производные. Пренебрегая ими для рассматриваемого случая длинных волн, получаем уравнения движения в виде

$$\ddot{w} = -\psi w. \quad (2.31)$$

Полагая $w \propto e^{-i\Omega t}$, находим, что три предельные частоты оптических колебаний $\Omega_i = \sqrt{\psi_i}$, где ψ_i — собст-

венные значения тензора ψ . Условие устойчивости кристаллической решетки, очевидно, требует положительности собственных значений этого тензора.

Диэлектрики, где тензор $\beta_{ii} = 0$, мы будем называть *неполярными*. В *полярных* диэлектриках, где этот тензор отличен от нуля, уравнение (2.29) нужно дополнить соотношением, выражающим связь между векторами D и E :

$$D = \gamma E - 4\pi \beta^T w, \quad (2.32)$$

где β^T обозначает транспонированный тензор $(\beta^T)_{ii} = \beta_{ii}$. Систему (2.29) и (2.32) надо решать совместно с уравнениями Максвелла

$$\text{rot } E = -\frac{1}{c} \frac{\partial H}{\partial t}, \quad \text{rot } H = \frac{1}{c} \frac{\partial D}{\partial t}, \quad (2.33)$$

где H — напряженность магнитного поля.

Рассмотрим решения уравнений движения в простейшем случае кристалла кубической симметрии, когда тензоры ψ , β и γ превращаются в скаляры. Система уравнений (2.29), (2.32) приобретает при этом вид

$$\begin{aligned} -\ddot{w} &= \psi w + \beta E, \\ D &= \gamma E - 4\pi \beta w. \end{aligned} \quad (2.34)$$

Начнем с вычисления диэлектрической проницаемости $\epsilon(\omega)$, фигурирующей в соотношении

$$D = \epsilon(\omega) E$$

для монохроматического переменного поля, где D и E изменяются со временем пропорционально $e^{-i\omega t}$.

Исключая w из системы уравнения (2.34), находим

$$\epsilon(\omega) = \gamma - \frac{4\pi\beta^2}{\omega^2 - \psi}. \quad (2.35)$$

Статическая диэлектрическая проницаемость

$$\epsilon(0) = \gamma + \frac{4\pi\beta^2}{\psi}. \quad (2.36)$$

Для этой величины мы введем специальное обозначение $\epsilon^{(0)}$.

Общий ход зависимости диэлектрической проницаемости от частоты изображен на рис. 1. Значению $\epsilon^{(0)}$ соответствует горизонтальная прямая на рисунке. По мере

возрастания ω растет и диэлектрическая проницаемость. При частоте

$$\Omega_t = \sqrt{\psi} \quad (2.37)$$

она обращается в бесконечность. Этому значению частоты на рисунке соответствует вертикальная прямая.

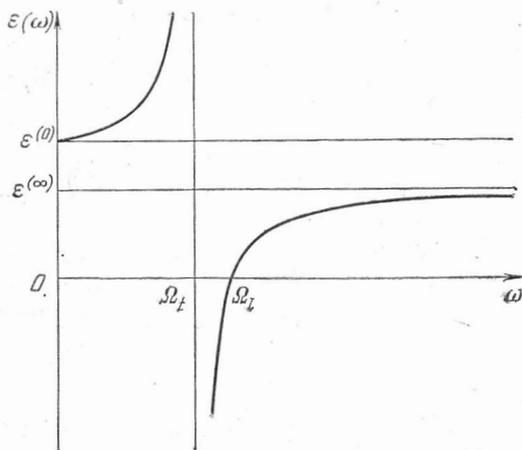


Рис. 1.

При больших частотах $\varepsilon(\omega)$ изменяет знак и остается отрицательной вплоть до частоты¹⁾

$$\Omega_l = \sqrt{\psi + 4\pi\beta^2/\gamma}, \quad (2.38)$$

при которой эта величина обращается в нуль. Интервал частот, где $\varepsilon(\omega) < 0$, соответствует, как известно, области непрозрачности кристалла. Область непрозрачности,

¹⁾ Индексы l и t — начальные буквы латинских слов longitudinalis (продольный) и transversalis (поперечный): Ω_l есть частота продольных оптических колебаний при $k=0$, а Ω_t — частота поперечных оптических колебаний при достаточно малых k ($k \ll a_l^{-1}$), однако все же таких, что связь колебания с электромагнитным полем пренебрежимо мала ($k \gg \Omega_l/c$). Их и называют, соответственно, предельными частотами продольных и поперечных оптических колебаний.

Типичные значения предельных частот Ω_l и Ω_t — несколько единиц на 10^{13}с^{-1} .

таким образом, охватывает интервал частот

$$\Omega_t < \omega < \Omega_l. \quad (2.39)$$

При $\omega > \Omega_l$ величина $\varepsilon(\omega)$ возрастает от нуля и при $\omega \gg \Omega_l$ стремится к предельному значению γ , для которого мы введем обозначение $\varepsilon^{(\infty)}$ (ему на рисунке также соответствует горизонтальная прямая).

В итоге частотную зависимость (2.35) диэлектрической проницаемости $\varepsilon(\omega)$ можно представить в следующем виде:

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon^{(\infty)} \frac{\Omega_l^2 - \omega^2}{\Omega_t^2 - \omega^2}, \quad (2.40)$$

причем частоты Ω_l и Ω_t связаны так называемым соотношением Лиддана — Сакса — Теллера (R. N. Lyddane, R. G. Sachs, E. Teller, 1941):

$$\frac{\Omega_l^2}{\Omega_t^2} = \frac{\varepsilon(0)}{\varepsilon^{(\infty)}}. \quad (2.41)$$

Таким образом, у полярных диэлектриков различаются предельные значения диэлектрической проницаемости $\varepsilon^{(0)}$ и $\varepsilon^{(\infty)}$. Различие этих двух значений диэлектрической проницаемости и ее частотная зависимость возникают потому, что имеются два вклада в диэлектрическую восприимчивость

$$\chi = \frac{\varepsilon - 1}{4\pi}$$

различной физической природы.

В области высоких частот $\omega \gg \Omega_l$ диэлектрическая восприимчивость обусловлена поляризуемостью электронных оболочек атомов, составляющих решетку. В нашей книге мы будем рассматривать интервал частот, который лежит во всяком случае существенно ниже, чем характерные частоты атомных или междузонных переходов электронов в диэлектрике¹⁾. В этом частотном

¹⁾ Имеются в виду переходы электронов через запрещенную зону между валентной зоной (которая в диэлектрике заполнена) и зоной проводимости (в диэлектрике пустой). Предполагается (как это бывает в типичном диэлектрике), что ширина запрещенной зоны атомного порядка, т. е. порядка нескольких электрон-вольт; тогда частоты междузонных переходов порядка частот видимого света.

интервале вклад от поляризуемости атомных оболочек постоянен (от частоты не зависит) и равен $(\gamma - 1)/4\pi$.

При понижении частоты начинает сказываться также решеточный вклад в диэлектрическую восприимчивость. Он обусловлен поляризацией решетки, возникающей при смещении подрешеток друг относительно друга. При $\omega \ll \Omega_i$ смещение «следует» за внешним электрическим полем, и решеточный вклад в диэлектрическую восприимчивость оказывается равным β^2/ψ . Он обратно пропорционален коэффициенту жесткости ψ , характеризующему величину возвращающей силы при относительном смещении подрешеток. Он прямо пропорционален β^2 : одна константа β входит в уравнение (2.29), характеризующую величину смещения подрешеток под влиянием внешнего электрического поля, а другая константа — в уравнение (2.32), где она характеризует величину вклада в электростатическую индукцию, т. е. в поляризацию решетки при заданном относительном смещении.

При $\omega = \Omega_i$ диэлектрическая проницаемость $\epsilon(\omega)$ обращается в нуль. Вместе с нею тождественно обращается в нуль электрическая индукция D . Уравнения Максвелла в этом случае допускают существование переменного электрического поля, удовлетворяющего одному только уравнению $\text{rot } E = 0$ при равном нулю магнитном поле H . Из сказанного явствует, что в диэлектрике могут распространяться волны, в которых электрическое поле изменяется периодически в пространстве и во времени по закону $\exp[i(kr - \Omega_i t)]$. Электрическое поле в такой волне является продольным, т. е. оно параллельно волновому вектору k .

Пологая $D = 0$ во втором соотношении (2.34), мы находим для этого случая связь между электрическим полем E и вектором относительного смещения подрешеток w :

$$w = \frac{\gamma}{4\pi\beta} E.$$

Таким образом, частота Ω_i — это есть частота продольного оптического колебания.

Рассмотрим теперь поперечные волны, которые могут распространяться в кубическом диэлектрике, т. е. такие

волны, в которых электрическое поле E , а значит, согласно (2.34), и смещение w , перпендикулярны волновому вектору k .

Обратимся к уравнениям Максвелла (2.33), которые для монохроматической волны, пропорциональной $\exp[i(kr - \Omega t)]$, имеют вид

$$\Omega H = c[kE], \quad \Omega \epsilon(\Omega) E = -c[kH].$$

Исключая отсюда магнитное поле H с учетом условия поперечности $kE = 0$ и подставляя явное выражение (2.40) для диэлектрической проницаемости $\epsilon(\Omega)$, мы получаем следующее дисперсионное уравнение:

$$\epsilon^{(\infty)} \Omega^4 - (\epsilon^{(\infty)} \Omega_i^2 + c^2 k^2) \Omega^2 + c^2 k^2 \Omega_i^2 = 0. \quad (2.42)$$

Это уравнение четвертого порядка относительно частоты Ω . Решая его, мы получаем закон дисперсии элементарных возбуждений — *поляритонов*, — которые представляют собой поперечные оптические фононы, взаимодействующие с электромагнитным полем. С учетом соотношения (2.41) решение приобретает вид

$$\Omega_{1,2}^2 = \frac{1}{2\epsilon^{(\infty)}} \left[\Omega_i^2 \epsilon^{(0)} + c^2 k^2 \pm \sqrt{(\Omega_i^2 \epsilon^{(0)} - c^2 k^2)^2 + 4(\epsilon^{(0)} - \epsilon^{(\infty)}) \Omega_i^2 c^2 k^2} \right]. \quad (2.43)$$

Соответствующие дисперсионные кривые изображены на рис. 2.

При $\epsilon^{(0)} - \epsilon^{(\infty)} = 0$ взаимодействие поперечных оптических фононов с электромагнитным полем в нашем приближении отсутствует. Законы дисперсии в этом случае изобразятся двумя прямыми: прямая $\Omega(k) = ck/\sqrt{\epsilon^{(0)}}$ проходит через начало координат и представляет собой закон дисперсии электромагнитных волн; прямая $\Omega(k) = \Omega_i$ параллельна оси абсцисс и представляет закон дисперсии поперечных оптических колебаний.

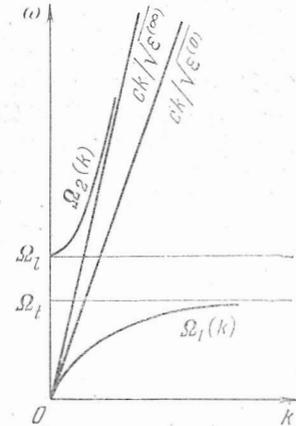


Рис. 2.

Когда разность $\varepsilon^{(0)} - \varepsilon^{(\infty)}$ отлична от нуля, взаимодействие тех и других приводит к «отталкиванию» дисперсионных кривых в окрестности точки $\Omega_t = ck/\sqrt{\varepsilon^{(0)}}$, где в отсутствие взаимодействия происходило бы их пересечение.

В итоге для каждого из двух взаимно перпендикулярных направлений поперечной поляризации получаются две поляритонные ветви. Как видно из рис. 2, одна из них имеет частоты в интервале $0 \leq \Omega_1(k) \leq \Omega_t$, а вторая — в области $\Omega_t \leq \Omega_2(k)$. При $k \ll \Omega_t \sqrt{\varepsilon^{(0)}/c}$ колебания первой ветви представляют собой электромагнитные волны в среде с диэлектрической проницаемостью $\varepsilon^{(0)}$, а второй — колебания решетки, взаимодействующие с электромагнитным полем. Их законы дисперсии имеют вид

$$\Omega_1^2 = c^2 k^2 / \varepsilon^{(0)}, \quad \Omega_2^2(k) = \Omega_t^2 + \left(\frac{1}{\varepsilon^{(\infty)}} - \frac{1}{\varepsilon^{(0)}} \right) c^2 k^2. \quad (2.44)$$

При больших k ($k \gg \Omega_t \sqrt{\varepsilon^{(0)}/c}$) возбуждения первой ветви представляют собой поперечные оптические фононы с частотой Ω_t , а второй — фотоны в среде с диэлектрической проницаемостью $\varepsilon^{(\infty)}$. Их законы дисперсии имеют, соответственно, вид

$$\Omega_1^2 = \Omega_t^2, \quad \Omega_2^2(k) = c^2 k^2 / \varepsilon^{(\infty)}. \quad (2.45)$$

В окрестности же промежуточных значений k порядка $\Omega_t \sqrt{\varepsilon^{(0)}/c}$ поляритоны представляют собой «смесь» электромагнитных колебаний и механических колебаний подрешеток друг относительно друга.

Две области частот, где существуют поляритонные ветви, разделены областью непрозрачности кристалла $\Omega_t < \Omega < \Omega$, в которой $\varepsilon(\Omega) < 0$. Нужно, однако, иметь в виду, что все наши выводы получены в пренебрежении затуханием оптических фононов. Вопрос о том, как их затухание меняет выражение для диэлектрической проницаемости кристалла, будет рассмотрен ниже (см. §§ 22—25).

До сих пор при наших рассуждениях мы не учитывали «собственной» дисперсии оптических колебаний, т. е. такой зависимости их частоты от волнового вектора k , которая проявлялась бы и в отсутствие взаимодействия с поперечным электромагнитным полем. Для ее учета

следовало бы включить в выражение (2.28) для плотности энергии U слагаемые, содержащие пространственные производные от вектора w и электрического поля E . Мы не будем обсуждать этого вопроса подробно. Укажем только, что, в зависимости от симметрии кристаллической решетки, здесь возможны два случая: дисперсионная поправка к предельной частоте оптических фононов может быть либо линейной, либо квадратичной функцией волнового вектора k . В первом случае она имеет относительный порядок $k\bar{a}$ (\bar{a} — порядка среднего расстояния между атомами решетки), а во втором случае — порядок $(k\bar{a})^2$. Соответственно, в первом случае групповая скорость оптических фононов имеет порядок характерной скорости звука \bar{v} , а во втором она оказывается для длинных волн гораздо меньше \bar{v} , а именно: равна по порядку величины

$$\bar{v} k \bar{a}. \quad (2.46)$$

В полярных кристаллах некубической симметрии тензор диэлектрической проницаемости $\varepsilon_n(\omega)$, фигурирующий в соотношениях

$$D_i = \varepsilon_n E_i,$$

также обладает существенной дисперсией (зависимостью от ω) в области частот порядка характерных частот оптических колебаний. Как известно, тензор $\varepsilon_n(\omega)$ должен быть симметричен¹⁾, и его можно привести к главным осям.

В кристаллах триклинной системы ориентация этих осей относительно кристаллографических направлений никак не фиксирована; она, в частности, может изменяться как функция частоты ω . В кристаллах моноклинной системы фиксировано положение одной из главных осей, а в кристаллах ромбической — всех трех. Во всех этих случаях тензор $\varepsilon_n(\omega)$ имеет три независимых главных значения.

В одноосных кристаллах ромбоэдрической, тетрагональной и гексагональной систем положение одной из главных осей совпадает с осью симметрии (ось z), а две

¹⁾ См. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Электродинамика сплошных сред. — М.: Гостехиздат, 1957, стр. 396.

другие можно выбрать произвольным образом перпендикулярно оси z . Тензор ε_{ii} имеет два различных главных значения.

Обсудим коротко, как следует вычислять диэлектрическую проницаемость анизотропных полярных диэлектриков. Начнем со случая одноосных кристаллов. Симметричные тензоры ψ и γ можно диагонализировать одновременно с тензором $\varepsilon_{ii}(\omega)$. Введем для главных значений тензора ψ обозначения

$$\psi_{xx} = \psi_{yy} = \psi_1, \quad \psi_{zz} = \psi_3$$

и аналогично для тензора γ . Тензор β , вообще говоря, несимметричен. Из симметрии вытекают только условия

$$\beta_{xz} = \beta_{yz} = 0.$$

Однако для ряда кристаллических классов ромбоэдрической, тетрагональной и гексагональной систем может отличаться от нуля компонента

$$\beta_{xy} = -\beta_{yx}.$$

Иногда может оказаться удобным ввести вместо антисимметричной части тензора β дуальный ему псевдовектор β , направленный, очевидно, вдоль оси симметрии кристалла z . Можно, таким образом, сказать, что кристаллические классы, в которых β_{xy} отлично от нуля, — это те

Таблица 2

Таблица 1		Таблица 2	
Система	Классы, где $\beta_{xy} \neq 0$	Система	Классы, где $\beta_{xy} = 0$
Ромбоэдрическая	C_3, S_6	Ромбоэдрическая	C_{3v}, D_3, D_{3d}
Тетрагональная	C_4, C_{4h}, S_4	Тетрагональная	$C_{4v}, D_{2d}, D_4, D_{4h}$
Гексагональная	C_{3h}, C_6, C_{6h}	Гексагональная	$D_{3h}, C_{6v}, D_6, D_{6h}$

классы, которые оставляют инвариантными псевдовектор. Они перечислены в табл. 1.

У этих же трех систем существуют и другие классы, в которых симметрия требует, чтобы $\beta_{xy} = 0$. Это классы,

в которых поперечные оси координат можно направить по таким элементам симметрии кристалла, чтобы существовало преобразование вида $x \rightarrow -x, y \rightarrow y, z \rightarrow z$. Такие кристаллические классы перечислены в табл. 2.

В общем случае $\beta_{xy} \neq 0$ система уравнений (2.29) и (2.32) дает для продольной диэлектрической проницаемости $\varepsilon_3(\omega)$ и поперечной $\varepsilon_1(\omega)$

$$\varepsilon_1(\omega) = \gamma_1 - \frac{4\pi(\beta_1^2 + \beta_{xy}^2)}{\omega^2 - \psi_1}, \quad \varepsilon_3(\omega) = \gamma_3 - \frac{4\pi\beta_3^2}{\omega^2 - \psi_3}.$$

Для классов, перечисленных в табл. 2, во второй формуле следует положить $\beta_{xy} = 0$. Эти формулы можно переписать в виде, аналогичном выражению (2.40) для кубических кристаллов:

$$\varepsilon_1(\omega) = \varepsilon_1^{(\infty)} \frac{\Omega_{i1}^2 - \omega^2}{\Omega_{i1}^2 - \omega^2}, \quad \varepsilon_3(\omega) = \varepsilon_3^{(\infty)} \frac{\Omega_{i3}^2 - \omega^2}{\Omega_{i3}^2 - \omega^2}.$$

Здесь введены обозначения:

$$\varepsilon_{1,3}^{(\infty)} = \gamma_{1,3}, \quad \Omega_{i1,3}^2 = \psi_{1,3},$$

$$\Omega_{i1}^2 = \psi_1 + \frac{4\pi(\beta_1^2 + \beta_{xy}^2)}{\gamma_1}, \quad \Omega_{i3}^2 = \psi_3 + \frac{4\pi\beta_3^2}{\gamma_3},$$

смысл которых очевиден. $\varepsilon_1^{(\infty)}$ и $\varepsilon_3^{(\infty)}$ — это значения, соответственно, поперечной и продольной диэлектрической проницаемости при

$$\omega \gg \Omega_{i1,3}.$$

Ω_{i1} и Ω_{i3} — это частоты поперечных длинноволновых оптических колебаний, поляризованных, соответственно, перпендикулярно оси симметрии и вдоль оси. Ω_{i1} и Ω_{i3} — частоты продольных оптических колебаний, распространяющихся, соответственно, перпендикулярно оси симметрии и вдоль нее.

При $\omega = 0$ для предельных значений компонент тензора $\varepsilon_{ii}(\omega)$ получается

$$\varepsilon_1(0) = \varepsilon_1^{(\infty)} \frac{\Omega_{i1}^2}{\Omega_{i1}^2}, \quad \varepsilon_3(0) = \varepsilon_3^{(\infty)} \frac{\Omega_{i3}^2}{\Omega_{i3}^2}.$$

Это есть обобщение соотношений Лиддана — Сакса — Теллера (2.41) для одноосных кристаллов.

Для кристаллов ромбической системы для трех главных значений $\varepsilon_1(\omega)$, $\varepsilon_2(\omega)$ и $\varepsilon_3(\omega)$ тензора ε_{ii} аналогичным образом получаем

$$\varepsilon_i(\omega) = \varepsilon_i^{(\infty)} \frac{\Omega_{ii}^2 - \omega^2}{\Omega_{ii}^2 - \omega^2} \quad (i = 1, 2, 3),$$

где $\varepsilon_i^{(\infty)} = \gamma_i$, $\Omega_{ii}^2 = \psi_i$, $\Omega_{ii}^2 = \psi_i + \frac{4\pi\beta_i^2}{\gamma_i}$.

Для кристаллов моноклинной и триклинной систем, где тензоры ψ и γ одновременно не приводятся к главным осям, мы не будем выписывать формулы для $\varepsilon_{ii}(\omega)$ вследствие их громоздкости.

Мы подробно рассмотрели случай двухатомной кристаллической решетки, когда в элементарной ячейке имеется два неэквивалентных атома и относительное смещение подрешеток можно было охарактеризовать, задавая один вектор w . В общем случае многоатомных решеток, когда в элементарной ячейке имеется s атомов, необходимо $s-1$ векторов w_i , чтобы охарактеризовать относительное смещение подрешеток. Выражение для плотности потенциала \tilde{U} в этом случае должно быть представлено как квадратичная функция электрического поля E и $s-1$ векторов w_i . В идейном отношении теория строится так же, как и выше, однако все выражения получаются, естественно, существенно более громоздкими.

§ 3. Квантование колебаний решетки. Фононы

Приведем классическую теорию гармонических колебаний решетки, развитую в § 1, к виду, удобному для квантования. С этой целью произведем каноническое преобразование, в результате которого функция Гамильтона, описывающая гармонические колебания решетки, окажется представленной в виде суммы функций Гамильтона невзаимодействующих гармонических осцилляторов.

Общее решение уравнений движения решетки, R_{np} , есть сумма частных решений. Оно имеет вид¹⁾

$$R_{np} = \text{Re} \sum_{kj} \mu_{kj}^{(0)} e_p(\mathbf{k}, j) \exp(-i\Omega_{kj}t + i\mathbf{k}\mathbf{a}_n), \quad (3.1)$$

¹⁾ Суммирование по \mathbf{k} в (3.1) производится по основной ячейке обратной решетки.

где амплитуды $\mu_{kj}^{(0)}$ комплексны, т. е. они характеризуют как амплитуды, так и фазы отдельных колебаний.

Зависимость от времени вида $\exp(-i\Omega_{kj}t)$ можно включить в эту комплексную амплитуду:

$$\mu_{kj}(t) = \mu_{kj}^{(0)} \exp(-i\Omega_{kj}t), \quad (3.2)$$

так что

$$R_{np} = \frac{1}{2} \sum_{kj} [\mu_{kj} e_p(\mathbf{k}, j) e^{i\mathbf{k}\mathbf{a}_n} + \mu_{kj}^* e_p^*(\mathbf{k}, j) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{a}_n}]. \quad (3.3)$$

Каждый член в этой сумме зависит от разности $\mathbf{k}\mathbf{a}_n - \Omega_{kj}t$ и описывает бегущую волну, распространяющуюся в направлении вектора \mathbf{k} .

Выразим через амплитуды μ_{kj} кинетическую энергию колебаний решетки:

$$\mathcal{E}_{\text{кин}} = \frac{1}{2} \sum_{np} M_p \dot{R}_{np}^2. \quad (3.4)$$

Подставляя сюда (3.3), получаем

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{\text{кин}} = & -\frac{1}{8} \sum_{np} \sum_{kj} \sum_{k'j'} M_p \Omega_{kj} \Omega_{k'j'} \times \\ & \times [\mu_{kj} e_p(\mathbf{k}, j) e^{i\mathbf{k}\mathbf{a}_n} - \mu_{kj}^* e_p^*(\mathbf{k}, j) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{a}_n}] \times \\ & \times [\mu_{k'j'} e_p(\mathbf{k}', j') e^{i\mathbf{k}'\mathbf{a}_n} - \mu_{k'j'}^* e_p^*(\mathbf{k}', j') e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{a}_n}]. \quad (3.5) \end{aligned}$$

При вычислении этой суммы (так же как вообще сумм подобного вида) мы будем пользоваться соотношением ортогональности (1.22), а также следующим соотношением:

$$\sum_n e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{a}_n} = N \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'+\mathbf{b}}, \quad (3.6)$$

где \mathbf{b} — произвольный вектор обратной решетки. В справедливости этой формулы проще всего убедиться следующим образом. Произведем трансляцию решетки на какой-либо вектор решетки \mathbf{a}_n . При этом каждый атом займет положение другого, ему эквивалентного атома. Сумма же (3.6) не должна измениться, так как все дело сводится к переобозначению отдельных ее членов.

С другой стороны, каждый член, а значит, и вся сумма приобретают при трансляции множитель

$$e^{i(k-k')a_n}$$

Это значит, что либо сумма (3.6) равна нулю, либо $(k - k') a_n$ кратно 2π . Таким образом, сумма отлична от нуля, только если векторы k и k' отличаются на вектор обратной решетки, т. е. эквивалентны друг другу. Число членов суммы при этом равно N , и мы получаем формулу (3.6).

Если же условиться выбирать квазиволновые векторы в основной ячейке обратной решетки, то мы должны считать, что $k = k'$ и формула (3.6) примет вид¹⁾

$$\sum_n e^{i(k-k')a_n} = N\delta_{kk'}. \quad (3.6')$$

В итоге оказывается, что в выражении (3.5) отличны от нуля только слагаемые с $k = \pm k'$. Окончательно мы получим

$$\mathcal{E}_{\text{кин}} = \frac{MN}{8} \sum_{kj} \Omega_{kj}^2 (2\mu_{kj}^* \mu_{kj} - \mu_{kj} \mu_{-kj} - \mu_{kj}^* \mu_{-kj}^*). \quad (3.7)$$

Аналогичным образом для потенциальной энергии (1.2) получаем

$$\mathcal{U}_2 = \frac{MN}{8} \sum_{kj} \Omega_{kj}^2 (2\mu_{kj}^* \mu_{kj} + \mu_{kj} \mu_{-kj} + \mu_{kj}^* \mu_{-kj}^*). \quad (3.8)$$

Полная энергия в гармоническом приближении есть сумма выражений (3.7) и (3.8):

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_{\text{кин}} + \mathcal{U}_2 = \frac{1}{2} \rho \mathcal{V} \sum_{kj} \Omega_{kj}^2 \mu_{kj}^* \mu_{kj}. \quad (3.9)$$

Здесь мы учли, что $MN = \rho \mathcal{V}$.

Произведем далее следующую замену переменных:

$$\begin{aligned} Q_{kj} &= \frac{1}{2} \sqrt{\rho \mathcal{V}} (\mu_{kj} + \mu_{kj}^*), \\ P_{kj} &= -\frac{i}{2} \sqrt{\rho \mathcal{V}} \Omega_{kj} (\mu_{kj} - \mu_{kj}^*) = \dot{Q}_{kj}. \end{aligned} \quad (3.10)$$

¹⁾ В справедливости этой формулы легко убедиться также и непосредственно, суммируя произведение трех геометрических прогрессий в левой части (3.6) и принимая во внимание условия периодичности (1.24).

Обратно,

$$\begin{aligned} \mu_{kj} &= \frac{1}{\sqrt{\rho \mathcal{V}}} \left(Q_{kj} - \frac{P_{kj}}{i\Omega_{kj}} \right), \\ \mu_{kj}^* &= \frac{1}{\sqrt{\rho \mathcal{V}}} \left(Q_{kj} + \frac{P_{kj}}{i\Omega_{kj}} \right). \end{aligned} \quad (3.11)$$

В новых переменных

$$\mathcal{E} = \frac{1}{2} \sum_{kj} (\Omega_{kj}^2 Q_{kj}^2 + P_{kj}^2). \quad (3.12)$$

Это выражение и есть преобразованная функция Гамильтона малых колебаний решетки. Она представляет собой сумму $3zN$ слагаемых, каждое из которых содержит одну пару величин Q_{kj} , P_{kj} .

Каждое слагаемое имеет вид функции Гамильтона одномерного гармонического осциллятора. Оно описывает определенное нормальное колебание решетки. Нормальное колебание в данном случае представляет собой бегущую волну, которая характеризуется определенным номером колебательной ветви j и квазиволновым вектором k . В гармоническом приближении отдельные нормальные колебания не взаимодействуют друг с другом.

Произведем теперь квантование колебаний решетки. Для этого нужно рассмотреть канонические переменные P_{kj} и Q_{kj} как операторы, удовлетворяющие перестановочным соотношениям:

$$\hat{P}_{kj} \hat{Q}_{kj} - \hat{Q}_{kj} \hat{P}_{kj} = -i\hbar. \quad (3.13)$$

Операторы, относящиеся к разным нормальным колебаниям, коммутируют друг с другом.

Определение собственных значений оператора энергии сводится, таким образом, к задаче об уровнях энергии системы линейных осцилляторов¹⁾. Мы имеем

$$\mathcal{E} = \sum_{kj} (N_{kj} + 1/2) \hbar \Omega_{kj}, \quad (3.14)$$

¹⁾ См., например, Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика.— М.: Наука, 1974, с. 92, или Шифф Л. Квантовая механика.— М.: ИЛ, 1957, с. 80.

где $N_{kj} = 0, 1, 2, \dots$. Квантовое число N_{kj} характеризует уровень возбуждения осциллятора k, j . В таком случае говорят, что в данном состоянии имеется N_{kj} колебательных квантов — фононов, а сами числа N_{kj} называются *фононными числами заполнения* или просто *числами фононов*. Наличие слагаемых $\hbar\Omega_{kj}/2$ в сумме (3.14) отражает то обстоятельство, что даже в основном состоянии, когда все числа заполнения N_{kj} равны нулю, имеется некоторая квантовая неопределенность в положениях и скоростях атомов решетки, выражающаяся в том, что квантовомеханические средние от величин R_{np}^2 (и \bar{R}_{np}^2) отличны от нуля¹⁾. Этот квантовомеханический эффект называют *нулевыми колебаниями* решетки; соответственно, слагаемые $\hbar\Omega_{kj}/2$ носят название *энергии нулевых колебаний*.

Отличные от нуля матричные элементы операторов \hat{Q}_{kj} равны

$$\langle N_{kj} | \hat{Q}_{kj} | N_{kj} - 1 \rangle = \langle N_{kj} - 1 | \hat{Q}_{kj} | N_{kj} \rangle = \sqrt{\frac{\hbar N_{kj}}{2\Omega_{kj}}}. \quad (3.15)$$

Для матричных элементов величин $\hat{P}_{kj} = \hat{Q}_{kj}$ имеем

$$\langle N_{kj} | \hat{P}_{kj} | N_{kj} - 1 \rangle = \langle N_{kj} - 1 | \hat{P}_{kj} | N_{kj} \rangle^* = i \sqrt{\frac{\hbar\Omega_{kj} N_{kj}}{2}}. \quad (3.16)$$

Далее удобно ввести операторы рождения и уничтожения фононов

$$\begin{aligned} \hat{c}_{kj}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar\Omega_{kj}}} (\Omega_{kj}\hat{Q}_{kj} - i\hat{P}_{kj}), \\ \hat{c}_{kj} &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar\Omega_{kj}}} (\Omega_{kj}\hat{Q}_{kj} + i\hat{P}_{kj}). \end{aligned}$$

Соответствующие этим операторам классические величины c_{kj} и c_{kj}^* связаны с амплитудами μ_{kj} и μ_{kj}^* соотношениями

$$\mu_{kj} = \sqrt{\frac{2\hbar}{\rho\gamma^2\Omega_{kj}}} c_{kj}, \quad \mu_{kj}^* = \sqrt{\frac{2\hbar}{\rho\gamma^2\Omega_{kj}}} c_{kj}^*. \quad (3.17)$$

¹⁾ Среднее от R_{np}^2 будет вычислено в § 6.

Матричные элементы операторов $\hat{c}_{kj}, \hat{c}_{kj}^\dagger$ равны

$$\langle N_{kj} - 1 | \hat{c}_{kj} | N_{kj} \rangle = \langle N_{kj} | \hat{c}_{kj}^\dagger | N_{kj} - 1 \rangle = \sqrt{N_{kj}}. \quad (3.18)$$

С помощью (3.13) находим следующие соотношения коммутации между этими операторами:

$$\hat{c}_{kj}\hat{c}_{k'j'}^\dagger - \hat{c}_{k'j'}^\dagger\hat{c}_{kj} = \delta_{kk'}\delta_{jj'}. \quad (3.19)$$

При действии оператора \hat{c}_{kj} на волновую функцию состояния с N_{kj} фононами получается волновая функция состояния с $N_{kj} - 1$ фононами. Поэтому \hat{c}_{kj} называется *оператором уничтожения фонона*. Аналогичным образом \hat{c}_{kj}^\dagger есть *оператор рождения фонона*.

Гамильтониан решетки, выраженный через эти операторы, имеет вид

$$\hat{\mathcal{E}} = \frac{1}{2} \sum_{kj} \hbar\Omega_{kj} (\hat{c}_{kj}^\dagger\hat{c}_{kj} + \hat{c}_{kj}\hat{c}_{kj}^\dagger) = \sum_{kj} \hbar\Omega_{kj} \left(\hat{c}_{kj}^\dagger\hat{c}_{kj} + \frac{1}{2} \right). \quad (3.20)$$

Произведение $\hat{c}_{kj}^\dagger\hat{c}_{kj}$ есть в представлении фононных чисел заполнения диагональный оператор с матричными элементами N_{kj} ; он является, таким образом, оператором числа фононов в состоянии k, j .

Оператор вектора смещения \hat{R}_{np} выражается через операторы рождения и уничтожения фонона следующим образом:

$$\hat{R}_{np} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\rho\gamma^2}} \sum_{kj} \frac{1}{\sqrt{\Omega_{kj}}} [\hat{c}_{kj} e_p(k, j) e^{ik_a n} + \hat{c}_{kj}^\dagger e_p^*(k, j) e^{-ik_a n}]. \quad (3.21)$$

Для дальнейшего будет удобно преобразовать это выражение. Заменим во втором слагаемом в (3.21) индекс суммирования k на $-k$ и примем во внимание соотношение (1.16) для векторов $e_p(k, j)$. Вынося общий коэффициент при операторах \hat{c}_{kj} и \hat{c}_{kj}^\dagger , получим

$$\hat{R}_{np} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\rho\gamma^2}} \sum_{kj} \frac{1}{\sqrt{\Omega_{kj}}} e_p(k, j) e^{ik_a n} (\hat{c}_{kj} + \hat{c}_{-kj}^\dagger). \quad (3.22)$$

Для оператора скорости атома решетки получаем формулу

$$\hat{R}_{np} = -i \sqrt{\frac{\hbar}{2\rho\gamma^2}} \sum_{kj} \sqrt{\Omega_{kj}} e_p(\mathbf{k}, j) e^{i\mathbf{k}a\mathbf{n}} (\hat{c}_{kj} - \hat{c}_{-kj}^\dagger). \quad (3.23)$$

Остановимся на особенностях квантовомеханического описания длинноволновых акустических колебаний. Для перехода к этому описанию нет необходимости пользоваться уравнениями движения дискретной решетки, а можно действовать непосредственно в рамках теории упругости. В качестве исходного следует взять выражение для полной энергии упругой сплошной среды — суммы потенциальной и кинетической энергии:

$$\mathcal{E} = \frac{1}{2} \int d^3r \left(\rho \dot{\mathbf{u}}^2 + \lambda_{ilmn} \frac{\partial u_i}{\partial r_l} \frac{\partial u_m}{\partial r_n} \right). \quad (3.24)$$

Поскольку вся дальнейшая процедура аналогична проделанной выше, мы, не останавливаясь на деталях, приведем результаты.

Оператор упругого смещения $\hat{\mathbf{u}}(\mathbf{r}, t)$ сплошной среды запишется в виде

$$\hat{\mathbf{u}}(\mathbf{r}, t) = \sqrt{\frac{\hbar}{2\rho\gamma^2}} \sum_{ka} \frac{1}{\sqrt{\Omega_{ka}}} e(\mathbf{k}, a) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} (\hat{c}_{ka} + \hat{c}_{-ka}^\dagger). \quad (3.25)$$

Оператор скорости сплошной среды

$$\hat{\mathbf{u}}(\mathbf{r}, t) = -i \sqrt{\frac{\hbar}{2\rho\gamma^2}} \sum_{ka} \sqrt{\Omega_{ka}} e(\mathbf{k}, a) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} (\hat{c}_{ka} - \hat{c}_{-ka}^\dagger), \quad (3.26)$$

а оператор пространственной производной

$$\frac{\partial \hat{u}_l}{\partial r_m} = i \sqrt{\frac{\hbar}{2\rho\gamma^2}} \sum_{ka} \frac{1}{\sqrt{\Omega_{ka}}} e_l(\mathbf{k}, a) k_m e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} (\hat{c}_{ka} + \hat{c}_{-ka}^\dagger). \quad (3.27)$$

Наконец, оператор энергии системы длинноволновых акустических фононов имеет вид, аналогичный (3.14):

$$\hat{\mathcal{E}} = \sum_{ka} \hbar \Omega_{ka} \left(\hat{N}_{ka} + \frac{1}{2} \right). \quad (3.28)$$

§ 4. Функция распределения фононов

Кристалл, колебания которого мы изучали, является примером макроскопической системы, т. е. системы, состоящей из большого числа частиц. Соответственно, и число колебательных степеней свободы в кристалле очень велико; оно равно, как мы видели, $3Ns$.

Чтобы дать полное описание такой системы — так называемое динамическое (или микроскопическое) описание, следовало бы определить ее волновую функцию в зависимости от времени t . Фактически, разумеется, дать динамическое описание системы с очень большим числом степеней свободы невозможно. Вместо этого используется так называемое *сокращенное описание*, которое оперирует не $3Ns$ переменными, а гораздо меньшим их числом. Они называются *макроскопическими переменными*, а состояние, которое они описывают, — *макроскопическим состоянием* (сокращенно — макросостоянием). Макроскопические переменные представляют собой некоторые усредненные величины, которые можно применять для характеристики макросостояния системы.

Подчеркнем, что необходимость обратиться к макроскопическому описанию связана отнюдь не только с тем, что мы реально не можем иметь дело с функцией, зависящей от $3Ns$ переменных, а главным образом с тем, что использование такого описания позволяет выявить совершенно новый тип закономерностей — статистические, — которым подчиняются макроскопические системы.

Рассмотрим, как описывается макросостояние системы невзаимодействующих фононов. Пусть каждый из осцилляторов \mathbf{k}, j , соответствующих нормальному колебанию решетки, находится в состоянии с определенным числом фононов N_{kj} . Тогда микросостояние такого идеального газа фононов можно охарактеризовать, задав все фононные числа заполнения N_{kj} .

Макросостояние фононного газа мы будем описывать следующим образом. Разделим всю область изменения переменной \mathbf{k} , т. е. всю основную ячейку обратной решетки, на отдельные подобласти, которые перенумеруем числами $\varepsilon = 1, 2, \dots$. Каждая подобласть включает \mathcal{E}_ε близких значений \mathbf{k} , причем как \mathcal{E}_ε , так и суммарное по

всей подобласти число заполнения \mathcal{N}_ε , мы будем считать большими числами.

Обозначим угловыми скобками $\langle \rangle$ операцию усреднения, производимую в два этапа: 1) квантовомеханическое усреднение; 2) усреднение по группе \mathcal{G}_ε близких состояний.

Назовем функцией распределения фононов среднее (в указанном смысле) значение числа заполнения $\langle N_{kj} \rangle$. Считая отдельные осцилляторы, соответствующие нормальным колебаниям решетки, находящимися в стационарных состояниях с определенными числами заполнения N_{kj} , мы имеем

$$\langle N_{kj} \rangle = \mathcal{N}_{\varepsilon j} / \mathcal{G}_\varepsilon. \quad (4.1)$$

В качестве аргумента k фононной функции распределения можно выбрать любой волновой вектор, принадлежащий к группе \mathcal{G}_ε близких состояний.

Зачастую там, где это не может привести к недоразумению, мы будем при записи фононной функции распределения опускать угловые скобки, т. е. обозначать ее так же, как и фононные числа заполнения, N_{kj} .

Обсудим физический смысл первого этапа усреднения, заключающегося в данном случае в переходе к описанию колебательных состояний с помощью фононных чисел заполнения N_{kj} . Для этого проследим связь с классическим описанием гармонических колебаний. При классическом описании гармоническое колебание данной частоты характеризуется определенными амплитудой и фазой. Энергия колебания пропорциональна квадрату амплитуды, а от фазы не зависит.

С точки зрения квантовомеханического описания энергии колебания и его фаза — это две величины, которые не могут быть измерены одновременно. Задание числа заполнения N_{kj} эквивалентно заданию определенной энергии колебания и утверждению, что все значения фазы колебания равновероятны. Отсюда следует вывод, что только такие макросостояния можно описывать с помощью средних чисел заполнения, для определения которых фазы колебаний не играют роли. Квантовомеханическое же усреднение, о котором говорилось выше, можно наглядно представить себе как усреднение по фазам колебаний.

Из сказанного также следует вывод, что существуют такие макросостояния системы колебаний решетки, которые вообще нельзя описать с помощью функции распределения фононов. Это любые колебательные состояния, для описания которых существенна фаза колебаний. В качестве примера можно указать ситуацию, когда под влиянием внешнего возмущения в системе возбуждается группа взаимодействующих колебаний с кратными частотами; при описании их взаимодействия друг с другом и с внешним возмущением фазовые соотношения могут играть определяющую роль¹⁾. В нашей книге мы не будем рассматривать квантовых состояний такого типа, а ограничимся рассмотрением только таких неравновесных состояний, которые можно описывать в терминах фононной функции распределения²⁾.

Поскольку число отдельных подобластей, на которые мы разделили область изменения переменной k гораздо меньше, чем N , фононная функция распределения (4.1) дает сокращенное (усредненное) описание системы фононов. Функция $\langle N_{kj} \rangle$ может, в зависимости от вида неравновесного состояния, либо оставаться постоянной, либо зависеть от времени t (например, вследствие того, что зависит от времени внешнее поле, действующее на систему, а вместе с ним — и фононные частоты). Во втором случае следует несколько обобщить первоначальное определение функции $\langle N_{kj} \rangle$. А именно: теперь нужно рассматривать нестационарные квантовые состояния осцилляторов с k , соответствующими данной подобласти ε , а под \mathcal{N}_ε понимать суммарное по всей подобласти среднее число заполнения, где усреднение и производится по этим нестационарным квантовым состояниям. Мы будем рассматривать только медленное (по сравнению с характерными периодами колебаний) изменение фононной функции распределения. В этом случае квантовые со-

¹⁾ Такие условия возникают в системах типа лазера.

²⁾ Мы, однако, будем далее рассматривать классические колебания с определенной амплитудой и фазой, например звуковые колебания (см. главу IV). Они будут трактоваться как классическое поле, взаимодействующее с системой фононов. Поскольку в выражение для энергии такого взаимодействия фазы отдельных колебаний решетки не входят, неравновесное состояние фононной системы мы сможем характеризовать фононной функцией распределения.

стояния, по которым производится усреднение, можно считать «почти» стационарными: в течение небольшого числа периодов они ведут себя как стационарные; их отличие от стационарных проявляется лишь за много периодов.

Через фоновую функцию распределения выражается ряд макроскопических величин, характеризующих состояние фоновой системы. Один из примеров таких величин — это плотность энергии фоновой системы, т. е. энергия, приходящаяся на единицу объема. Для нее мы имеем в гармоническом приближении (если отбросить энергию нулевых колебаний)

$$U = \sum_j \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \hbar \Omega_{kj} \langle N_{kj} \rangle. \quad (4.2)$$

Плотность энергии системы фононов есть линейный функционал от их функции распределения. При вычислении такого функционала безразлично, суммировать ли сразу по всем фоновым состояниям, или же сначала усреднить по группе из \mathcal{G}_ε близких состояний, а затем производить суммирование. Польза макроскопического описания в этом случае будет видна позже — при выводе уравнения, которому удовлетворяет функция распределения — кинетического уравнения.

Однако преимущество макроскопического описания видно непосредственно, если рассмотреть вычисление такого нелинейного функционала, каковым является энтропия неравновесного идеального газа фононов.

Энтропия неравновесного фоновый газа есть, как известно, логарифм статистического веса макросостояния системы. В свою очередь, статистический вес макросостояния есть число микросостояний, ему соответствующих. Статистический вес, соответствующий каждой независимой группе из $\mathcal{N}_{\varepsilon j}$ частиц, есть число способов, которыми $\mathcal{N}_{\varepsilon j}$ тождественных частиц можно распределить между \mathcal{G}_ε уровнями. Это число равно

$$\frac{(\mathcal{G}_\varepsilon + \mathcal{N}_{\varepsilon j} - 1)!}{(\mathcal{G}_\varepsilon - 1)! \mathcal{N}_{\varepsilon j}!}. \quad (4.3)$$

Учитывая, что оба числа, \mathcal{G}_ε и $\mathcal{N}_{\varepsilon j}$, велики, при вычислении логарифма этого выражения воспользуемся

асимптотической формулой Стирлинга:

$$\ln \mathcal{N}! \approx \mathcal{N} (\ln \mathcal{N} - 1).$$

Тогда, пренебрегая единицей по сравнению с большим числом \mathcal{G}_ε , мы получаем для логарифма выражения (4.3):

$$(\mathcal{G}_\varepsilon + \mathcal{N}_{\varepsilon j}) \ln (\mathcal{G}_\varepsilon + \mathcal{N}_{\varepsilon j}) - \mathcal{N}_{\varepsilon j} \ln \mathcal{N}_{\varepsilon j} - \mathcal{G}_\varepsilon \ln \mathcal{G}_\varepsilon.$$

Энтропия неравновесного газа фононов \mathcal{P} есть сумма таких выражений по всем подобластям ε и фоновым ветвям j :

$$\mathcal{P} = \sum_{\varepsilon j} [(\mathcal{G}_\varepsilon + \mathcal{N}_{\varepsilon j}) \ln (\mathcal{G}_\varepsilon + \mathcal{N}_{\varepsilon j}) - \mathcal{N}_{\varepsilon j} \ln \mathcal{N}_{\varepsilon j} - \mathcal{G}_\varepsilon \ln \mathcal{G}_\varepsilon].$$

Вспоминая определение (4.1) функции распределения фононов, мы можем переписать это выражение в следующем виде:

$$\mathcal{P} = \sum_{kj} [(N_{kj} + 1) \ln (N_{kj} + 1) - N_{kj} \ln N_{kj}],$$

откуда плотность энтропии $S = \mathcal{P}/\mathcal{V}$ есть

$$S = \sum_j \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} [(N_{kj} + 1) \ln (N_{kj} + 1) - N_{kj} \ln N_{kj}]. \quad (4.4)$$

Вывод этого выражения существенно использовал возможность макроскопического описания системы фононов, которое позволило считать числа \mathcal{N}_ε и \mathcal{G}_ε большими.

В дальнейшем при рассмотрении многих кинетических задач мы столкнемся с необходимостью вычислять средние значения от произведения некоторого числа операторов рождения и уничтожения фононов. Такие средние нетрудно вычислить в гармоническом приближении, когда отдельные колебания решетки можно считать независимыми. Мы имеем

$$\langle \hat{c}_{kj} \rangle = \langle \hat{c}_{kj}^\dagger \rangle = 0, \quad (4.5)$$

поскольку эти операторы имеют отличные от нуля матричные элементы только для переходов с изменением числа фононов на единицу.

Этим соотношениям также можно дать наглядное истолкование, основанное на аналогии с классической механикой. \hat{c}_{kj} можно трактовать как оператор комплексной

координаты, описывающей данное гармоническое колебательное движение; она изменяется во времени по закону

$$\widehat{c}_{kj}(t) = \widehat{c}_{kj} \exp(-i\Omega_{kj}t).$$

\widehat{c}_{kj}^\dagger — это оператор величины, комплексно сопряженной \widehat{c}_{kj} . Соотношение (4.5) означает, что среднее от этой координаты по всем возможным значениям фазы колебания, т. е. по существу среднее по периоду колебания равно нулю.

Должны равняться нулю также и средние от любых выражений, содержащих произведение неодинакового числа операторов \widehat{c}_{kj}^\dagger и \widehat{c}_{kj} : такие операторные выражения тоже не имеют диагональных по N_{kj} матричных элементов. Далее,

$$\langle \widehat{c}_{k'j'}^\dagger \widehat{c}_{kj} \rangle = \langle N_{kj} \rangle \delta_{kk'} \delta_{jj'}. \quad (4.6)$$

Аналогичным образом, для произведения двух пар операторов \widehat{c} и \widehat{c}^\dagger мы имеем (при $k \neq k'$ и/или $j \neq j'$)

$$\langle \widehat{c}_{kj}^\dagger \widehat{c}_{k'j'}^\dagger \widehat{c}_{k'j} \widehat{c}_{kj} \rangle = \langle N_{kj} \rangle \langle N_{k'j'} \rangle. \quad (4.7)$$

Эти два соотношения выражают независимость различных нормальных колебаний в гармоническом приближении.

Мы не выписываем выражения для среднего (4.7) при $k = k', j = j'$. Дело в том, что далее нас будут интересовать не такие средние сами по себе, а суммы от них по всем значениям k' (см. ниже — § 6). Число слагаемых в такой сумме пропорционально N , и то обстоятельство, что для $k = k', j = j'$ получается особое выражение, дает ошибку порядка $1/N$. При вычислении макроскопических величин, которым мы будем заниматься далее, такая относительная ошибка пренебрежимо мала. Среднее (4.7) при $k = k', j = j'$ было бы важно знать только для расчета флуктуаций макроскопических величин, которые сами по себе имеют относительный порядок $1/N$ по сравнению с этими величинами; мы, однако, не будем здесь этим заниматься.

Среди неравновесных состояний, которые нам предстоит изучать, будут и пространственно-неоднородные. Для того чтобы описывать пространственную неоднородность макроскопического масштаба, удобно использовать представление фоновых волновых пакетов.

Волновой пакет представляет собой суперпозицию монокроматических колебаний решетки, принадлежащих к определенной ветви j , занимающую ограниченную область в пространстве. Если обозначить посредством ΔR характерные пространственные размеры волнового пакета, то волновые векторы колебаний, составляющих волновой пакет, лежат в некотором малом интервале Δk вблизи среднего значения k , причем по порядку величины

$$\Delta k \simeq 1/\Delta R.$$

Таким образом, пространственные размеры волнового пакета должны во всяком случае заметно превышать длины волн составляющих его колебаний. Соответственно, частоты этих колебаний расположены в некотором малом частотном интервале вблизи средней частоты $\Omega_j(k)$.

Переход к описанию системы фононов с помощью волновых пакетов можно рассматривать с точки зрения волновой механики как переход от представления плоских волн к другому представлению посредством канонического преобразования. В представлении плоских волн каждое колебательное состояние данной ветви j характеризуется волновым вектором k , принимающим N возможных значений. Для макроскопического тела эти дискретные значения расположены настолько густо, что можно рассматривать как непрерывную переменную.

В представлении волновых пакетов каждое колебательное состояние ветви j описывается двумя векторами: волновым вектором k (средним волновым вектором волн, составляющих пакет) и координатой r (координатой «центра» пакета). И та, и другая переменные могут принимать дискретные значения, так что число пар их возможных значений по-прежнему равно N . Поскольку, однако, N — огромное число, то в представлении волновых пакетов k и r , можно рассматривать как непрерывные переменные.

Далее, производя квантовомеханическое усреднение оператора числа фононов, мы можем определить среднее число фононов $N_{kj}(r)$ в этом состоянии. Усредняя это число по группе близких состояний, т. е. состояний с близкими значениями k и r , мы получим функцию распределения фононов в представлении волновых пакетов

$$\langle N_{kj}(r, t) \rangle.$$

Коротко эту величину мы будем называть по-прежнему фононной функцией распределения.

Получим уравнение, которому удовлетворяет фононная функция распределения в гармоническом приближении. Для этого нужно сначала вывести уравнение, описывающее движение волновых пакетов.

Рассмотрим вектор смещения атомов решетки R_n ¹⁾ при распространении волнового пакета. Пусть в начальный момент времени ($t = 0$)

$$R_n = \exp(ika_n) \rho(a_n - r), \quad (4.8)$$

где функция $\rho(a_n - r)$ описывает форму волнового пакета, центр которого расположен в точке r . В соответствии со сказанным, разложение функции ρ в ряд Фурье включает компоненты Фурье с $\Delta k \ll k$.

Рассмотрим в начальный момент времени монохроматическую компоненту смещения с волновым вектором $k + \Delta k$. Она пропорциональна

$$(R_n)_{k+\Delta k} \sim \exp[ika_n + i\Delta k(a_n - r)]. \quad (4.9)$$

В момент времени Δt мы имеем

$$\begin{aligned} (R_n)_{k+\Delta k} &\sim \exp[i(k a_n - \Omega_{k+\Delta k} \Delta t) + i\Delta k(a_n - r)] = \\ &= \exp[i(k a_n - \Omega_k \Delta t) + i\Delta k(a_n - r - g \Delta t)]. \end{aligned} \quad (4.10)$$

Здесь мы, используя малость Δk , разложили $\Omega_{k+\Delta k}$ в ряд:

$$\Omega_{k+\Delta k} = \Omega_k + g \Delta k,$$

где $g = \partial\Omega/\partial k$ — групповая скорость.

Собирая компоненты Фурье (4.10), мы получаем, сравнивая выражения (4.10) и (4.9), что смещение в момент времени Δt есть

$$R_n(\Delta t) = \exp[i(k a_n - \Omega_k \Delta t)] \rho(a_n - r - g \Delta t).$$

Таким образом, за время Δt центр волнового пакета передвинулся на величину $g \Delta t$. Следовательно, скорость центра волнового пакета есть групповая скорость g .

Сказанное означает, что координата r центра волнового пакета удовлетворяет уравнению

$$\dot{r} = \partial\Omega/\partial k.$$

¹⁾ Индекс p (номер атома в элементарной ячейке) для краткости опускаем.

Таким образом, движение центров волновых пакетов происходит по такому же закону, как и движение частиц с функцией Гамильтона $\hbar\Omega(p/\hbar)$, причем $p = \hbar k$ и r следует рассматривать как канонически сопряженные переменные. При анализе динамики фононных волновых пакетов нам, однако, будет удобнее пользоваться величинами k и Ω , отличающимися от p и $\hbar\Omega$, соответственно, множителем \hbar^{-1} .

Представим себе теперь, что кристаллическая решетка подверглась действию внешнего поля. Это может быть, например, электрическое поле или же поле деформации. Тогда фононные частоты будут, вообще говоря, зависеть от поля как от параметра¹⁾. Пусть поле пространственно-неоднородно, т. е. зависит от пространственных координат r . Если масштаб неоднородности заметно превышает характерные длины волн фононов, то влияние неоднородности можно описать, вводя явную зависимость закона дисперсии фононов от пространственной координаты r . Ввиду того, что величины k и r входят в теорию симметричным образом, мы можем по аналогии с расчетом, проделанным выше, сразу заключить, что они удовлетворяют уравнениям, имеющим вид канонических уравнений Гамильтона:

$$\dot{r} = \frac{\partial\Omega}{\partial k}, \quad \dot{k} = -\frac{\partial\Omega}{\partial r}. \quad (4.11)$$

Если внешнее поле (а значит, и фононный закон дисперсии) зависит также и от времени t , причем частота его изменения ω мала по сравнению с частотами колебаний решетки:

$$\omega \ll \Omega, \quad (4.12)$$

то в уравнениях (4.11) фигурирует функция $\Omega(k, r, t)$, которая является явной функцией t .

Относительное изменение фононной функции распределения $N_{kj}(r, t) = \mathcal{N}_{ej}/\mathcal{G}_e$ при изменении одного из фононных чисел заполнения на единицу чрезвычайно мало, так что ее можно рассматривать с высокой точностью как непрерывную функцию своих аргументов k, r, t . В отсутствие взаимодействия между фононами, обусловленного

¹⁾ Ниже (см. §§ 20 и 29) эта зависимость будет проанализирована явно для случаев электрического поля и поля деформации.

ангармонизмом, полная производная по времени функции распределения равна нулю. Если внешнее поле отсутствует, это утверждение очевидно. Если внешнее поле медленно (в указанном выше смысле) изменяется во времени, то число фононов остается неизменным, поскольку такого рода возмущение является адиабатическим, и вероятность вызываемых им переходов чрезвычайно мала¹⁾. Наконец, действие неоднородного поля (в отношении переходов с изменением чисел N_{kj}) можно с принятой точностью свести к действию нестационарного, если перейти к системе координат, движущейся вместе с центром пакета.

Таким образом,

$$\frac{dN}{dt} = \frac{\partial N}{\partial t} + \frac{\partial N}{\partial \mathbf{k}} \dot{\mathbf{k}} + \frac{\partial N}{\partial \mathbf{r}} \dot{\mathbf{r}} = 0.$$

Подставляя сюда выражения для $\dot{\mathbf{r}}$ и $\dot{\mathbf{k}}$ из (4.11), мы получаем уравнение

$$\frac{\partial N}{\partial t} + \frac{\partial \Omega}{\partial \mathbf{k}} \frac{\partial N}{\partial \mathbf{r}} - \frac{\partial \Omega}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial N}{\partial \mathbf{k}} = 0. \quad (4.13)$$

Если же функция Ω не зависит от \mathbf{r} , это уравнение приобретает более простой вид

$$\frac{\partial N}{\partial t} + \frac{\partial \Omega}{\partial \mathbf{k}} \frac{\partial N}{\partial \mathbf{r}} = 0. \quad (4.14)$$

Этим упрощенным уравнением мы будем пользоваться для описания движения фононных волновых пакетов в тех случаях, когда на систему действуют внешние силы, не зависящие от пространственных координат.

§ 5. Дебаевское приближение для фононного спектра. Термодинамические функции системы фононов

Фононный спектр кристаллов имеет обычно весьма сложный вид. Фононные частоты $\Omega_j(\mathbf{k})$ — это сложные функции величины и направления волнового вектора \mathbf{k} . Более того, для большинства веществ их детальный вид

¹⁾ См. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. — М.: Наука, 1974, с. 178; Бом Д. Квантовая теория. — М.: Физматгиз, 1961, с. 573.

в настоящее время либо неизвестен вообще, либо известен с недостаточной точностью.

Ниже при анализе кинетических явлений в фононных системах нам придется производить много порядковых оценок вероятностей перехода, кинетических коэффициентов и т. п. Результат этих оценок зачастую нечувствителен к деталям фононных законов дисперсии. В силу этого обстоятельства такие оценки удобнее всего производить, воспользовавшись простейшей моделью фононного спектра. Такая модель обязана удовлетворять двум основным требованиям: 1) она должна качественно правильно передавать ход низкочастотной части фононного спектра, где, согласно теории упругости, частота есть линейная функция длины волнового вектора фонона; 2) она должна быть совместима с данными о числе атомов в элементарной ячейке кристалла, т. е. о полном числе его колебательных степеней свободы, соответствующих как акустическим, так и оптическим ветвям. Подобная модель, которую мы сейчас опишем, была предложена Дебаем (P. J. W. Debye, 1912).

Начнем с рассмотрения низкочастотной части фононного спектра — акустических колебаний. Предположим, что кристалл в отношении своих упругих свойств изотропен. Тогда имеются две поперечные акустические ветви и одна продольная. Векторы поляризации поперечных ветвей $\mathbf{e}(\mathbf{k}, t_1)$ и $\mathbf{e}(\mathbf{k}, t_2)$ перпендикулярны волновому вектору \mathbf{k} и друг другу; вектор поляризации продольной ветви направлен вдоль \mathbf{k} . Равные друг другу скорости поперечных колебаний обозначим v_t ; скорость продольных колебаний будет обозначаться v_l .

Определим плотность числа собственных колебаний, т. е. число собственных колебаний, приходящееся на единичный интервал фононных частот (эту величину называют обычно *плотностью фононных состояний*). Число собственных колебаний в одной акустической ветви, приходящееся на объем d^3k \mathbf{k} -пространства, равно $\mathcal{V} d^3k / (2\pi)^3$. Соответственно, число собственных колебаний в одной ветви, приходящееся на интервал dk абсолютной величины волнового вектора, равно

$$\mathcal{V} \frac{4\pi k^2 dk}{(2\pi)^3}. \quad (5.1)$$

Перейдем от волнового вектора k к фононной частоте Ω . Для продольных акустических колебаний имеем $\Omega_{at} = v_l k$, в то время как для поперечных $\Omega_{at} = v_t k$. Отсюда получается следующее выражение для плотности фононных состояний:

$$\gamma \frac{3}{2\pi^2} \frac{\Omega^2 d\Omega}{\bar{v}^3}, \quad (5.2)$$

где \bar{v} — средняя скорость звука, равная по определению

$$\frac{3}{\bar{v}^3} = \frac{1}{v_l^3} + \frac{2}{v_t^3}. \quad (5.3)$$

Формула (5.2) для плотности фононных состояний в области низких частот пригодна и для упруго анизотропных кристаллов, только величину \bar{v} , фигурирующую в этой формуле, теперь следует понимать иначе. Фазовая скорость звука в кристалле зависит как от номера акустической ветви a , так и от направления распространения звука $\kappa = k/k$. Закон усреднения величины \bar{v} , фигурирующей в формуле (5.2), должен в этом случае иметь вид (do — элемент телесного угла)

$$\frac{3}{\bar{v}^3} = \sum_a \int \frac{do}{4\pi} \frac{1}{v_a^3(\kappa)}. \quad (5.4)$$

Для изотропного спектра эта формула переходит в (5.3).

Дебаевская модель спектра основана на предположении, что описанная выше форма спектра, выражение (5.2) для плотности фононных состояний и направления фононных векторов поляризации сохраняются во всем частотном интервале вплоть до некоторой максимальной частоты Ω_D . Эта последняя определяется из условия, чтобы полное число колебательных степеней свободы во всем частотном интервале вплоть до Ω_D было бы равно $3Ns$:

$$\gamma \int_0^{\Omega_D} \frac{3\Omega^2 d\Omega}{2\pi^2 \bar{v}^3} = 3Ns, \quad (5.5)$$

откуда, вводя объем элементарной ячейки \mathcal{V} , получаем

$$\Omega_D = \bar{v} \left(\frac{6\pi^2 s}{\mathcal{V}} \right)^{1/3}. \quad (5.6)$$

Вместо предельной частоты Ω_D в теорию обычно вводят

дебаевскую температуру Θ с помощью соотношения

$$\Theta = \hbar \Omega_D. \quad (5.7)$$

Величина Θ имеет размерность энергии; температуру в нашей книге мы будем измерять в энергетических единицах¹⁾.

В итоге можно сказать, что при малых (по сравнению с Θ) фононных энергиях $\hbar \Omega$ дебаевская модель правильно отражает то обстоятельство, что имеются только три акустические колебательные ветви. При больших же энергиях фононов ($\hbar \Omega$ порядка Θ), когда, помимо акустических ветвей, имеются также и оптические (при $s > 1$), модель опять-таки правильно учитывает как общее число колебательных степеней свободы ($3sN$), так и то, что частоты почти всех возбужденных фононов имеют порядок Ω_D .

В дальнейшем при анализе различных кинетических явлений нам понадобятся выражения для термодинамических функций системы фононов в гармоническом приближении. Ниже мы приведем эти выражения — как через точные законы дисперсии фононов $\Omega_j(k)$, так и в дебаевском приближении.

Плотность свободной энергии фононной системы следующим образом выражается через равновесную функцию распределения фононов $N_0 = [\exp(\hbar \Omega/T) - 1]^{-1}$ ²⁾:

$$F = U_0 - T \sum_j \int \frac{dk}{(2\pi)^3} \ln(N_0 + 1),$$

где T — температура (как уже указывалось — в энергетических единицах), а посредством U_0 обозначена плотность энергии при $T = 0$, которая может зависеть от объема или, в общем случае, от деформации.

Поскольку интегралы и суммы такого вида будут встречаться нам очень часто, мы введем для них

¹⁾ В обычных единицах $\Theta = \hbar \Omega_D/k$, где k — постоянная Больцмана.

²⁾ См., например, Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Статистическая физика. — М.: Наука, 1976, с. 215; Кубо Р. Статистическая механика. — М.: Мир, 1967, с. 261.

следующее сокращенное обозначение¹⁾:

$$\sum_j \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \equiv \int d\xi_k. \quad (5.8)$$

С помощью него выражение для F переписывается так:

$$F = U_0 - T \int d\xi_k \ln(N_0 + 1). \quad (5.9)$$

Плотность энтропии S вычисляется по известной формуле термодинамики

$$S = -\partial F/\partial T.$$

Удельная теплоемкость C при постоянном объеме (или при постоянной деформации)

$$C = T \frac{\partial S}{\partial T}. \quad (5.10)$$

Вычисляя производную, получаем следующее явное выражение:

$$C = \int d\xi_k \left(\frac{\hbar\Omega}{T}\right)^2 N_0(N_0 + 1). \quad (5.11)$$

Плотность внутренней энергии системы

$$U = F + TS$$

равна

$$U = U_0 + \int d\xi_k \hbar\Omega N_0. \quad (5.12)$$

Для дебаевской модели спектра мы, переходя к интегрированию по частотам с помощью формулы (5.2), получаем

$$F = U_0 + \frac{3T}{2\pi^2 v^3} \int_0^{\Omega_D} \ln(1 - e^{-\hbar\Omega/T}) \Omega^2 d\Omega. \quad (5.13)$$

Остановимся сначала на случае низких температур $T \ll \Theta$, когда подынтегральное выражение в (5.13) экспоненциально убывает при больших частотах Ω , так что

¹⁾ Соответственно, об операции суммирования по j и интегрирования по $d^3k/(2\pi)^3$ мы для краткости будем говорить как об интегрировании по $d\xi_k$.

верхний предел интегрирования можно заменить бесконечностью. В этом случае

$$F = U_0 - \frac{\pi^2 T^4}{30 (\hbar v)^3}. \quad (5.14)$$

Плотность энтропии фоновой системы

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T} = \frac{2\pi^2 T^3}{15 (\hbar v)^3}. \quad (5.15)$$

Плотность внутренней энергии твердого тела

$$U = U_0 + \frac{\pi^2 T^4}{10 (\hbar v)^3}. \quad (5.16)$$

Наконец, удельная теплоемкость

$$C = T \frac{\partial S}{\partial T} = 3S, \quad (5.17)$$

или

$$C = \frac{2\pi^2 T^3}{5 (\hbar v)^3}. \quad (5.18)$$

Подчеркнем, что выражения типа (5.18) при низких температурах получаются без каких-либо модельных предположений относительно фононного спектра, если величину v^{-3} определить с помощью соотношения (5.4).

Для расчета теплоемкости при высоких температурах ($T \gg \Theta$) можно воспользоваться непосредственно выражением (5.11). Полагая

$$N = T/\hbar\Omega \gg 1,$$

мы получаем

$$C = \int d\xi_k = \sum_j \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}. \quad (5.19)$$

Интегрирование здесь производится по объему ячейки обратной решетки, который, как мы видели, равен $(2\pi)^3/v$; следовательно, интеграл равен $1/v$. Поскольку число колебательных ветвей j равно $3s$, мы получаем отсюда обобщенный закон Дюлонга и Пти

$$C = 3sn, \quad (5.20)$$

где $n = 1/v$ — число элементарных ячеек в единице объема кристалла.

§ 6. Решеточный ангармонизм и фонон-фононное взаимодействие. Кинетическое уравнение для фононов

Главный член в разложении потенциальной энергии решетки по степеням смещений атомов $R_{n\gamma}$ — это гармоническое слагаемое \mathcal{U}_2 . Оно определяет динамику решетки и закон дисперсии фононов $\Omega_j(\mathbf{k})$. Ангармонические слагаемые $\mathcal{U}_3, \mathcal{U}_4, \dots$ — малые поправки к \mathcal{U}_2 , которыми при анализе динамики решетки и расчете законов дисперсии мы пренебрегаем. Однако они ответственны за качественно новое явление — взаимодействие фононов, отсутствующее в гармоническом приближении. Цель настоящего раздела — учесть влияние взаимодействия на фононную функцию распределения и вывести уравнение для этой функции.

При учете ангармонизма отдельные фононные состояния уже не стационарны; между ними происходят квантовые переходы. В результате каждого перехода меняются числа заполнения у нескольких фононных состояний. Из-за малости ангармонизма переходы происходят редко (по сравнению с характерными периодами колебаний решетки). В промежутках между переходами фононы ведут себя как свободные частицы, движение которых описывается уравнениями (4.11).

Тут легко усмотреть аналогию с почти идеальным газом обычных частиц, которые изредка сталкиваются друг с другом, а в промежутках между столкновениями движутся свободно. Поэтому квантовые переходы, обусловленные взаимодействием фононов, называют также фонон-фононными столкновениями. Особенностью фононных систем является то, что при столкновениях число фононов, вообще говоря, не сохраняется — они могут рождаться и уничтожаться.

При учете столкновений уравнение (4.13) уже не имеет места: полную производную $d\langle N_{\mathbf{k}j} \rangle / dt$ теперь следует приравнять изменению функции распределения вследствие столкновений, $[d\langle N_{\mathbf{k}j} \rangle / dt]_{\text{ст}}$. В итоге получится следующее уравнение:

$$\frac{\partial N}{\partial t} + \frac{\partial \Omega}{\partial \mathbf{k}} \frac{\partial N}{\partial \mathbf{r}} - \frac{\partial \Omega}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial N}{\partial \mathbf{k}} = \left[\frac{\partial N}{\partial t} \right]_{\text{ст}}. \quad (6.4)$$

Уравнение (6.1) называется *кинетическим уравнением* для фононов, а его правая часть носит название *столкновительного члена* кинетического уравнения¹⁾.

Условие применимости уравнения включает неравенство

$$\Omega \tau \gg 1, \quad (6.2)$$

где τ — характерное время между двумя столкновениями фонона. Это условие того, чтобы за время τ движение фононов можно было бы рассматривать как свободное, т. е. чтобы τ было велико по сравнению с характерными периодами колебаний решетки $1/\Omega$.

Вычисление правой части кинетического уравнения (6.1) начнем с анализа вклада от кубического ангармонического члена

$$\mathcal{U}_3 = \frac{1}{6} \sum_{n_1 n_2 n_3} \sum_{\gamma_1 \gamma_2 \gamma_3} B_{\gamma_1 \gamma_2 \gamma_3}^{n_1 n_2 n_3} R_{n_1 \gamma_1} R_{n_2 \gamma_2} R_{n_3 \gamma_3}. \quad (6.3)$$

Величины $B_{\gamma_1 \gamma_2 \gamma_3}^{n_1 n_2 n_3}$ мы будем называть *ангармоническими силовыми постоянными* третьего порядка. В силу трансляционной симметрии решетки они зависят только от разностей $n_2 - n_1$ и $n_3 - n_1$ и обычно достаточно быстро убывают с ростом этих разностей.

Чтобы рассчитать квантовомеханические вероятности фонон-фононных столкновений, выразим (6.3) через операторы рождения и уничтожения фононов. Подставляя в (6.3) разложение (3.22) величин $R_{n\gamma}$, получаем

$$\begin{aligned} \mathcal{U}_3 = & \frac{\rho \mathcal{V}^3}{6} \left(\frac{\hbar}{2\rho \mathcal{V}} \right)^{3/2} \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_3} \sum_{j_1 j_2 j_3} b_{j_1 j_2 j_3}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3) \times \\ & \times \frac{1}{\sqrt{\Omega_{\mathbf{k}_1 j_1} \Omega_{\mathbf{k}_2 j_2} \Omega_{\mathbf{k}_3 j_3}}} (\hat{c}_{\mathbf{k}_1 j_1} + \hat{c}_{-\mathbf{k}_1 j_1}^\dagger) (\hat{c}_{\mathbf{k}_2 j_2} + \hat{c}_{-\mathbf{k}_2 j_2}^\dagger) \times \\ & \times (\hat{c}_{\mathbf{k}_3 j_3} + \hat{c}_{-\mathbf{k}_3 j_3}^\dagger), \quad (6.4) \end{aligned}$$

¹⁾ Представление о столкновениях фононов было введено Пайерльсом (R. Peierls, 1929). Кинетическое уравнение в форме (6.1) было впервые применено для описания неравновесного состояния системы фононов А. И. Ахизером (1938).

$$b_{j_1 j_2 j_3}(k_1, k_2, k_3) = \frac{1}{\rho \mathcal{V}} \sum_{n_1 n_2 n_3} \sum_{\nu_1 \nu_2 \nu_3} B_{\nu_1 \nu_2 \nu_3}^{n_1 n_2 n_3} e_{\nu_1}(k_1, j_1) \times \\ \times e_{\nu_2}(k_2, j_2) e_{\nu_3}(k_3, j_3) \exp [i(k_1 a_{n_1} + k_2 a_{n_2} + k_3 a_{n_3})]. \quad (6.5)$$

Величины $b_{j_1 j_2 j_3}$ мы будем называть *ангармоническими коэффициентами* третьего порядка. Множитель $1/MN = 1/\rho \mathcal{V}$ введен ради удобства; определенные таким образом коэффициенты $b_{j_1 j_2 j_3}$ от объема не зависят.

Из трансляционной симметрии кристалла вытекает важное свойство коэффициентов $b_{j_1 j_2 j_3}$. Выражение (6.5) не должно измениться при трансляции на любой вектор решетки a_n , т. е. при замене $a_{n_i} \rightarrow a_{n_i} + a_n$. С другой стороны, ангармонический коэффициент $b_{j_1 j_2 j_3}(k_1, k_2, k_3)$ при этом приобретает множитель $\exp [i(k_1 + k_2 + k_3) a_n]$. Этот множитель, следовательно, должен быть равен единице. Отсюда

$$k_1 + k_2 + k_3 = b, \quad (6.6)$$

где b — произвольный вектор обратной решетки. Таким образом, ангармонические коэффициенты (6.5) зависят только от двух векторов из тройки k_1, k_2, k_3 . Третий же вектор определяется соотношением (6.6). Если принять для волновых векторов условие (1.20), то векторы k_1 и k_2 должны лежать в основной ячейке обратной решетки. Тогда вектор b однозначно определится условием, чтобы и вектор k_3 также находился в основной ячейке обратной решетки.

Из определения (6.5) и соотношения (1.16) вытекает следующее свойство ангармонических коэффициентов:

$$b_{j_1 j_2 j_3}(-k_1, -k_2, -k_3) = b_{j_1 j_2 j_3}^*(k_1, k_2, k_3). \quad (6.7)$$

Получим порядковую оценку для $b_{j_1 j_2 j_3}(k_1, k_2, k_3)$. При смещениях атомов на величину порядка среднего межатомного расстояния a ангармоническая энергия в расчете на один атом должна быть порядка характерной атомной энергии \mathcal{E}_a , составляющей обычно несколько электронвольт. Соответственно, ангармонические постоянные оказываются равны по порядку величины

$$|B_{\nu_1 \nu_2 \nu_3}^{n_1 n_2 n_3}| \simeq \mathcal{E}_a / a^3. \quad (6.8)$$

Эта оценка справедлива, разумеется, если разности $|n_1 - n_2|$ и $|n_1 - n_3|$ малы (порядка единицы).

Энергию \mathcal{E}_a в такого рода оценках можно выразить через величины, непосредственно характеризующие кристаллическую решетку. В гармоническом приближении плотность упругой энергии решетки есть $\frac{1}{2} \lambda_{ilmn} u_{il} u_{mn}$. Это выражение сохраняет смысл порядковой оценки и если тензор деформации u_{il} становится порядка единицы. Поскольку при этом межатомные расстояния меняются на величину порядка их самих, на один атом приходится энергия порядка \mathcal{E}_a . Но модули упругости λ_{ilmn} порядка $\rho \bar{v}^2$. Таким образом, с одной стороны для плотности упругой энергии получается оценка $\rho \bar{v}^2$, а с другой — $n s \mathcal{E}_a$ (n — число элементарных ячеек в единице объема). Сравнивая оба выражения, находим, что

$$\mathcal{E}_a \simeq \bar{M} \bar{v}^2, \quad (6.9)$$

где $\bar{M} = M/s$ — средняя масса атомов решетки.

Чтобы оценить сумму (6.5), перейдем от суммирования по n_1, n_2, n_3 к суммированию по n_1 и двум разностям, $n_1 - n_2$ и $n_1 - n_3$. Соответственно, экспоненту в (6.5) преобразуем с учетом (6.6)

$$\exp [i(k_1 a_{n_1} + k_2 a_{n_2} + k_3 a_{n_3})] = \exp [i k_2 (a_{n_2} - a_{n_1}) + \\ + i k_3 (a_{n_3} - a_{n_1}) + i(k_1 + k_2 + k_3) a_{n_1}] = \\ = \exp [i(k_2 a_{n_2 - n_1} + k_3 a_{n_3 - n_1})].$$

Теперь суммирование по n_1 в (6.5) сразу выполняется и дает множитель $N = \rho \mathcal{V} / M$.

Оценку оставшейся суммы по $n_1 - n_2, n_1 - n_3$ и p_1, p_2, p_3 начнем со случая неполярных кристаллов, где силы взаимодействия между атомами быстро спадают с расстоянием, а значит, ангармонические постоянные $B_{\nu_1 \nu_2 \nu_3}^{n_1 n_2 n_3}$ с увеличением межатомного расстояния резко убывают по абсолютной величине. Поскольку, таким образом, взаимодействуют лишь атомы, являющиеся достаточно близкими соседями, число слагаемых, дающих вклад в сумму, при $s \simeq 1$ оказывается порядка единицы,

и мы приходим к оценке ¹⁾

$$|b_{j_1 j_2 j_3}(k_1, k_2, k_3)| \simeq \frac{\mathcal{E}_a}{M a^3} \simeq \frac{\bar{v}^2}{a^3}. \quad (6.10)$$

Проведение такой оценки требует несколько большей аккуратности для полярных кристаллов. В этих кристаллах колебания решетки представляют собой движение не нейтральных атомов, а ионов; силы взаимодействия между ними, наряду с быстроспадающей составляющей (ближдействующие силы), содержат также и составляющую, спадающую с расстоянием медленно (дальнейшие силы). Чтобы оценить вклад этой составляющей в ангармонические коэффициенты, заметим, что в случае коротких волн (волновые векторы всех трех фононов порядка a^{-1}) слагаемые под знаком сумм по $n_2 - n_1$ и $n_3 - n_1$ знакопеременны (из-за быстро осциллирующих экспоненциальных множителей), так что оценка каждой суммы по порядку величины дается первым слагаемым, соответствующим $n_2 = n_1$ (и $n_3 = n_1$). Это значит, что оценка (6.10) сохраняет силу. Оценка сохраняет силу и в том случае, если один из фононов (k, j) — так мы будем сокращенно обозначать фонон с волновым вектором k , принадлежащий колебательной ветви j — длинноволновый, оптический. Доказательство этого будет дано в § 20. Оно может быть легко обобщено на случай, когда длинноволновыми оптическими являются два или все три фонона, характеристики которых фигурируют в левой части (6.10).

Однако оценка (6.10) становится непригодной, если одна из ветвей (например, j_1) — акустическая, причем соответствующий волновой вектор k_1 мал по сравнению с a^{-1} . В пределе, при $k_1 \rightarrow 0$ акустические колебания переходят в трансляцию (параллельный перенос решетки как целого). Такое движение не может изменить энергии системы, и потому при малых k_1 ангармоническая энергия должна зависеть не от самого смещения, а от его пространственных производных. В этом случае ангармонические коэффициенты $b_{a j_2 j_3}(k_1, k_2, k_3)$ должны быть

¹⁾ Везде далее мы будем приводить оценки для случая, когда s порядка единицы.

Отметим во избежание недоразумений, что грубые оценки такого типа не могут дать зависимости коэффициентов $b_{j_1 j_2 j_3}(k_1, k_2, k_3)$ от числа ближайших соседей атома решетки.

пропорциональны k_1 , а оценка (6.10) переходит в

$$|b_{a j_2 j_3}(k_1, k_2, k_3)| \simeq k_1 \bar{a} \frac{\bar{v}^2}{a^3}. \quad (6.11)$$

Аналогичным образом, если во взаимодействии участвуют соответственно два или три длинноволновых акустических фонона, то порядковые оценки ангармонических коэффициентов таковы:

$$|b_{a_1 a_2 j_3}(k_1, k_2, k_3)| \simeq k_1 k_2 \bar{a}^2 \frac{\bar{v}^2}{a^3}, \quad (6.12)$$

$$|b_{a_1 a_2 a_3}(k_1, k_2, k_3)| \simeq k_1 k_2 |k_1 + k_2| \bar{v}^2 \simeq \Omega_{a_1}(k_1) \Omega_{a_2}(k_2) \Omega_{a_3}(k_1 + k_2) / \bar{v}. \quad (6.13)$$

Выясним, в каких переходах, обусловленных ангармоническим взаимодействием (6.4), может участвовать фонон (k, j) и какова их вероятность. Во-первых, возможен процесс слияния, когда фонон (k, j) сталкивается с фононом (k', j') и образуется фонон (k'', j''), где волновой вектор k'' принадлежит основной ячейке обратной решетки и определяется из условия

$$k + k' = k'' + b.$$

За этот процесс ответственно слагаемое в операторе \mathcal{U}_3 :

$$\rho \mathcal{U}^3 \left(\frac{\hbar}{2\rho \mathcal{V}} \right)^{3/2} b_{j j' j''}(k, k', -k'') \frac{1}{\sqrt{\Omega \Omega' \Omega''}} \hat{c} \hat{c}' \hat{c}''^\dagger. \quad (6.14)$$

Здесь мы ввели сокращенные обозначения

$$\Omega = \Omega_{kj}, \quad \Omega' = \Omega_{k'j'}, \quad \Omega'' = \Omega_{k''j''}$$

и аналогично для операторов рождения и уничтожений. Такого рода обозначениями мы будем часто пользоваться и впредь.

Численный коэффициент в (6.14) определяется следующим образом. Имеется три способа выбрать слагаемое с оператором $\hat{c}_{k''j''}^\dagger$: оно присутствует в суммах по k_1, k_2 и k_3 . Это даст множитель 3¹⁾. После этого оста-

¹⁾ Поскольку, как явствует из определения (6.5), коэффициенты $b_{j_1 j_2 j_3}(k_1, k_2, k_3)$ симметричны относительно перестановки пар аргументов k_i, j_i .

ются еще два способа выбрать члены с операторами \hat{c}_{kj} и $\hat{c}_{k'j'}$ из двух других сумм. В итоге возникает множитель 6, сокращающийся с 1/6, фигурирующей в (6.4).

Нам требуется вычислить отнесенную к единице времени вероятность следующего перехода:

Начальное состояние	Конечное состояние
N фононов (k, j)	$N - 1$ фононов (k, j)
N' фононов (k', j')	$N' - 1$ фононов (k', j')
N'' фононов (k'', j'')	$N'' + 1$ фононов (k'', j'')

Согласно квантовомеханической теории возмущений, эта вероятность равна произведению $2\pi/\hbar$ на квадрат модуля матричного элемента оператора энергии возмущения и на δ -функцию от разности энергий начального и конечного состояний:

$$W(N, N', N'' \rightarrow N - 1, N' - 1, N'' + 1) = \frac{1}{\mathcal{V}^3} \beta_{jj'j''}(k, k', -k'') \delta(\Omega + \Omega' - \Omega'') NN'(N'' + 1). \quad (6.15)$$

Вычисляя аналогичным образом вероятность обратного процесса, при котором число фононов N увеличивается на единицу, получаем с учетом (6.6):

$$W(N, N', N'' \rightarrow N + 1, N' + 1, N'' - 1) = \frac{1}{\mathcal{V}^3} \beta_{jj'j''}(k, k', -k'') \delta(\Omega + \Omega' - \Omega'') (N + 1)(N' + 1)N''. \quad (6.16)$$

Здесь введено сокращенное обозначение, которым часто придется пользоваться в дальнейшем

$$\beta_{jj'j''}(k, k', k'') = \frac{\pi\hbar}{4\rho\Omega\Omega'\Omega''} |b_{jj'j''}(k, k', k'')|^2. \quad (6.17)$$

Во-вторых, возможен процесс распада, когда фонон (k, j) распадается на фонон (k', j') и фонон (k'', j''), причем волновой вектор k'' определяется из условия:

$$k'' = k - k' + b.$$

За этот процесс ответственно слагаемое в операторе ан-

гармонической энергии:

$$\rho\mathcal{V}^3 \left(\frac{\hbar}{2\rho\mathcal{V}^3}\right)^{3/2} b_{j'j''j}(k', k'', -k) \frac{1}{\sqrt{\Omega\Omega'\Omega''}} \hat{c}^\dagger \hat{c}''^\dagger \hat{c}. \quad (6.18)$$

Требуется, таким образом, вычислить вероятность (в единицу времени) следующего перехода:

Начальное состояние	Конечное состояние
N фононов (k, j)	$N - 1$ фононов (k, j)
N' фононов (k', j')	$N' + 1$ фононов (k', j')
N'' фононов (k'', j'')	$N'' + 1$ фононов (k'', j'')

Имеем

$$W(N, N', N'' \rightarrow N - 1, N' + 1, N'' + 1) = \frac{1}{\mathcal{V}^3} \beta_{j'j''j}(k', k'', -k) \delta(\Omega - \Omega' - \Omega'') N(N' + 1)(N'' + 1). \quad (6.19)$$

Вероятность обратного процесса с увеличением N на единицу есть

$$W(N, N', N'' \rightarrow N + 1, N' - 1, N'' - 1) = \frac{1}{\mathcal{V}^3} \beta_{j'j''j}(k', k'', -k) \delta(\Omega - \Omega' - \Omega'') (N + 1)N'N''. \quad (6.20)$$

Подсчитаем скорость изменения фононной функции распределения $[\partial \langle N_{kj} \rangle / \partial t]_{ст}$. Собирая выражения (6.15), (6.16), (6.19) и (6.20), мы получаем

$$\left[\frac{\partial \langle N_{kj} \rangle}{\partial t} \right]_{ст} = \int d\xi_k \left[\sum_{j''} \beta_{jj'j''}(k, k', -k'') \times \langle N''(N' + 1)(N + 1) - (N'' + 1)NN' \rangle \delta(\Omega'' - \Omega - \Omega') + \frac{1}{2} \sum_{j''} \beta_{j'j''j}(k', k'', -k) \langle (N + 1)N'N'' - N(N' + 1)(N'' + 1) \rangle \delta(\Omega - \Omega' - \Omega'') \right]. \quad (6.21)$$

Мы ввели во втором слагаемом коэффициент 1/2, чтобы не учитывать один и тот же процесс дважды.

В правой части (6.21) фигурируют средние вида $\langle NN' \rangle$, $\langle NN'' \rangle$, $\langle N'N'' \rangle$ и т. п. При вычислении этих

средних мы будем пользоваться соотношением

$$\langle N_1 N_2 \rangle = \langle N_1 \rangle \langle N_2 \rangle, \quad (6.22)$$

где (k_1, j_1) и (k_2, j_2) — два каких-то различных колебательных состояния, которые здесь для краткости обозначаются просто 1 и 2. Соотношение (6.22) означает, что между числами заполнения отдельных колебательных состояний отсутствует корреляция.

В процессах фонон-фононных столкновений такая корреляция должна, однако, возникать. Это значит, что если 2 фононных волновых пакета, 1 и 2, столкнулись друг с другом и короткое время спустя столкнулись вновь, то при втором столкновении соответствующие числа заполнения уже нельзя считать независимыми и нельзя выполнять усреднение, согласно (6.22)¹⁾.

Однако, если между двумя столкновениями протекает достаточно большое время τ , то вероятность повторного столкновения тех же самых волновых пакетов весьма мала. Гораздо вероятнее, что волновые пакеты 1 и 2, испытав столкновение друг с другом, затем будут взаимодействовать с другими волновыми пакетами, а это взаимодействие должно разрушить корреляцию, возникшую между состояниями 1 и 2. Поэтому, выполняя усреднение, мы считаем числа заполнения в этих состояниях некоррелированными.

Чтобы выяснить, когда мала погрешность, допускаемая при таком усреднении, заметим, что за среднее время между двумя столкновениями фононный волновой пакет проходит путь порядка $g\tau$. Если число различных колебательных состояний, т. е. число фононных волновых пакетов в объеме с линейными размерами $g\tau$, велико, то вероятность повторного столкновения обратно пропорциональна этому числу. Предположим, что возбуждены все колебательные состояния со значениями k вплоть до некоторого k_M . Тогда число различных колебательных состояний в объеме с линейными размерами $g\tau$ равно по порядку величины $(g\tau)^3 k_M^3$. Условие же применимости правила усреднения (6.22) есть требование, чтобы это

¹⁾ Фактически число сталкивающихся фононов не меньше трех, так что столкновение создает корреляцию по меньшей мере между тремя колебательными состояниями.

число было много больше единицы, т. е. чтобы выполнялось неравенство

$$k_M g \tau \gg 1. \quad (6.23)$$

Это неравенство имеет наглядный физический смысл: длина пробега фононных волновых пакетов между двумя столкновениями, $g\tau$, должна быть гораздо больше длины волны фононов¹⁾. Ниже мы убедимся, что в конкретных случаях, с которыми нам придется иметь дело, это неравенство выполняется с достаточно большим запасом.

Производя усреднение, согласно (6.22), получим окончательно (опуская угловые скобки — символ усреднения):

$$\begin{aligned} \left[\frac{\partial N}{\partial t} \right]_{\text{ст}} = & \int d\xi_{k'} \left\{ \sum_{j''} \beta_{jj''} \langle k, k', -k'' \rangle \times \right. \\ & \times [N'' (N' + 1) (N + 1) - (N'' + 1) N N'] \delta(\Omega'' - \Omega - \Omega') + \\ & + \frac{1}{2} \sum_{j'''} \beta_{jj'''} \langle k', k''', -k \rangle [(N + 1) N' N''' - \\ & \left. - N (N' + 1) (N''' + 1)] \delta(\Omega - \Omega' - \Omega''') \right\}. \quad (6.24) \end{aligned}$$

Сделаем одно замечание. В наших рассуждениях фигурировало понятие фононных волновых пакетов. Однако при выводе (6.24) мы не использовали его явно, а рассматривали фононы как плоские волны. Это допустимо, если характерные размеры области пространства L_c , где фононная функция распределения испытывает заметные изменения (так называемый *размер неоднородности*), намного превышают характерную фононную длину волны k_M^{-1} . Соответствующее неравенство

$$k_M L_c \gg 1 \quad (6.25)$$

является, таким образом, еще одним условием применимости кинетического уравнения. Наконец, для полноты вышшем и полученное в § 4 условие

$$\omega \ll \Omega \quad (6.26)$$

на характерные частоты ω изменения внешнего поля.

¹⁾ Такого рода неравенство необходимо не только для того, чтобы выполнялось соотношение (6.22). Оно, наряду с неравенством (6.2), требуется вообще для того, чтобы было справедливо исходное уравнение (6.1) с левой частью, в которой фигурируют функции Ω_{kj} и N_{kj} , характеризуемые волновым вектором k .

Переходим к изучению свойств оператора столкновений (6.24). Равновесная функция Планка

$$N_0(\Omega) = n_0(\hbar\Omega/T), \quad (6.27)$$

где $n_0(x) = (e^x - 1)^{-1}$, обращает его в нуль, как и должно быть. Чтобы убедиться в этом непосредственно, рассмотрим первый член в квадратных скобках в (6.24). Используя явное выражение (6.27), переписываем этот член в виде

$$N_0''(N_0' + 1)(N_0 + 1) \left[1 - \exp\left(\hbar \frac{\Omega'' - \Omega - \Omega'}{T}\right) \right]. \quad (6.28)$$

Последний множитель здесь обращается в нуль с учетом δ -функции, выражающей закон сохранения энергии. Аналогичным образом убеждаемся и в том, что второй член в квадратных скобках в (6.24) также обращается в нуль функцией (6.27).

Рассмотрим подробнее вопрос о законах сохранения квазиволнового вектора при фонон-фононных столкновениях. С этой точки зрения все столкновения делятся на два типа. К первому относятся такие столкновения, когда вектор \mathbf{b} в соотношении (6.6) равен нулю. В этом случае суммарный волновой вектор фононов до и после столкновения сохраняется, т. е. величину $\hbar\mathbf{k}$ фононов, участвующих в таком столкновении, можно рассматривать как обычный импульс. По этой причине такие столкновения называются нормальными процессами (сокращенно N -процессы).

Ко второму типу относятся такие столкновения, когда вектор \mathbf{b} в соотношениях (6.6) отличен от нуля. Они получили название процессов переброса (R. Peierls, 1929), сокращенно U -процессы (от немецкого Umklappprozesse).

Из трех фононов, участвующих в N -процессе, все могут быть как коротковолновыми (т. е. с длиной волны порядка постоянной решетки), так и длинноволновыми. Наоборот, по меньшей мере два фонона из трех, участвующих в U -процессе, должны быть коротковолновыми (из них один в начальном состоянии, а другой — в конечном); третий же может быть как коротко-, так и длинноволновым. В этом последнем случае, как легко видеть, направление волнового вектора коротковолнового фонона изменяется в результате столкновения почти на противоположное, отсюда и название «процессы переброса».

Обсудим, что дают ангармонические члены более высокого порядка в разложении потенциальной энергии решетки. Член четвертого порядка имеет вид

$$\mathcal{U}_4 = \frac{1}{24} \sum_{n_1 n_2 n_3 n_4} \sum_{\nu_1 \nu_2 \nu_3 \nu_4} B_{\nu_1 \nu_2 \nu_3 \nu_4}^{n_1 n_2 n_3 n_4} R_{n_1 \nu_1} R_{n_2 \nu_2} R_{n_3 \nu_3} R_{n_4 \nu_4}, \quad (6.29)$$

где $B_{\nu_1 \nu_2 \nu_3 \nu_4}^{n_1 n_2 n_3 n_4}$ — ангармонические силовые постоянные четвертого порядка. Для этих величин легко получить оценку, аналогичную (6.8):

$$\left| B_{\nu_1 \nu_2 \nu_3 \nu_4}^{n_1 n_2 n_3 n_4} \right| \simeq \mathcal{E} a / \bar{a}^4, \quad (6.30)$$

которая справедлива, если все разности $|n_i - n_j|$ ($i, j = 1, 2, 3, 4$) порядка единицы.

Энергию (6.29) можно, так же как и (6.3), выразить через операторы рождения и уничтожения фононов. По аналогии с (6.5) нужно ввести ангармонические коэффициенты четвертого порядка $b_{j_1 j_2 j_3 j_4}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4)$. Они отличны от нуля, только если квазиволновые векторы \mathbf{k}_i удовлетворяют соотношению, аналогичному (6.6):

$$\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4 = \mathbf{b}. \quad (6.31)$$

Для них можно получить оценку:

$$\left| b_{j_1 j_2 j_3 j_4}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4) \right| \simeq \frac{\bar{v}^2}{a^4}, \quad (6.32)$$

которая имеет место, если все четыре фононные частоты $\Omega_{j_i}(\mathbf{k}_i)$ порядка предельной. Если же одна или несколько из частот принадлежат к длинноволновым акустическим ветвям, то в правой части (6.32) нужно дописать соответствующее число множителей $k_i a$.

Ангармоническое слагаемое четвертого порядка (6.29) обуславливает появление в операторе столкновений кинетического уравнения членов, описывающих *четырефононные столкновения*. Вероятность их, как мы убедимся ниже, меньше вероятности трехфононных столкновений. Иногда, однако, может возникнуть необходимость в их учете — например, если трехфононные процессы в существенной области значений \mathbf{k}_1 запрещены, т. е. если аргументы δ -функций в (6.24) не обращаются в нуль.

Мы не будем выписывать четырехфононного оператора столкновений в явном виде. Укажем только, что он описывает процессы двойного типа: 1) переходы типа $1 \rightleftharpoons 3$, когда один фонон распадается на три или же наоборот, три фонона, сливаясь, образуют один; 2) переходы типа $2 \rightarrow 2$: два фонона, сталкиваясь, образуют два других. Оба типа процессов, в свою очередь, подразделяются на нормальные (когда вектор \mathbf{b} в (6.31) равен нулю) и процессы переброса (вектор \mathbf{b} отличен от нуля).

Оценки ангармонических силовых постоянных и ангармонических коэффициентов более высокого порядка получаются аналогичным образом.

Нужно еще обсудить следующие два важных вопроса: 1) Какой малый параметр обеспечивает возможность применять теорию возмущений для расчета вероятностей фонон-фононных столкновений? 2) Какой параметр позволяет при расчете оператора столкновений ограничиться учетом кубического ангармонизма, отбросив ангармонические слагаемые высшего порядка?

Ответы на оба вопроса получаем, сравнивая ангармоническую энергию третьего порядка (6.3) с гармонической энергией (1.2) и ангармоническую энергию четвертого порядка (6.29) с энергией (6.3). Для этого замечаем, что когда смещения атомов решетки R_{nj} имеют порядок среднего межатомного расстояния \bar{a} , потенциальные энергии $\mathcal{U}_2, \mathcal{U}_3, \mathcal{U}_4, \dots$ должны быть одного порядка — порядка \mathcal{E}_a в расчете на один атом. Значит, параметр, позволяющий рассматривать решеточный ангармонизм как малое возмущение, есть R/\bar{a} , где R — характерное значение смещения атомов, участвующих в колебаниях решетки.

Чтобы оценить этот параметр, вычислим отношение среднеквадратичного смещения некоторого атома решетки, $\langle R_{np}^2 \rangle$, к квадрату среднего межатомного расстояния. Требование его малости и даст условие применимости теории возмущений при расчете столкновений и возможности ограничиться учетом кубического ангармонизма. Воспользовавшись (3.22), мы находим

$$\langle R_{np}^2 \rangle = \frac{\hbar}{2\rho V} \sum_{kk'} \sum_{jj'} \frac{1}{\sqrt{\Omega\Omega'}} e_p(\mathbf{k}, j) e_p^*(\mathbf{k}', j') \times \\ \times \exp[i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{a}_n] \langle (\hat{c}_{\mathbf{k}j} + \hat{c}_{-\mathbf{k}j}^\dagger)(\hat{c}_{-\mathbf{k}'j'} + \hat{c}_{\mathbf{k}'j'}^\dagger) \rangle.$$

Вычисляя среднее от произведения операторов с помощью соотношений (см. § 4)

$$\langle \hat{c}_{\mathbf{k}'j'}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}j} \rangle = N_{\mathbf{k}j} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{jj'}, \quad \langle \hat{c}_{\mathbf{k}j}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}'j'}^\dagger \rangle = \langle \hat{c}_{\mathbf{k}j} \hat{c}_{\mathbf{k}'j'} \rangle = 0$$

и переходя от суммирования по \mathbf{k} к интегрированию, мы получаем

$$\langle R_{np}^2 \rangle = \langle R_{np}'^2 \rangle + \langle R_{np}''^2 \rangle, \quad (6.33)$$

где

$$\langle R_{np}'^2 \rangle = \frac{\hbar}{\rho} \int d\xi_{\mathbf{k}} \frac{N}{\Omega} |e_p(\mathbf{k}, j)|^2, \quad (6.33a)$$

$$\langle R_{np}''^2 \rangle = \frac{\hbar}{2\rho} \int d\xi_{\mathbf{k}} \frac{1}{\Omega} |e_p(\mathbf{k}, j)|^2. \quad (6.33b)$$

Выражение (6.33) представляет собой, таким образом, сумму двух слагаемых. Первое из них обращается в нуль при $N_{\mathbf{k}j} = 0$, т. е. если фононы не возбуждены. Второе вообще не зависит от $N_{\mathbf{k}j}$; оно описывает нулевые колебания решетки.

При оценках первого слагаемого считаем, что решетка находится в состоянии, близком к термодинамическому равновесию, и в качестве $N_{\mathbf{k}j}$ подставляем в (6.33a) равновесную функцию Планка (6.27).

Рассмотрим по отдельности случаи низких ($T \ll \Theta$) и высоких ($T \gg \Theta$) температур. Для высоких температур, подставляя в (6.33a) приближенное выражение

$$N = T/h\Omega,$$

получаем

$$\langle R_{np}'^2 \rangle = \frac{T}{\rho} \int d\xi_{\mathbf{k}} \frac{1}{\Omega^2} |e_p(\mathbf{k}, j)|^2.$$

Таким образом, при $T \gg \Theta$ $\langle R_{np}'^2 \rangle$ пропорционально T . Коэффициент пропорциональности легко оценить с помощью дебаевской модели. Для этого следует положить $|e(\mathbf{k}, j)|^2 = 1$ и перейти к интегрированию по частоте Ω с помощью соотношения (5.2). Это дает

$$\langle R_{np}'^2 \rangle = \frac{3T\Omega_D}{2\pi^2 \rho v^3}. \quad (6.34)$$

Отношение (6.34) к \bar{a}^2 есть по порядку величины

$$T/\bar{M}\bar{v}^2. \quad (6.35)$$

Оценивая аналогичным образом отношение $\langle R_{np}'^2 \rangle / \bar{a}^2$, мы получаем по порядку величины

$$\Theta/\bar{M}\bar{v}^2. \quad (6.36)$$

При низких температурах возбуждены только три акустические ветви. Воспользовавшись соотношением (1.33) для векторов поляризации акустических колебаний, мы можем переписать (6.33а) в виде

$$\langle R_{np}'^2 \rangle = \frac{\hbar}{\rho} \sum_a \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{N_{ka}}{\Omega_{ka}}.$$

Интегрирование по d^3k разобьем на интегрирование по телесному углу do в k -пространстве и по абсолютной величине волнового вектора k . От интегрирования по k можно, далее, перейти к интегрированию по частоте фононов Ω , воспользовавшись соотношением (5.2); поскольку подынтегральное выражение начинает быстро убывать при частотах Ω порядка $T/\hbar \ll \Omega_D$, интегрирование можно распространить до бесконечности. Это дает

$$\langle R_{np}'^2 \rangle = \frac{3T^2}{2\pi^2 \rho \bar{v}^3 \hbar} \int_0^\infty \frac{x dx}{e^x - 1} = \frac{T^2}{4\hbar \rho \bar{v}^3}.$$

Отсюда по порядку величины при $T \ll \Theta$

$$\langle R_{np}'^2 \rangle / \bar{a}^2 \simeq \frac{T}{\Theta} \frac{T}{\bar{M}\bar{v}^2}, \quad (6.37)$$

так что температурозависящая часть среднеквадратичного смещения атома решетки при $T \ll \Theta$ пропорциональна T^2 .

Таким образом, отношение $\langle R_{np}'^2 \rangle / \bar{a}^2$ при низких температурах определяется нулевыми колебаниями решетки и от температуры не зависит. При высоких же температурах оно определяется интенсивностью тепловых колебаний и потому пропорционально температуре.

Обычно температура Дебая диэлектриков составляет несколько сотен градусов, и типичные значения отношения (6.36) порядка сотой или нескольких тысячных. По-

скольку, как правило, температуры плавления кристаллов превышают их температуры Дебая самое большее в несколько раз, то отношение (6.35) обычно остается малым при всех температурах вплоть до температуры плавления.

Однако чем меньше массы атомов, составляющих кристалл, и чем слабее взаимодействие между ними (т. е., иначе говоря, чем меньше скорости звука в кристалле), тем больше параметр (6.36). Наиболее слабым оказывается взаимодействие в кристаллах, построенных из атомов благородных газов — нейтральных атомов с заполненными электронными оболочками. Среди них самые легкие — атомы гелия.

Для кристаллов твердого гелия параметр (6.36) отнюдь не мал, и амплитуда нулевых колебаний оказывается сравнимой с межатомным расстоянием. Такие объекты получили название квантовых кристаллов. Они обладают рядом специфических по сравнению с обычными кристаллами свойств; мы их не будем изучать в данной книге¹⁾.

Отметим только, что даже в том случае, если параметр (6.36) больше или порядка единицы, теория возмущений может все же оказаться применимой для расчета вероятностей процессов с участием длинноволновых акустических фононов, так как соответствующие матричные элементы пропорциональны волновым векторам этих фононов, т. е. содержат дополнительную малость.

Во многих задачах кинетики твердых тел длинноволновые акустические фононы играют определяющую роль. Укажем, как описывать квантовомеханически их взаимодействие в рамках теории упругости, имея в виду использовать это далее в приложениях.

Квантование теории упругости в линейном приближении описано в конце § 3. Чтобы проквантовать нелинейную теорию, напишем выражение для плотности энергии упругой сплошной среды в ангармоническом приближении. Условимся относительно системы координат, в которой это выражение будет записываться.

¹⁾ Относительно свойств квантовых кристаллов см. обзор: Андриев А. Ф. — Успехи физических наук, 1976, т. 118, с. 251, а также сборник статей — Квантовые кристаллы/Под ред. С. В. Вонсовского. — М.: Мир, 1975.

Обычно в механике сплошных сред пользуются одной из следующих двух систем.

1) *Лабораторная система* (в гидродинамике ее называют эйлеровой). При деформировании лабораторная координата \mathbf{r} данного элемента сплошной среды изменяется. Уравнения теории упругости записываются для пространственных и временных производных от смещения \mathbf{u} как функции лабораторной координаты \mathbf{r} и времени t .

2) *Сопутствующая система* (в гидродинамике называемая лагранжевой). Упругие смещения точек сплошной среды рассматриваются как функции координат, которые имели эти точки до деформирования. Переменная \mathbf{r} , таким образом, «нумерует» элементы сплошной среды. После деформирования координата \mathbf{r} данного элемента остается неизменной, хотя сам элемент, естественно, занимает другое положение в пространстве. Состояние же деформированной сплошной среды описывается тензором деформации как функцией лагранжевой координаты \mathbf{r} .

Далее при записи уравнений теории упругости мы будем пользоваться сопутствующей системой координат. По сути дела, мы уже пользовались ею, начиная с § 1, когда каждый атом решетки нумеровался тройкой целых чисел \mathbf{n} и номером p . Эти номера служат характеристикой равновесного положения атома и в этом смысле аналогичны сопутствующей координате \mathbf{r} теории упругости. Если же смещения атомов \mathbf{R}_{np} являются плавными функциями \mathbf{n} (и не зависят от p), то можно совершить переход от дискретной переменной \mathbf{n} к непрерывной переменной \mathbf{r} .

Такие величины, как плотность энергии (или массы), в сопутствующей системе мы определим как энергию (или массу), заключенные в таком объеме, который до деформирования был единичным (а после деформирования мог стать несколько иным). Плотность кинетической энергии есть половина произведения массы, заключенной в этом объеме, на квадрат скорости:

$$\frac{1}{2} \rho_0 \dot{\mathbf{u}}^2, \quad (6.38)$$

где ρ_0 — средняя плотность среды. Таким образом, плотность кинетической энергии в лагранжевой системе координат имеет такой же вид, как и в линейной теории.

Плотность потенциальной энергии сплошной среды запишем в виде

$$U = U_2 + U_3 + U_4 + \dots, \quad (6.39)$$

где

$$\begin{aligned} U_2 &= \frac{1}{2} \lambda_{ll'mm'} \frac{\partial u_l}{\partial r_{l'}} \frac{\partial u_m}{\partial r_{m'}}, \\ U_3 &= \frac{1}{6} \lambda_{ll'mm'nn'} \frac{\partial u_l}{\partial r_{l'}} \frac{\partial u_m}{\partial r_{m'}} \frac{\partial u_n}{\partial r_{n'}}, \\ U_4 &= \frac{1}{24} \lambda_{ll'mm'nn'pp'} \frac{\partial u_l}{\partial r_{l'}} \frac{\partial u_m}{\partial r_{m'}} \frac{\partial u_n}{\partial r_{n'}} \frac{\partial u_p}{\partial r_{p'}}. \end{aligned} \quad (6.40)$$

Здесь $\lambda_{ll'mm'nn'}$ и $\lambda_{ll'mm'nn'pp'}$ — это, соответственно, тензоры ангармонических модулей упругости третьего и четвертого порядка.

Как известно из теории упругости¹⁾, тензор деформации сплошной среды равен

$$u_{lm} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_l}{\partial r_m} + \frac{\partial u_m}{\partial r_l} + \frac{\partial u_n}{\partial r_l} \frac{\partial u_n}{\partial r_m} \right), \quad (6.41)$$

т. е., помимо членов, линейных по производным $\partial u_i / \partial r_m$, он содержит также и квадратичное слагаемое. Следовательно, потенциальная энергия упругой сплошной среды U_2 , выраженная через модули упругости $\lambda_{ll'mm'}$ и тензор деформации, должна, помимо квадратичных, содержать также члены третьего и четвертого порядка по $\partial u_i / \partial r_m$. Запись (6.39) предполагает, что эти члены вошли в виде слагаемых, соответственно, в U_3 и U_4 .

Полезно указать, что классические уравнения движения упругой сплошной среды при учете ангармонизма упругих сил имеют вид

$$\rho_0 \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} = \frac{\partial}{\partial r_l} \frac{\partial U}{\partial \frac{\partial u_i}{\partial r_l}}. \quad (6.42)$$

Здесь в правую часть нужно подставить выражение (6.39) для плотности энергии упругой сплошной среды, записан-

¹⁾ См., например, Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теория упругости. — М.: Наука, 1965, с. 10.

ное с точностью до слагаемого U_n , если требуется учесть ангармонизм n -го порядка.

Для перехода к квантовому описанию ангармонического взаимодействия фононов подставим (3.27) в (6.40) и проинтегрируем по всему объему кристалла \mathcal{V} . В результате получим для оператора энергии ангармонического взаимодействия третьего порядка:

$$\hat{U}_3 = \frac{\rho \mathcal{V}}{6} \left(\frac{\hbar}{2\rho \mathcal{V}} \right)^{3/2} \sum_{aa'a''} \sum_{kk'k''} \frac{1}{\sqrt{\Omega \Omega' \Omega''}} b_{aa'a''}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{k}'') \times \\ \times (\hat{c}_{ka} + \hat{c}_{-ka}^\dagger)(\hat{c}_{k'a'} + \hat{c}_{-k'a'}^\dagger)(\hat{c}_{k''a''} + \hat{c}_{-k''a''}^\dagger). \quad (6.43)$$

Ангармонические коэффициенты $b_{aa'a''}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{k}'')$ оказываются отличными от нуля лишь при

$$\mathbf{k} + \mathbf{k}' + \mathbf{k}'' = 0$$

и равными

$$b_{aa'a''}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{k}'') = -\frac{i}{\rho} \lambda_{ll'mm'nn'} e_l c_m' e_n'' k_l k_m' k_n''. \quad (6.44)$$

Явный вид этого выражения подтверждает сделанное выше заключение, что если все три взаимодействующих колебания — акустические, ангармонические коэффициенты пропорциональны произведению абсолютных значений векторов $\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{k}''$ на некоторую функцию от углов, характеризующих ориентацию векторов друг относительно друга и относительно кристаллографических осей.

§ 7. Рассеяние фононов дефектами кристаллической решетки. Симметрия сечения рассеяния

В § 6 мы изучали рассеяние фононов в идеальных кристаллах. Обычно, однако, регулярность кристаллической решетки оказывается нарушенной за счет тех или иных дефектов. Мы ограничимся рассмотрением так называемых точечных дефектов таких, например, как атомы примеси, замещающие основные атомы решетки (или же внедренные в промежутках между ними).

Наличие дефекта сказывается на энергии решетки двояким образом. Во-первых, у него другая масса, и это изменяет выражение для кинетической энергии колеблющейся решетки. Во-вторых, он иначе взаимодействует с

соседними атомами, что приводит к изменению соответствующих силовых констант.

В настоящем разделе мы рассмотрим рассеяние колебаний решетки на дефектах¹⁾. Это явление существует уже в гармоническом приближении, которым мы и ограничимся. Рассеяние колебаний решетки дефектами является упругим. Это значит, что при рассеянии меняется волновой вектор колебания и, может быть, номер колебательной ветви j , однако частота колебания остается неизменной.

Задача о вычислении вероятности рассеяния может быть поставлена и решена в рамках классической теории колебаний решетки²⁾, изложенной в § 1. Мы, однако, сразу сформулируем задачу в квантовых терминах, имея в виду использовать полученные результаты для расчета оператора столкновений кинетического уравнения, описывающего рассеяние фононов дефектами.

Гамильтониан решетки, в которой имеется дефект, можно представить в гармоническом приближении в виде билинейной функции от операторов рождения и уничтожения фононов. Однако эта функция содержит не только диагональные члены вида $\hat{c}_{kj}^\dagger \hat{c}_{kj}$, а также и недиагональные члены вида $\hat{c}_{k'j'}^\dagger \hat{c}_{kj}$. Они и ответственны за переходы между различными состояниями (\mathbf{k}, j) , т. е. описывают рассеяние фононов дефектом.

Акт рассеяния фонона можно представить себе как следующий переход:

Начальное состояние	Конечное состояние
N фононов (\mathbf{k}, j)	$N - 1$ фононов (\mathbf{k}, j)
N' фононов (\mathbf{k}', j')	$N' + 1$ фононов (\mathbf{k}', j')

¹⁾ Кроме того, наличие дефектов может привести к существенной перестройке колебательных состояний решетки, а именно, к возникновению так называемых локальных колебаний, амплитуда которых быстро падает по мере удаления от дефекта.

Относительно локальных колебаний решетки см. Лифшиц И. М.—*Nuovo Cimento Suppl.*, 1956, в. 10, р. 3, 716; Лифшиц И. М., Косевич А. М.—*Reports on Progress in Physics*, 1966, в. 29, р. 217; Марадулин А., Монролл Э., Вейсс Дж.—*Динамическая теория кристаллической решетки в гармоническом приближении*.— М.: Мир, 1965.

²⁾ Эта задача была решена в общем виде в работе: Лифшиц И. М.—*ЖЭТФ*, 1948, т. 18, с. 293.

Обозначим через w_0 вероятность рассеяния фонона (в единицу времени) отдельным дефектом. Эту вероятность можно записать в виде

$$w_0(N, N' \rightarrow N-1, N'+1) = \frac{1}{\mathcal{V}^2} G(\mathbf{k}, j; \mathbf{k}', j') \delta(\Omega - \Omega') N(N'+1). \quad (7.4)$$

Множитель \mathcal{V}^{-2} выделен здесь из соображений удобства: функция $G(\mathbf{k}, j; \mathbf{k}', j')$, которая войдет в выражение (7.10) для оператора столкновений фононов с дефектами, не зависит от объема кристалла, а зависит только от начального и конечного фононного состояния и, разумеется, от типа дефекта.

Чтобы найти вероятность рассеяния в единицу времени в элемент объема $d^3\mathbf{k}'$ \mathbf{k}' -пространства, нужно умножить (7.1) на $\mathcal{V} d^3\mathbf{k}' / (2\pi)^3$. Произведем далее интегрирование по отдельности по частоте фонона Ω' в конечном состоянии и по другим переменным. Это можно сделать с помощью тождества

$$d^3\mathbf{k}' = d\Omega' dS' / g',$$

где $dS' \equiv dS_{\mathbf{k}'j'}$ — элемент площади поверхности постоянной частоты $\Omega_{j'}(\mathbf{k}') = \text{const}$, $g' = \partial\Omega_{j'} / \partial\mathbf{k}'$. В итоге для вероятности перехода в состояния, расположенные в элементе площади dS' , получаем

$$dw = \frac{1}{(2\pi)^3 \mathcal{V}^2} G(\mathbf{k}, j; \mathbf{k}', j') N(N'+1) \frac{dS'}{g'}. \quad (7.2)$$

Это выражение пропорционально произведению $N(N'+1)$. Далее удобно будет ввести такую характеристику рассеяния фононов на дефекте, которая не зависела бы от числа фононов в начальном и конечном состояниях. Для этого поделим (7.2) на $N'+1$ и на плотность потока числа фононов в начальном состоянии, равную по абсолютной величине

$$N\mathcal{V}^{-1}g.$$

Получается величина, имеющая размерность площади. Мы будем называть ее дифференциальным сечением рассеяния фонона и обозначать $d\sigma(\mathbf{k}, j; \mathbf{k}', j')$. Имеем

$$d\sigma(\mathbf{k}, j; \mathbf{k}', j') = \frac{1}{(2\pi)^3} G(\mathbf{k}, j; \mathbf{k}', j') \frac{dS'}{gg'}. \quad (7.3)$$

Интегральное сечение рассеяния σ , характеризующее полную вероятность рассеяния фонона, получается интегрированием этого выражения по всей поверхности S' и суммированием по j' .

Если концентрация дефектов в кристалле достаточно мала, то рассеяние фононов на каждом дефекте можно в первом приближении считать независимым. Чтобы получить полную вероятность рассеяния в единицу времени, нужно выражение (7.2) умножить на полное число дефектов данного вида и просуммировать по всем видам дефектов. Если имеется всего один вид дефектов,

$$dW = n_d G(\mathbf{k}, j; \mathbf{k}', j') N(N'+1) dS' / (2\pi)^3 g', \quad (7.4)$$

где $n_d = N_d / \mathcal{V}$ — концентрация дефектов, N_d — их полное число в кристалле объема \mathcal{V} . Это выражение представляет собой первый член разложения по степеням малого параметра N_d/N .

Вероятности рассеяния должны обладать одним важным свойством, которое является следствием симметрии уравнений движения решетки относительно обращения времени. Рассмотрим процесс, при котором в начальном состоянии, до акта рассеяния, в кристалле имеется колебание (\mathbf{k}, j) , а в конечном состоянии — колебание (\mathbf{k}', j') . Наряду с ним рассмотрим обращенный во времени процесс — когда в начальном состоянии имеется колебание $(-\mathbf{k}', j')$, обращенное во времени по отношению к колебанию (\mathbf{k}', j') , а в конечном состоянии — колебание $(-\mathbf{k}, j)$, которое, соответственно, обращено во времени по отношению к колебанию (\mathbf{k}, j) . В силу симметрии законов механики относительно обращения времени вероятности этих процессов должны быть равны. Это требование дает соотношение

$$G(\mathbf{k}, j; \mathbf{k}', j') = G(-\mathbf{k}', j'; -\mathbf{k}, j), \quad (7.5)$$

которое получило название *теоремы взаимности*.

Если силовые константы и масса дефекта мало отличаются от соответствующих величин для собственного атома решетки, вероятности рассеяния можно вычислять в так называемом борновском приближении, т. е. в первом приближении теории возмущений. Борновские вероятности, как мы увидим ниже, удовлетворяют

соотношению

$$G(\mathbf{k}, j; \mathbf{k}', j') = G(\mathbf{k}', j'; \mathbf{k}, j), \quad (7.6)$$

связывающему непосредственно вероятности прямого и обратного процессов.

Соотношение (7.6) имеет место и для точных вероятностей рассеяния, если кристалл и дефект решетки имеют центр симметрии. В этом случае при преобразовании инверсии вероятность перехода должна остаться неизменной, в то время как фоновые волновые векторы меняют знак. Это дает соотношение

$$G(\mathbf{k}, j; \mathbf{k}', j') = G(-\mathbf{k}, j; -\mathbf{k}', j'),$$

которое в сочетании с (7.5) приводит к (7.6).

Еще одно важное соотношение получается из условия нормировки вероятности. Рассмотрим начальное состояние, в котором имеется один фоновый (\mathbf{k}, j) , а все прочие числа заполнения $N_{\mathbf{k}'j'} = 0$. Фонon (\mathbf{k}, j) испытывает рассеяние на дефекте решетки, переходя в различные состояния (\mathbf{k}', j') . Вероятности перехода w_0 должны удовлетворять очевидному условию

$$\sum_{\mathbf{k}'j'} w_0(1_{\mathbf{k}j}, 0_{\mathbf{k}'j'} \rightarrow 0_{\mathbf{k}j}, 1_{\mathbf{k}'j'}) \Delta t + P(1_{\mathbf{k}j} \rightarrow 1_{\mathbf{k}j}; \Delta t) = 1. \quad (7.7)$$

Штрих у знака суммы означает, что в ней отсутствует слагаемое с $\mathbf{k} = \mathbf{k}'$, $j = j'$; вся сумма, таким образом, представляет собой полную вероятность рассеяния за время Δt фонона (\mathbf{k}, j) в любое состояние (\mathbf{k}', j') . $P(1_{\mathbf{k}j} \rightarrow 1_{\mathbf{k}j}; \Delta t)$ есть вероятность того, что за время Δt число фононов в состоянии (\mathbf{k}, j) не изменится. Соотношение (7.7) представляет собой запись того факта, что сумма вероятностей всех событий равна единице.

Рассмотрим теперь возникшее в результате рассеяния конечное состояние, в котором имеется один фоновый (\mathbf{k}, j) , а все прочие числа заполнения $N_{\mathbf{k}'j'} = 0$. Оно могло возникнуть в результате рассеяния фонона из различных начальных состояний (\mathbf{k}', j') . Вероятность такого процесса, просуммированная по всем начальным состояниям, должна, очевидно, удовлетворять условию

$$\sum_{\mathbf{k}'j'} w_0(0_{\mathbf{k}j}, 1_{\mathbf{k}'j'} \rightarrow 1_{\mathbf{k}j}, 0_{\mathbf{k}'j'}) \Delta t + P(1_{\mathbf{k}j} \rightarrow 1_{\mathbf{k}j}; \Delta t) = 1, \quad (7.8)$$

означающему, что сумма вероятностей переходов из всех состояний в данное равна единице.

Сравнивая (7.7) и (7.8) и принимая во внимание (7.1), мы получаем соотношение, которому всегда должны удовлетворять вероятности прямого и обратного процессов (E. C. G. Stueckelberg, 1952)

$$\int d\xi_{\mathbf{k}} G(\mathbf{k}, j; \mathbf{k}', j') \delta(\Omega - \Omega') = \int d\xi_{\mathbf{k}} G(\mathbf{k}', j'; \mathbf{k}, j) \delta(\Omega - \Omega'). \quad (7.9)$$

Рассеяние фононов дефектами решетки приводит к появлению дополнительного слагаемого в операторе столкновений кинетического уравнения:

$$\left[\frac{\partial N}{\partial t} \right]_{\text{ст}} = n_d \int d\xi_{\mathbf{k}} [G(\mathbf{k}', j'; \mathbf{k}, j) N'(N+1) - G(\mathbf{k}, j; \mathbf{k}', j') N(N'+1)] \delta(\Omega - \Omega'). \quad (7.10)$$

При выводе этого выражения мы воспользовались правилом усреднения (6.22), так что под N и N' следует понимать соответствующие значения фоновой функции распределения.

Равновесная функция распределения (6.27), так же как и вообще любая функция $N(\Omega)$, зависящая только от частоты фонона Ω , обращает это выражение в нуль. Действительно, при этом в силу закона сохранения энергии, выражаемого δ -функцией в (7.10),

$$N'(N+1) = N(N'+1),$$

а тогда обращение (7.10) в нуль вытекает непосредственно из (7.9).

Выражение (7.10) упрощается, если при вычислении вероятностей можно ограничиться борновским приближением. С учетом (7.6) мы в этом случае имеем

$$\left[\frac{\partial N}{\partial t} \right]_{\text{ст}} = n_d \int d\xi_{\mathbf{k}} G(\mathbf{k}, j; \mathbf{k}', j') \delta(\Omega - \Omega') (N' - N). \quad (7.11)$$

Записанные выше соотношения симметрии для вероятностей рассеяния фононов на примесях обобщаются и для вероятностей фоновых-фононных столкновений, обусловленных решеточным ангармонизмом. Соотношением, аналогичным (7.5), в этом случае является следующее

соотношение для функций $\beta_{jj'j''}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{k}'')$, через которые выражаются вероятности трехфононных столкновений

$$\beta_{jj'j''}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{k}'') = \beta_{j''j'j}(-\mathbf{k}'', -\mathbf{k}', -\mathbf{k}). \quad (7.12)$$

Аналогом соотношения (7.6), вытекающим из применимости борновского приближения для описания фонон-фононных столкновений, служит

$$\beta_{jj'j''}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{k}'') = \beta_{j''j'j}(\mathbf{k}'', \mathbf{k}', \mathbf{k}). \quad (7.13)$$

Первое из этих соотношений является точным; второе выполняется обычно с весьма высокой точностью, определяемой малыми параметрами (6.35) или (6.36).

Оценим вероятности, фигурирующие в столкновительном члене (7.11). В общем случае, когда атомы примеси заметно отличаются от атомов основной решетки (либо в химическом отношении, либо по своей массе), а рассеиваются коротковолновые фононы, по порядку величины

$$\sigma \simeq \bar{a}^2. \quad (7.14)$$

Действительно, единственная величина, имеющая размерность площади и характеризующая в гармоническом приближении рассеяние фононов, есть в данном случае \bar{a}^2 . Это дает для функции $G(\mathbf{k}, j; \mathbf{k}', j')$

$$G \simeq \bar{a}^4 v^2. \quad (7.15)$$

Эта общая оценка оказывается, однако, неприменимой в ряде специальных случаев, например, при рассеянии на точечных дефектах длинноволновых акустических колебаний. Она также теряет силу, когда в теории возникает дополнительный параметр малости, характеризующий различие между дефектом и атомом решетки, который он замечает (например, малая разность масс в случае, когда дефектом является атом изотопа).

Начнем с обсуждения изотопического рассеяния. Чтобы не загромождать обозначений, произведем конкретные расчеты для одноатомной решетки ($s=1$). Обозначим здесь через \bar{M} среднюю по всему кристаллу массу атома решетки. Пусть в выражении (3.4) для невозмущенной кинетической энергии решетки фигурирует именно эта средняя масса.

Предполагается, что элемент, атомы которого составляют решетку, имеет несколько изотопов, распределенных хаотически. Масса атома, расположенного в узле \mathbf{n} , отличается от средней массы на величину $\Delta M_{\mathbf{n}}$. В результате в выражении для кинетической энергии колебаний решетки возникает дополнительное слагаемое

$$\Delta \mathcal{E}_{\text{кин}} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{n}} \Delta M_{\mathbf{n}} \dot{R}_{\mathbf{n}}^2. \quad (7.16)$$

Для большинства атомов (за исключением изотопов водорода и гелия) отношение $\Delta M/\bar{M}$ мало. Поэтому (7.16) может рассматриваться как малое возмущение.

Подставив в (7.16) выражение (3.23), для оператора скорости атома решетки получаем для $\Delta \mathcal{E}_{\text{кин}}$

$$-\frac{1}{\gamma^2} \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} \sum_{j_1 j_2} D(\mathbf{k}_1, j_1; \mathbf{k}_2, j_2) (\hat{c}_{\mathbf{k}_1 j_1} - \hat{c}_{-\mathbf{k}_1 j_1}^\dagger) \times \\ \times (\hat{c}_{-\mathbf{k}_2 j_2} - \hat{c}_{\mathbf{k}_2 j_2}^\dagger), \quad (7.17)$$

где

$$D(\mathbf{k}_1, j_1; \mathbf{k}_2, j_2) = \frac{\hbar}{4\rho} e(\mathbf{k}_1, j_1) e^*(\mathbf{k}_2, j_2) \times \\ \times \sqrt{\Omega_1 \Omega_2} \sum_{\mathbf{n}} \Delta M_{\mathbf{n}} \exp[i(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \mathbf{a}_{\mathbf{n}}]. \quad (7.18)$$

Амплитуда перехода из состояния (\mathbf{k}, j) в состояние (\mathbf{k}', j') есть по теории возмущений коэффициент в (7.17) при произведении операторов $\hat{c}_{\mathbf{k}' j'}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k} j}$, равный $2\mathcal{Y}^{-1} D(\mathbf{k}, j; \mathbf{k}', j')$. Соответственно, для вероятности мы получаем в борновском приближении

$$W_0(N, N' \rightarrow N-1, N'+1) = \frac{1}{\gamma^2} \frac{\pi}{2\rho^2} |e^*(\mathbf{k}, j) e(\mathbf{k}', j')|^2 \times \\ \times \Omega \Omega' \sum_{\mathbf{n} \mathbf{n}'} \Delta M_{\mathbf{n}} \Delta M_{\mathbf{n}'} \exp[i(\mathbf{k} - \mathbf{k}')(\mathbf{a}_{\mathbf{n}} - \mathbf{a}_{\mathbf{n}'})] \delta(\Omega - \Omega') \times \\ \times N(N'+1). \quad (7.19)$$

Сумма по \mathbf{n}, \mathbf{n}' при $\mathbf{n} \neq \mathbf{n}'$ есть сумма случайных ($\Delta M_{\mathbf{n}}$ — случайная величина) и знакопеременных слагаемых; среднее от нее по объему кристалла есть нуль. Сумма же

слагаемых с $n = n'$ дает

$$\sum_n \overline{\Delta M_n^2} = N \overline{\Delta M^2},$$

где черта означает усреднение по объему кристалла. В итоге

$$W_0(N, N' \rightarrow N-1, N'+1) = \frac{\pi}{2} N \frac{v^2}{v'^2} |e'e^*|^2 \frac{\overline{\Delta M^2}}{M^2} \Omega^2 \delta(\Omega - \Omega') N(N'+1). \quad (7.20)$$

Величина эта пропорциональна среднеквадратичной относительной флуктуации массы изотопа $\overline{\Delta M^2}/M^2$, как и должно быть, так как рассеяние идет в меру отличия массы изотопа от средней массы атома решетки.

Она пропорциональна также полному числу атомов N ; это обстоятельство не позволяет использовать ее в качестве непосредственной характеристики интенсивности рассеяния. Такой характеристикой, зависящей только от изотопического состава, может служить вероятность (7.20), отнесенная к одной элементарной ячейке, т. е. деленная на N . С физической точки зрения естественно использовать именно ее, так как возмущение отлично от нуля в каждой ячейке. Этой величине соответствует функция

$$G(k, j; k', j') = \frac{\pi}{2} v^2 \frac{\overline{\Delta M^2}}{M^2} \Omega^2 |e'e^*|^2. \quad (7.21)$$

Аналогичным образом вводится для изотопического рассеяния и понятие среднего дифференциального сечения рассеяния

$$d\sigma(k, j; k', j') = \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{\pi}{2} v^2 \Omega^2 |e'e^*|^2 \frac{\overline{\Delta M^2}}{M^2} \frac{dS'}{g g'}.$$

Для коротковолновых фононов полное сечение σ равно по порядку величины

$$\sigma \simeq \bar{a}^2 \frac{\overline{\Delta M^2}}{M^2}. \quad (7.22)$$

Чтобы получить оценку для длинноволновых акустических фононов, нужно принять во внимание, что пло-

щадь S' поверхности постоянной частоты, по которой производится интегрирование при вычислении полного сечения, пропорциональна k'^2 , где k' — длина волнового вектора рассеянного акустического фонона. Это дает

$$\sigma \simeq \bar{a}^2 \frac{\overline{\Delta M^2}}{M^2} \left(\frac{\Omega}{\Omega_D} \right)^4, \quad (7.23)$$

т. е. сечение рассеяния пропорционально Ω^4 ¹⁾. Такая частотная зависимость сечения рассеяния акустических фононов, как мы сейчас увидим, может иметь место не только для изотопического рассеяния, а и вообще для рассеяния на любых точечных дефектах.

Произвольный точечный дефект возмущает не только кинетическую, а также и потенциальную энергию решетки. Пусть в решетке имеется один дефект, расположенный в узле n_0 на месте атома p_0 . Изменение силовых констант вследствие взаимодействия с дефектом обозначим $\Delta A_{\gamma\gamma'}^{nn'}$. Эти величины удовлетворяют соотношениям, аналогичным (1.5):

$$\sum_n \sum_p \Delta A_{\gamma\gamma'}^{nn'} = \sum_{n'} \sum_{p'} \Delta A_{\gamma\gamma'}^{nn'} = 0, \quad (7.24)$$

которые означают, что трансляция решетки вместе с дефектом не меняет ее потенциальной энергии.

Оператор энергии возмущения, описывающего рассеяние фонона дефектом, имеет вид

$$\frac{1}{v''} \sum_{k_1 k_2} \sum_{j_1 j_2} \left[D'(k_1, j_1; k_2, j_2) (\hat{c}_{k_1 j_1} - \hat{c}_{-k_1 j_1}^\dagger) (\hat{c}_{-k_2 j_2} - \hat{c}_{k_2 j_2}^\dagger) + D''(k_1, j_1; k_2, j_2) (\hat{c}_{k_1 j_1} + \hat{c}_{-k_1 j_1}^\dagger) (\hat{c}_{-k_2 j_2} + \hat{c}_{k_2 j_2}^\dagger) \right], \quad (7.25)$$

где

$$D'(k, j; k', j') = -\frac{\hbar}{4p} e_{p_0}(k, j) e_{p_0}^*(k', j') \sqrt{\Omega \Omega'} \Delta M_{n_0 p_0} \exp[i(k - k') a_{n_0}],$$

¹⁾ Оценка эта, как показывают прямые вычисления, сохраняет силу и для многоатомных решеток ($s \geq 2$), если под $\overline{\Delta M^2}$ понимать сумму по всем s неэквивалентным атомам среднеквадратичных флуктуаций их массы.

$$D''(\mathbf{k}, j; \mathbf{k}', j') = \frac{\hbar}{4\rho} \frac{1}{\sqrt{\Omega\Omega'}} \sum_{\gamma\gamma'} e_{\gamma}(\mathbf{k}, j) e_{\gamma'}^*(\mathbf{k}', j') \times \\ \times \sum_{nn'} \Delta A_{\gamma\gamma'}^{nn'} \exp[i(\mathbf{k}a_n - \mathbf{k}'a_{n'})].$$

Первый член в (7.25) описывает изменение кинетической, а второй — потенциальной энергии решетки под действием дефекта. Нас будет интересовать вид этого выражения для предельно длинных волн, когда $k\bar{a} \ll 1$, так что возмущение, создаваемое дефектом, можно считать малым. В наименьшем приближении по параметру $k\bar{a}$ экспоненту в выражении для $D'(\mathbf{k}, j; \mathbf{k}', j')$ можно заменить единицей.

Однако в силу соотношений (7.24) такого рода замена в выражении для $D''(\mathbf{k}, j; \mathbf{k}', j')$ дает нуль. Чтобы получить отличный от нуля результат, нужно произвести разложение по малому параметру в показателе. Первый член разложения опять-таки даст нуль в силу тех же соотношений, и в разложении экспоненты нужно удерживать члены второго порядка. Это дает

$$D''(\mathbf{k}, j; \mathbf{k}', j') = \frac{\hbar}{4\rho} \frac{1}{\sqrt{\Omega\Omega'}} \sum_{\gamma\gamma'} e_{\gamma}(\mathbf{k}, j) e_{\gamma'}^*(\mathbf{k}', j') \times \\ \times \sum_{nn'} \Delta A_{\gamma\gamma'}^{nn'} (\mathbf{k}a_n)(\mathbf{k}'a_{n'}). \quad (7.26)$$

Для величины $\Delta A_{\gamma\gamma'}^{nn'}$ справедлива оценка¹⁾

$$|\Delta A_{\gamma\gamma'}^{nn'}| \simeq \mathcal{E}_a \bar{a}^2, \quad (7.27)$$

вытекающая из того условия, что добавочная энергия на один дефект при смещениях порядка \bar{a} должна быть порядка атомной энергии \mathcal{E}_a . Оценка, разумеется, справедлива, если ячейки n и n' являются достаточно близкими соседями ячейки n_0 . Пользуясь ею, мы можем определить по порядку величины отношения D'/D'' . Оно равно

$$\frac{D'}{D''} \simeq \frac{\Omega\Omega' \Delta M}{\mathcal{E}_a k k'} \simeq \frac{\Delta M \bar{v}^2}{\mathcal{E}_a} \simeq \frac{\Delta M}{M}. \quad (7.28)$$

¹⁾ Для дефектов замещения, сильно отличающихся в химическом отношении от основных атомов, или же дефектов внедрения.

Если ΔM порядка \bar{M} , то это отношение порядка единицы, т. е. второе слагаемое в (7.25) дает в сечении рассеяния вклад того же порядка, что и первое. Окончательно получается следующая оценка:

$$\sigma \simeq \bar{a}^2 \left(\frac{\Omega}{\Omega_D} \right)^4, \quad (7.29)$$

или

$$G \simeq \bar{a}^6 \Omega^2. \quad (7.30)$$

Задача о рассеянии звуковых колебаний неоднородностью, размеры которой гораздо меньше длины звуковой волны, была впервые решена Рэлеем (Rayleigh, 1871). Соответственно, рассеяние звуковых колебаний на малых неоднородностях, приводящее к зависимости сечения рассеяния от частоты вида $\sigma \sim \Omega^4$, получило название *рэлеевского рассеяния*.

§ 8. Фононы в гелии II

В настоящем разделе мы рассмотрим еще одну физическую систему, напоминающую твердые диэлектрики в том отношении, что для описания ее кинетических свойств достаточно знать законы дисперсии и взаимодействия фононов. Это жидкий He^4 при достаточно низких температурах.

Если внешнее давление не слишком велико (ниже приблизительно 25 ат), гелий остается жидким вплоть до самых низких температур. Это есть проявление специфических квантовых закономерностей, связанных с тем, что амплитуда нулевых колебаний атомов гелия оказывается сравнимой с межатомным рассеянием.

При температуре 2,17 К и атмосферном давлении гелий испытывает фазовый переход. Низкотемпературная фаза называется *гелий II*. Гелий II обладает свойством *сверхтекучести*, открытым П. Л. Капицей в 1938 г. и теоретически объясненным Л. Д. Ландау в 1941 г. Свойство это заключается в способности протекать через узкие капилляры, не обнаруживая вязкости¹⁾.

¹⁾ Теория этого явления и свойств сверхтекучей жидкости подробно изложена в книге: Халатников И. М. Теория сверхтекучести. — М.: Наука, 1971.

Слабовозбужденное состояние гелия II можно представить себе как совокупность длинноволновых фононов, т. е. обыкновенных звуковых волн, распространяющихся в жидкости в разных направлениях¹⁾. Как и во всякой жидкости, в гелии II может распространяться только продольный звук. Соответственно, здесь имеется только одна акустическая ветвь (в отличие от твердых тел, где

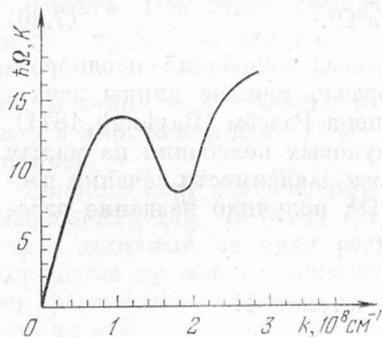


Рис. 3.

Вид дисперсионной кривой $\Omega(k)$ при больших k схематически изображен на рис. 3. Видно, что далее дисперсионная кривая отклоняется от прямой и проходит через минимум. Положение минимума соответствует большому значению k — порядка обратного среднего расстояния между атомами гелия. Окрестности минимума отвечают движения, имеющие весьма сложный характер. Они получили название *ротон*ов. Положение ротонного минимума соответствует энергии, составляющей около 8,6 К (при атмосферном давлении). Концентрация ротонных квантов убывает при уменьшении температуры гелия II экспоненциально, и при достаточно низких температурах она становится настолько малой, что ротонны не вносят вклада

¹⁾ В этом заключается специфика гелия II как квантовой жидкости. В обычной жидкости при любой температуре, помимо звуковых колебаний, оказываются возбужденными и другие, неколебательные степени свободы.

²⁾ Поскольку гелий II представляет собой однородную жидкость, величина $\hbar k$ есть не квазимпульс, как в кристаллах, а истинный импульс.

их три), которая в случае длинных волн представляет собой колебания плотности жидкости.

Поскольку гелий II — изотропная жидкость, частота колебаний Ω зависит только от модуля волнового вектора k^2). При малых k закон дисперсии фононов в первом приближении является линейным:

$$\Omega(k) = vk.$$

ни в термодинамические, ни в кинетические величины. Этот интервал температур лежит ниже приблизительно 0,6 К.

В этом температурном интервале кинетические явления в гелии II определяются одними только фононами, поэтому мы будем называть его фононной областью температур. В нашей книге мы будем рассматривать только эту температурную область и не будем касаться кинетических явлений, связанных с ротонами. Гелий II в фононной области отличается особенно простым кинетическим поведением, которое определяется только детальным видом спектра акустических колебаний и их взаимодействием.

Отклонения закона дисперсии фононов в гелии II от линейной зависимости $\Omega = vk$ весьма малы. Тем не менее, для анализа кинетических явлений, как мы увидим в главе V, такие малые отклонения играют существенную роль. Фононный закон дисперсии с учетом этих отклонений мы будем записывать в виде

$$\Omega = vk[1 + \xi(k)], \quad (8.1)$$

где v — предельное значение скорости фононов при $k \rightarrow 0$. Подробно свойства функции $\xi(k)$ мы рассмотрим в § 42. Здесь же отметим только следующие два ее свойства, важные для дальнейшего. При атмосферном давлении в области значений k , существенных для кинетики¹⁾, во-первых, производная $\delta(k) = d(\xi k)/dk$ положительна:

$$\delta(k) > 0, \quad (8.2)$$

и, во-вторых,

$$|\xi(k)|, \quad \delta(k) \ll 1. \quad (8.3)$$

Соответственно, в настоящем разделе при квантовании фононов в гелии II и вычислении коэффициентов ангармонического взаимодействия мы будем полагать $\xi(k) = 0$. Учитывать отличие $\xi(k)$ от нуля мы будем только там, где это существенным образом сказывается на результате, а именно: анализируя законы сохранения при трехфононных столкновениях (см. §§ 34, 42).

¹⁾ Имеются в виду значения k , не превышающие нескольких $k_T = T/\hbar v$.

Чтобы проквантовать звуковые колебания в гелии II в гармоническом приближении, запишем выражение для плотности энергии жидкости при $T = 0$. Она, очевидно, равна сумме плотностей кинетической и потенциальной энергий:

$$\frac{1}{2} \rho \dot{u}^2 + U(\rho). \quad (8.4)$$

Это выражение мы считаем записанным в лабораторной системе координат, в которой плотность

$$\rho = \rho_0 + \rho',$$

где ρ_0 — средняя плотность, ρ' — переменная часть.

При рассмотрении малых колебаний жидкости, необходимым для квантования, неудобно вводить тензор деформации, как это делалось в теории упругости. При гидродинамическом течении одни слои жидкости смещаются относительно других, и тензор деформации по является, вообще говоря, малой величиной, по которой можно было бы производить разложение кинетических (или термодинамических) характеристик жидкости.

Аналогичным образом, квантование колебаний жидкости и их взаимодействия неудобно производить в лагранжевой (сопутствующей) системе координат, как это мы делали для твердого тела. Действительно, в твердом теле относительное расположение атомов фиксировано; упругая деформация, изменяя расстояния между атомами, не меняет их относительного расположения. Поэтому, если твердая сплошная среда участвует в упругом колебании, то участки сплошной среды с близкими лагранжевыми координатами остаются расположенными близко друг к другу и имеют близкие значения скорости.

В жидкости, где возможны гидродинамические течения, жидкие частицы с близкими лагранжевыми координатами могут вследствие этого разойтись сколь угодно далеко. Соответственно, значения их гидродинамической скорости могут сильно разниться. В эйлеровой же системе жидкие частицы, расположенные близко друг от друга, т. е. имеющие близкие эйлеровы координаты, имеют и близкие значения гидродинамической скорости. Соответственно, в этой системе удобно производить разло-

жение по малым колебаниям и последующее их квантование.

Прежде чем перейти к квантовому описанию, рассмотрим акустические колебания жидкости классически в гармоническом приближении. В равновесии, очевидно,

$$\left(\frac{\partial U}{\partial \rho} \right)_0 = 0,$$

где индекс 0 означает, что производная берется при $\rho = \rho_0$. Соответственно, с точностью до членов второго порядка по ρ' плотность внутренней энергии есть

$$\left(\frac{\partial^2 U}{\partial \rho^2} \right)_0 \frac{\rho'^2}{2}. \quad (8.5)$$

Отбрасывая в выражении для кинетической энергии единичного объема жидкости (первое слагаемое в (8.4)) член третьего порядка по переменным величинам ρ' и \dot{u} :

$$\frac{1}{2} \rho' \dot{u}^2, \quad (8.6)$$

мы находим, что в гармоническом приближении плотность кинетической энергии равна

$$\frac{1}{2} \rho_0 \dot{u}^2. \quad (8.7)$$

Полная энергия гармонических колебаний жидкости есть

$$\frac{1}{2} \int d^3r \left[\rho_0 \dot{u}^2 + \left(\frac{\partial^2 U}{\partial \rho^2} \right)_0 \rho'^2 \right]. \quad (8.8)$$

Линеаризованное уравнение движения жидкости имеет вид

$$\frac{\partial \dot{u}}{\partial t} = - \frac{1}{\rho_0} \nabla p, \quad (8.9)$$

где давление

$$p = \rho \frac{\partial U}{\partial \rho}. \quad (8.10)$$

Подставляя в качестве U выражение (8.5), мы получаем

$$p = \rho_0 \left(\frac{\partial^2 U}{\partial \rho^2} \right)_0 \rho'$$

и

$$\frac{\partial \dot{u}}{\partial t} = - \left(\frac{\partial^2 U}{\partial \rho^2} \right)_0 \nabla \rho'. \quad (8.11)$$

Примем теперь во внимание уравнение неразрывности

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \rho \dot{u} = 0.$$

Линеаризуя это уравнение и дифференцируя его по t и учитывая (8.11), мы получаем для ρ' волновое уравнение

$$\frac{\partial^2 \rho'}{\partial t^2} = v^2 \nabla^2 \rho', \quad (8.12)$$

где

$$v^2(\rho) = \rho \frac{\partial^2 U}{\partial \rho^2} = \rho \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\frac{p}{\rho} \right). \quad (8.13)$$

В линеаризованное волновое уравнение (8.12) мы должны подставить $v_0 = v(\rho_0)^1$, и закон дисперсии получается следующим:

$$\Omega = v_0 k. \quad (8.14)$$

Квантование линейной теории производится в точности таким же образом, как и для кристалла в § 3. Поэтому, не останавливаясь на подробном изложении выкладок, приведем только выражения для оператора $\hat{\rho}'$ отклонения плотности от среднего значения:

$$\hat{\rho}' = \left(\frac{\hbar \rho_0}{2\gamma^2} \right)^{1/2} \sum_k \frac{k}{\sqrt{\Omega_k}} e^{ikr} (\hat{c}_k + \hat{c}_{-k}^\dagger), \quad (8.15)$$

и оператора скорости:

$$\hat{u} = v_0 \left(\frac{\hbar}{2\rho_0 \gamma^2} \right)^{1/2} i \sum_k \frac{k}{\sqrt{\Omega_k}} (\hat{c}_k - \hat{c}_{-k}^\dagger) e^{ikr}. \quad (8.16)$$

¹⁾ Индекс 0 у величин ρ_0 и v_0 мы будем опускать там, где это не может вызвать недоразумений.

Подставляя эти операторные выражения в (8.8) и интегрируя по всему объему, занимаемому жидкостью, мы получаем для ее энергии выражение, аналогичное (3.14):

$$\mathcal{E} = \sum_k \hbar \Omega_k \left(N_k + \frac{1}{2} \right).$$

Чтобы проквантовать взаимодействие фононов, следует принять во внимание, что в выражении для плотности энергии (8.1) ангармонические члены имеют двойное происхождение. Во-первых, ангармоническое слагаемое получается при интегрировании по объему вклада (8.6) в плотность кинетической энергии. Соответствующий член в операторе энергии имеет вид¹⁾

$$\frac{1}{2} \int d^3r \hat{u} \hat{\rho}' \hat{u}. \quad (8.17)$$

Это выражение содержит произведения трех операторов $\hat{c}_k + \hat{c}_{-k}^\dagger$ или $\hat{c}_k - \hat{c}_{-k}^\dagger$, т. е. оно соответствует кубическому ангармонизму. Во-вторых, ангармонические слагаемые входят из разложения плотности внутренней энергии по степеням ρ' . Из них наименьший порядок, соответствующий также кубическому ангармонизму, дает член

$$\frac{1}{6} \left(\frac{\partial^3 U}{\partial \rho^3} \right)_0 \rho'^3 = \frac{1}{6} \frac{v_0^2}{\rho_0^2} (2\kappa - 1) \rho'^3. \quad (8.18)$$

Здесь через κ обозначена следующая безразмерная комбинация, характеризующая ангармонизм

$$\kappa = \frac{\rho}{v} \frac{\partial v}{\partial \rho}. \quad (8.19)$$

При нормальном давлении и $T=0$ эта величина равна в гелии II 2,84.

Подставляя в (8.17) и (8.18) выражения (8.15) и (8.16) для $\hat{\rho}'$ и \hat{u} и интегрируя по d^3r , мы получаем для энергии ангармонического взаимодействия третьего

¹⁾ Мы записали его в симметричном виде, чтобы оператор (8.17) получился эрмитовым.

порядка

$$\mathcal{U}_3 = \frac{\rho_0^2}{6} \left(\frac{\hbar}{2\rho_0} \right)^{3/2} v_0^2 \sum_{\substack{k_1 k_2 k_3 \\ k_1 + k_2 + k_3 = 0}} \frac{1}{\sqrt{\Omega_1 \Omega_2 \Omega_3}} \times \\ \times \left[3 (k_1 k_3) k_2 (\hat{c}_{k_1} - \hat{c}_{-k_1}^\dagger) (\hat{c}_{k_2} + \hat{c}_{-k_2}^\dagger) (\hat{c}_{k_3} - \hat{c}_{-k_3}^\dagger) + \right. \\ \left. + k_1 k_2 k_3 (2u - 1) (\hat{c}_{k_1} + \hat{c}_{-k_1}^\dagger) (\hat{c}_{k_2} + \hat{c}_{-k_2}^\dagger) (\hat{c}_{k_3} + \hat{c}_{-k_3}^\dagger) \right]. \quad (8.20)$$

Взаимодействие фононов в гелии II описывается в первом приближении ангармоническим коэффициентом $b(k, k', -k'')$, соответствующим переходу, при котором фононы k и k' , сливаясь, образуют фонон k'' (или же обратному процессу). Это есть коэффициент в (8.20) при произведении операторов $\hat{c}_k \hat{c}_{k'} \hat{c}_{k''}^\dagger$, который, естественно, отличен от нуля, только если выполняется закон сохранения импульса: $k + k' = k''$. Мы имеем из (8.20)

$$b(k, k', -k'') = b^{(I)}(k, k', -k'') + b^{(II)}(k, k', -k''). \quad (8.21)$$

Здесь слагаемое

$$b^{(I)}(k, k', -k'') = v_0^2 [(kk') k'' + (k''k) k' + (k'k'') k] \quad (8.22)$$

происходит от разложения кинетической энергии, а слагаемое

$$b^{(II)}(k, k', -k'') = (2u - 1) v_0^2 k k' k'' \quad (8.23)$$

— от разложения внутренней энергии.

Аналогичным образом можно было бы вычислить ангармоническое слагаемое четвертого порядка в операторе энергии. Оно обусловлено членом

$$\frac{1}{24} \left(\frac{\partial^4 U}{\partial \rho^4} \right)_0 \rho'^4 \quad (8.24)$$

в разложении внутренней энергии по степеням ρ' ; кинетическая энергия вклада в это слагаемое не дает.

Выражение для оператора трехфононных столкновений кинетического уравнения имеет в данном случае знакомый вид (6.24) с тем отличием, что суммирование по различным колебательным ветвям отсутствует. В качестве ангармонических коэффициентов $b(k, k', -k'')$ следует подставить выражение (8.21). Это выражение у-

рощается, когда волновые векторы k, k' и k'' можно считать параллельными. Этот случай для нас будет представлять особый интерес, ибо, как мы увидим ниже (см. § 42), законы сохранения требуют, чтобы волновые векторы фононов, участвующих в трехфононном столкновении, были с достаточной точностью параллельны. Тогда с точностью до членов, пропорциональных малым параметрам (8.3), мы имеем

$$b(k, k', -k'') = 2v_0^2 k k' k'' (u + 1), \quad (8.25)$$

и, следовательно, коэффициент $\beta(k, k', -k'')$, определенный соотношением (6.17), есть

$$\beta(k, k', -k'') = \frac{\pi \hbar v_0}{\rho_0} k k' k'' (u + 1)^2. \quad (8.26)$$

§ 9. Линеаризованный оператор столкновений и его симметрия

Во многих задачах физической кинетики приходится иметь дело с малыми отклонениями от равновесия. Это значит, что функцию распределения фононов можно представить в виде суммы равновесной функции Планка N_0 и малой неравновесной добавки ΔN :

$$N = N_0 + \Delta N. \quad (9.1)$$

Оператор столкновений (6.24) в этом случае можно разложить по малой величине ΔN , ограничившись первым исчезающим членом. Он содержит первую степень ΔN , поскольку при подстановке равновесной функции распределения N_0 оператор столкновений обращается в нуль. Результат действия этого линеаризованного оператора столкновений на ΔN мы будем обозначать $-\hat{I}\Delta N$. Для вычисления оператора \hat{I} нужно подставить (9.1) в (6.24) и удержать линейные по ΔN члены. Это дает

$$-\left[\frac{\partial (N_0 + \Delta N)}{\partial t} \right]_{\text{ст}} = \hat{I}\Delta N = \int d\xi_{k'} \left\{ \sum_{j''} \beta_{jj'j''}(k, k', -k'') \times \right. \\ \times [\Delta N (N'_0 - N''_0) + \Delta N' (N_0 - N''_0) - \Delta N'' (N_0 + N'_0 + \\ \left. + 1)] \delta(\Omega'' - \Omega - \Omega') + \frac{1}{2} \sum_{j''} \beta_{j'j''j}(k', k'', -k) [\Delta N (N'_0 +$$

$$+ N_0''' + 1) + \Delta N' (N_0 - N_0''') + \Delta N''' (N_0 - N_0')] \delta(\Omega - \Omega' - \Omega'''). \quad (9.2)$$

Здесь

$$k'' = k + k' + b, \quad k''' = k - k' + b;$$

векторы обратной решетки b выбираются так, чтобы k'' и k''' принадлежали основной ячейке обратной решетки.

Получим важное свойство симметрии линейризованного оператора фонон-фононных столкновений. А именно: докажем, что в результате его действия на четную (нечетную) функцию $\Delta N(k)$ от волнового вектора k получается, соответственно, четная (нечетная) функция, т. е. что оператор \hat{I} сохраняет четность функции от k , на которую он действует. Чтобы убедиться в этом, запишем выражение (9.2) для $(\hat{I}\Delta N)_{-k}$ и произведем замену переменной интегрирования k' на $-k'$:

$$\begin{aligned} (\hat{I}\Delta N)_{-k} = & \int_{\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} d\xi_{k'} \left\{ \sum_{j''} \beta_{j'j''}(-k, -k', k'') [\Delta N(-k)(N_0' - N_0'') + \Delta N(-k')(N_0 - N_0'') - \Delta N(-k'')(N_0 + N_0' + 1)] \delta(\Omega'' - \Omega - \Omega') + \frac{1}{2} \sum_{j'''} \beta_{j'j'''}(-k', -k''', k) \times \right. \\ & \times [\Delta N(-k)(N_0' + N_0''' + 1) + \Delta N(-k')(N_0 - N_0''') + \Delta N(-k''')(N_0 - N_0')] \delta(\Omega - \Omega' - \Omega''') \}. \quad (9.3) \end{aligned}$$

Здесь мы учли, что в силу соотношений $\Omega_j(k) = \Omega_j(-k)$ операция замены k на $-k$ не меняет равновесных функций распределения. Если воспользоваться соотношениями (7.12) и (7.13), то из (9.3) вытекает, что линейризованный оператор фонон-фононных столкновений сохраняет четность неравновесной добавки к фононной функции распределения.

Оператор \hat{I} имеет собственную функцию

$$CN_0(N_0 + 1)\Omega, \quad (9.4)$$

соответствующую нулевому собственному значению

(C — постоянная). В том, что оператор (9.2) при действии на функцию (9.4) дает нуль, можно убедиться непосредственно. Однако проще это сделать с помощью следующих физических рассуждений. Оператор (6.24) обращается в нуль функцией Планка при любом значении температуры T . Придадим температуре малое приращение ΔT . Соответственно, функция распределения должна измениться на малую величину

$$\Delta N = -N_0(N_0 + 1) \frac{\hbar\Omega}{T^2} \Delta T.$$

Но поскольку полный оператор столкновений (6.24) обращается в нуль функцией Планка как при температуре T , так и при температуре $T + \Delta T$, линейризованный оператор столкновений должен обращаться в нуль функцией (9.4), которая представляет собой приращение равновесной функции распределения при малом изменении температуры $\Delta T = -CT^2/\hbar$.

Линейризованный оператор столкновений приобретает особенно простой вид, если вместо величины ΔN ввести функцию y с помощью соотношения

$$\Delta N = N_0(N_0 + 1)y. \quad (9.5)$$

Обозначая результат действия линейризованного оператора столкновений на функцию y посредством $\hat{J}y$, имеем, подставляя (9.5) в (9.2)

$$\begin{aligned} \hat{I}N_0(N_0 + 1)y & \equiv \hat{J}y = \\ & = \int d\xi_{k'} \left\{ \sum_{j''} \beta_{j'j''}(k, k', -k'')(N_0 + 1)(N_0' + 1)N_0'' \times \right. \\ & \times \delta(\Omega'' - \Omega - \Omega')(y' + y - y'') + \frac{1}{2} \sum_{j'''} \beta_{j'j'''}(k', k''', -k) \times \\ & \times (N_0 + 1)N_0'N_0''' \delta(\Omega - \Omega' - \Omega''')(y - y' - y'''). \quad (9.6) \end{aligned}$$

Убедимся в одном важном свойстве оператора \hat{J} , а именно в том, что он симметричен. Это значит, что для любых двух функций $x(k, j)$ и $y(k, j)$ должно выполняться соотношение

$$\int d\xi_k x \hat{J}y = \int d\xi_k y \hat{J}x. \quad (9.7)$$

Мы имеем

$$\int d\xi_k x \hat{J} y = \int d\xi_k \int d\xi_{k'} x \left\{ \sum_{j''} \beta_{jj''j''}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', -\mathbf{k}'') \times \right. \\ \times (N_0 + 1)(N'_0 + 1) N_0'' \delta(\Omega'' - \Omega' - \Omega)(y + y' - y'') + \\ \left. + \frac{1}{2} \sum_{j'''} \beta_{j'j''j'''}(\mathbf{k}', \mathbf{k}''', -\mathbf{k})(N_0 + 1) N'_0 N_0'' \times \right. \\ \left. \times \delta(\Omega - \Omega' - \Omega''') (y - y' - y''') \right\}. \quad (9.8)$$

В произведениях вида xy' , xy'' и xy''' в фигурных скобках нужно проделать замену переменных суммирования и интегрирования, в результате которой величины y' , y'' , y''' должны перейти в y .

Начнем с преобразования слагаемого в первом члене, содержащего xy' . Замена переменных суммирования и интегрирования $j \rightleftharpoons j'$, $\mathbf{k} \rightleftharpoons \mathbf{k}'$ приводит его к виду

$$\int d\xi_k \int d\xi_{k'} \sum_{j''} \beta_{jj''j''}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', -\mathbf{k}'') \delta(\Omega'' - \Omega - \Omega') \times \\ \times (N_0 + 1)(N'_0 + 1) N_0'' x' y.$$

Слагаемое, содержащее произведение xy'' , преобразуется после замены переменных $j'' \rightarrow j$, $\mathbf{k}'' \rightarrow \mathbf{k}$; $j \rightarrow j'''$, $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}'''$ к виду

$$\int d\xi_k \int d\xi_{k'} \sum_{j'''} \beta_{j'j''j'''}(\mathbf{k}', \mathbf{k}''', -\mathbf{k}) \times \\ \times \delta(\Omega - \Omega' - \Omega''') (N_0 + 1) N'_0 N_0'' x'' y.$$

Коэффициенты $\beta_{j'j''j'''}(\mathbf{k}', \mathbf{k}''', -\mathbf{k})$ симметричны относительно перестановки переменных \mathbf{k}' , j' и \mathbf{k}''' , j''' , так что это выражение переписывается в виде

$$\frac{1}{2} \int d\xi_k \int d\xi_{k'} \sum_{j'''} \beta_{j'j''j'''}(\mathbf{k}', \mathbf{k}''', -\mathbf{k}) \delta(\Omega - \\ - \Omega' - \Omega''') (N_0 + 1) N'_0 N_0'' (x' + x''') y.$$

Аналогичным образом, с помощью переобозначения переменных суммирования и интегрирования $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}''$, $j \rightarrow j''$; $\mathbf{k}' \rightarrow \mathbf{k}$, $j' \rightarrow j$; $\mathbf{k}''' \rightarrow \mathbf{k}'$, $j''' \rightarrow j'$ получаем тождество

$$\frac{1}{2} \int d\xi_k \int d\xi_{k'} \sum_{j''} \beta_{jj''j''}(\mathbf{k}', \mathbf{k}'', -\mathbf{k})(N_0 + 1) \times \\ \times N'_0 N_0'' x (y' + y'') \delta(\Omega - \Omega' - \Omega'') =$$

$$= \int d\xi_k \int d\xi_{k'} \sum_{j''} \beta_{jj''j''}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', -\mathbf{k}'') (N_0 + 1) \times \\ \times (N'_0 + 1) N_0'' x'' y \delta(\Omega'' - \Omega - \Omega').$$

Собирая все выписанные члены, находим, что их сумма есть $\int d\xi_k y \hat{J} x$. Тем самым симметричность оператора доказана.

Не составляет труда убедиться, что собственная функция оператора \hat{J} , соответствующая нулевому собственному значению, есть (с точностью до постоянного множителя) частота фонона $\Omega_j(\mathbf{k})$.

Обратимся теперь к оператору рассеяния фононов дефектами решетки. Соответствующий линейризованный оператор получается из общего выражения (7.10) непосредственно и имеет вид

$$\hat{\Lambda} N = n_d \int d\xi_k \{ [G(\mathbf{k}, j; \mathbf{k}', j') (N_0 + 1) - \\ - G(\mathbf{k}', j'; \mathbf{k}, j) N_0] \Delta N - [G(\mathbf{k}', j'; \mathbf{k}, j) (N_0 + 1) - \\ - G(\mathbf{k}, j; \mathbf{k}', j') N_0] \Delta N' \} \delta(\Omega - \Omega'). \quad (9.9)$$

Полный линейризованный оператор столкновений есть сумма выражений (9.2) и (9.9).

Выражение (9.9) заметно упрощается, если благодаря симметрии кристалла или же тому, что для расчета вероятностей достаточно борновское приближение, величины $G(\mathbf{k}, j; \mathbf{k}', j')$ удовлетворяют соотношению (7.6), т. е. симметричны относительно перестановки пар аргументов \mathbf{k} , j и \mathbf{k}' , j' . В этом случае

$$\hat{\Lambda} N = n_d \int d\xi_k G(\mathbf{k}', j'; \mathbf{k}, j) \delta(\Omega - \Omega') (\Delta N - \Delta N'). \quad (9.10)$$

Переход от оператора \hat{I} , действующего на добавку ΔN , к оператору \hat{J} , действующему на функцию $y = \Delta N / N_0 (N_0 + 1)$, совершается в выражениях (9.9) и (9.10) тривиальным образом.

Оператор (9.9), вообще говоря, не сохраняет четности функции $\Delta N(\mathbf{k})$, на которую он действует. Это значит, что при его действии на четную или нечетную функцию \mathbf{k} получается функция неопределенной чет-

ности относительно замены k на $-k$. Оператор же (9.10) подобно оператору (9.2) сохраняет четность функции, на которую действует.

Аналогичным образом, оператор (9.10) является симметричным, что легко проверить непосредственно. Оператор же (9.9), вообще говоря, не симметричен, т. е. соотношения типа (9.7) при произвольных функциях $X(k, j)$ и $Y(k, j)$ не имеют места¹⁾. Однако он обладает свойством, которое можно назвать *обобщенной симметрией*: если обе функции $X(k, j)$ и $Y(k, j)$ одновременно четны (или же одновременно нечетны) относительно замены k на $-k$, то в классе таких функций имеет место соотношение, аналогичное (9.7):

$$\int d\xi_k X \hat{I} Y = \int d\xi_k Y \hat{I} X. \quad (9.11)$$

Чтобы убедиться в его справедливости, выпишем в явном виде интеграл в левой части:

$$\int d\xi_k X \hat{I} Y = n_d \int d\xi_k \int d\xi_{k'} \{ [G(k, j; k', j') (N_0 + 1) - G(k', j'; k, j) N_0] XY - [G(k', j'; k, j) (N_0 + 1) - G(k, j; k', j') N_0] XY' \} \delta(\Omega - \Omega').$$

Переобозначая во втором члене переменные интегрирования $k, j \rightleftharpoons k', j'$, переписываем это выражение в виде

$$n_d \int d\xi_k \int d\xi_{k'} \{ [G(k, j; k', j') (N_0 + 1) - G(k', j'; k, j) N_0] X(k, j) Y(k, j) - [G(k, j; k', j') (N_0 + 1) - G(k', j'; k, j) N_0] \times X(k', j') Y(k, j) \} \delta(\Omega - \Omega').$$

Принимая далее во внимание теорему взаимности (7.5) и заменяя переменные интегрирования k и k' соответ-

¹⁾ Эти функции обозначаются прописными буквами, чтобы отличить их от функций x и y , на которые действует оператор \hat{I} .

ственно на $-k$ и $-k'$, мы получаем

$$n_d \int d\xi_k \int d\xi_{k'} \{ [G(k, j; k', j') (N_0 + 1) - G(k', j'; k, j) N_0] X(k, j) Y(k, j) - [G(k', j'; k, j) (N_0 + 1) - G(k, j; k', j') N_0] \times X(-k', j') Y(-k, j) \} \delta(\Omega - \Omega').$$

Если функции X и Y обладают определенной четностью относительно замены k на $-k$, то это выражение совпадает с правой частью (9.11), т. е. обобщенная симметрия оператора (9.9) доказана.

Объясним в заключение, почему оказалось, что линейаризованный оператор фонон-фононных столкновений (9.2) симметричен в обычном смысле, в то время как оператор рассеяния на примесях (9.9) обладает в общем случае только обобщенной симметрией. Дело в том, что вероятности фонон-фононных столкновений вычислялись в § 6 в наинизшем приближении теории возмущений. Поэтому оператор (9.2) обладает такой симметрией, какую оператор столкновений с примесями имеет при условии применимости борновского приближения (выражение (9.10)).

§ 10. Время и длина свободного пробега фононов

В кинетике часто используется понятие *времени свободного пробега* фонона τ . Это характерное время между двумя актами рассеяния фонона.

Фактически понятием времени свободного пробега фононов мы уже пользовались в § 6, когда формулировали условие (6.2), где фигурировало время τ между двумя столкновениями. Умножив эту величину на групповую скорость фонона, мы получим так называемую *длину свободного пробега*

$$l = g\tau. \quad (10.1)$$

Обе эти величины часто применяются при порядковых оценках кинетических коэффициентов, анализе их зависимости от температуры и оценках относительной роли вкладов от различных механизмов рассеяния. Очевидно, по самому своему смыслу время и длина свободного

пробега определяются не точно, а по порядку величины. Проще всего получить выражение для длины свободного пробега l , если она обусловлена рассеянием фононов дефектами решетки. Если концентрация дефектов есть n_d , то

$$l = 1/n_d \sigma, \quad (10.2)$$

где σ — сечение рассеяния фонона дефектом. Для коротковолновых фононов мы получаем отсюда (см. (7.14))

$$l = \bar{a} n / n_d \approx 1/n_d \bar{a}^2, \quad (10.3)$$

в то время как для длинноволновых акустических фононов мы имеем (см. (7.29))

$$l = \bar{a} \frac{n}{n_d} \left(\frac{\Omega_D}{\Omega} \right)^4. \quad (10.4)$$

Таким образом, длина свободного пробега длинноволновых акустических фононов обратно пропорциональна четвертой степени их частоты.

Длина свободного пробега этих фононов, связанная с изотопическим рассеянием, также оказывается обратно пропорциональной Ω^4 . Для нее получается оценка (см. (7.23))

$$l = \bar{a} \frac{\bar{M}^2}{\Delta M^2} \left(\frac{\Omega_D}{\Omega} \right)^4. \quad (10.5)$$

Понятиями длины (и времени) свободного пробега фононов пользуются также для описания взаимодействия фононов, обусловленного решеточным ангармонизмом. Такое понятие можно надеяться ввести однозначным образом при высоких температурах ($T \gg \Theta$), когда вероятности нормальных процессов и процессов переброса не различаются по порядку величины.

Для вычисления характерного времени τ_{kj} между двумя актами рассеяния фонона в состоянии (k, j) воспользуемся следующим приемом. Рассмотрим изолированную фононную систему, которая в некоторый начальный момент времени находится в таком состоянии: функция распределения фононов (k, j) есть $N_0 + \Delta N$; функция распределения всех прочих колебательных состояний равновесна.

Отклонение ΔN убывает со временем вследствие столкновений: τ_{kj} и есть то характерное время, за которое относительное изменение ΔN оказывается порядка единицы. Для оценки этого времени можно воспользоваться выражением (9.2) для линейризованного оператора столкновений, где следует положить $\Delta N' = \Delta N'' = \Delta N''' = 0$; это дает

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau_{kj}} = & \int d\xi_{k'} \left[\sum_{j''} \beta_{jj'j''}(k, k', -k'') (N'_0 - N''_0) \times \right. \\ & \times \delta(\Omega'' - \Omega - \Omega') + \frac{1}{2} \sum_{j'''} \beta_{j'j''j'''}(k', k''', -k) \times \\ & \left. \times (N'_0 + N''_0 + 1) \delta(\Omega - \Omega' - \Omega'') \right]. \quad (10.6) \end{aligned}$$

Чтобы это выражение было отлично от нуля, аргумент по крайней мере одной из двух δ -функций должен обращаться в нуль в определенной области значений k . При оценках мы будем предполагать вид фононных законов дисперсии таким, что это имеет место¹⁾.

Оценим время τ_{kj} в случае $T \gg \Theta$. Тогда для равновесной функции N_0 можно воспользоваться приближением: $N_0 = T/\hbar\Omega$. Вычисляя в этом приближении разность $N'_0 - N''_0$, получаем с учетом закона сохранения энергии

$$N'_0 - N''_0 = \frac{T}{\hbar} \left(\frac{1}{\Omega'} - \frac{1}{\Omega''} \right) = \frac{T}{\hbar} \frac{\Omega}{\Omega' \Omega''}.$$

Вычисляя аналогичным образом сумму $N'_0 + N''_0$ и пренебрегая по сравнению с ней единицей, приводим (10.6) к виду

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau_{kj}} = & \frac{\Omega T}{\hbar} \int d\xi_{k'} \left[\sum_{j''} \beta_{jj'j''}(k, k', -k'') \Omega'^{-1} \Omega''^{-1} \times \right. \\ & \times \delta(\Omega + \Omega' - \Omega'') + \frac{1}{2} \sum_{j'''} \beta_{j'j''j'''}(k', k''', -k) \Omega'^{-1} \Omega'''^{-1} \times \\ & \left. \times \delta(\Omega - \Omega' - \Omega''') \right]. \quad (10.7) \end{aligned}$$

¹⁾ Поведение времени τ в тех случаях, когда аргументы δ -функций в нуль не обращаются (или обращаются в anomalно малой области k -пространства), будет исследовано в §§ 34, 35.

Если в интеграле по d^3k' перейти к интегрированию по углам и по длине вектора k' и воспользоваться оценкой (6.11) и соотношением (6.17), то можно убедиться, что подынтегральное выражение стремится к нулю при $k' \rightarrow 0$. Отсюда явствует, что в интеграле (10.7) существенны k' порядка предельного значения k_0 .

Дальнейшие оценки удобно произвести по отдельности для интеграла от каждого из двух слагаемых в квадратных скобках в (10.7). Интеграл от первого слагаемого приводится к виду

$$\frac{\Omega T}{\hbar} \sum_{j', j''} \int \frac{dS_1}{(2\pi)^3} \frac{\beta_{jj'j''}(k, k', -k'')}{\Omega_{j'}(k') \Omega_{j''}(k+k')} \times \\ \times \left| \frac{\partial}{\partial k'} [\Omega_{j'}(k') - \Omega_{j''}(k+k')] \right|^{-1},$$

где dS_1 — элемент поверхности в k' -пространстве, определяемой уравнением

$$\Omega_j(k) + \Omega_{j'}(k') - \Omega_{j''}(k+k') = 0;$$

производная в знаменателе подынтегрального выражения вычисляется на этой поверхности.

Пусть нам нужно оценить время τ_{kj} при значениях k , которые также порядка k_0 . Тогда (6.17) вместе с (6.10) дает

$$\beta_{jj'j''} \simeq \bar{v} \hbar / M,$$

производная в знаменателе подынтегрального выражения имеет порядок \bar{v} , фоновые частоты в знаменателе дают по порядку величины множитель Ω_D^{-2} и, наконец, интегрирование по dS_1 дает порядковый множитель k_0^2 .

Интеграл от второго слагаемого в (10.7) оценивается аналогичным образом. В итоге получаем

$$\frac{1}{\tau} = \frac{T}{M \bar{v}} \bar{a}^{-1}. \quad (10.8)$$

Отсюда длина свободного пробега коротковолновых фо-

1) Из сказанного вытекает простое правило оценки выражений, содержащих δ -функции от алгебраической суммы фоновых частот под знаком интеграла. При оценке δ -функцию следует считать равной по порядку величины обратной характерной фоновой частоте (в нашем случае: $1/\Omega_D$).

нонов (с групповой скоростью порядка \bar{v})

$$l = \frac{M \bar{v}^2}{T} \bar{a}. \quad (10.9)$$

Таким образом, отношение $\bar{l} \bar{a}$ есть большой параметр $M \bar{v}^2 / T$, обратно пропорциональный малому параметру решеточного ангармонизма (6.35).

При низких температурах $T \ll \Theta$ имеются два типа фон-фонных столкновений — нормальные процессы и процессы переброса, поэтому нельзя ввести единого времени свободного пробега. В этом разделе мы ограничимся вычислением времени свободного пробега по отношению к нормальным процессам, τ_N . В соответствующую вероятность вносят вклад только нормальные столкновения акустических фононов (функция распределения оптических экспоненциально мала). Воспользовавшись соотношением (6.44), мы можем написать для величин $\beta_{aa'a''}$:

$$\beta_{aa'a''}(k, k', -k'') = \frac{\hbar \bar{v}}{\rho} k k' k'' \tilde{\beta}_{aa'a''}(\kappa, \kappa', -\kappa''),$$

где $\tilde{\beta}_{aa'a''}$ — безразмерная функция от направлений волновых векторов, по порядку величины равная единице. В итоге из (10.6) получается следующее выражение для $1/\tau_N$:

$$\frac{1}{\tau_N} = \frac{\hbar}{\rho \bar{v}} \sum_{a'} \int \frac{d^3k'}{(2\pi)^3} \left[k k' k'' \sum_{a''} \tilde{\beta}_{aa'a''} (N'_0 - N''_0) \delta(\Omega'' - \Omega - \Omega') + \frac{1}{2} k k' k''' \sum_{a''} \tilde{\beta}_{aa'a''} (N'_0 + N''_0 + 1) \times \right. \\ \left. \times \delta(\Omega - \Omega' - \Omega'') \right]. \quad (10.10)$$

Функции Планка под знаком интеграла убывают экспоненциально при $\hbar \Omega \gg T$, т. е. при $k \gg k_T$. Здесь

$$k_T = T / \hbar \bar{v} \quad (10.11)$$

порядка максимального волнового вектора акустических фононов, которые возбуждены при данной температуре T . Основной вклад в интеграл (10.10) дают k' порядка k_T .

При оценке времени $\tau_N(k, a)$ будем считать волновой вектор фонона (k, a) тоже порядка k_T . Далее при оценке действуем так же, как и в случае $T \gg \Theta$. Интегрирова-

ние по площади S_1 дает теперь порядковый множитель k_T^2 , и в итоге мы получаем

$$\frac{1}{\tau_N} = \frac{T^5}{\rho \hbar^4 v^5}. \quad (10.12)$$

Таким образом, при $T \ll \Theta$ время свободного пробега по отношению к нормальным процессам обратно пропорционально T^5 .

Необходимо отметить, что имеется принципиальное различие между выражениями для длины (или времени) свободного пробега за счет рассеяния на дефектах или изотопах (10.4) и (10.5), с одной стороны, и рассеяния на фононах (10.8) и (10.12) — с другой.

Выражения (10.4) и (10.5) описывают частотную зависимость длины свободного пробега, т. е. их можно применять для описания скорости релаксации фононов различной частоты.

Выражения (10.8) и (10.12) относятся к фононам определенной частоты — так называемым *тепловым фононам*. Частоты тепловых фононов — это максимальные фононные частоты, которые возбуждены при данной температуре. При $T \gtrsim \Theta$ — это предельные фононные частоты порядка Ω_D ; при $T \ll \Theta$ — это частоты порядка T/\hbar . Соответственно, характерные значения фононных волновых векторов в первом случае порядка k_0 , а во втором — порядка k_T .

Что же касается зависимости характерного времени фонон-фононных столкновений от частоты при частотах меньших, чем тепловые, то этот вопрос, как уже говорилось, будет рассмотрен в §§ 33—35.

§ 11. Законы сохранения энергии и возрастания энтропии системы фононов. Кинетические коэффициенты и соотношения их симметрии

Энергия системы фононов, находящихся в стационарных внешних условиях, должна сохраняться. Получим из кинетического уравнения закон сохранения энергии в дифференциальной форме.

Для этого умножим кинетическое уравнение (6.1) на $\hbar\Omega$ и проинтегрируем по $d\xi_k$. Интеграл от $\partial N/\partial t$ даст

$\partial U/\partial t$, где

$$U = \int d\xi_k \hbar\Omega N \quad (11.1)$$

есть (с точностью до слагаемого, не зависящего от N) плотность энергии системы фононов.

Интеграл по $d\xi_k$ от разности второго и третьего членов преобразуем, представив эту разность в виде

$$\frac{\partial}{\partial r_i} \Omega \frac{\partial \Omega}{\partial k_i} N - \frac{\partial}{\partial k_i} \Omega \frac{\partial \Omega}{\partial r_i} N. \quad (11.2)$$

Интеграл от второго слагаемого можно представить в виде поверхностного интеграла в \mathbf{k} -пространстве, взятого по поверхности \mathcal{S}_k , ограничивающей основную ячейку обратной решетки:

$$\oint d\mathcal{S}_k v \Omega \frac{\partial \Omega}{\partial r} N,$$

где $d\mathcal{S}_k$ — элемент этой поверхности, \mathbf{v} — внешняя нормаль к ней. Рассмотрим интегралы, взятые по паре противоположных граней основной ячейки обратной решетки, параллельных друг другу. Функции Ω и N суть периодические функции квазиволнового вектора \mathbf{k} с периодом обратной решетки, поэтому произведения трех последних сомножителей в подынтегральном выражении в соответствующих точках пары противоположных граней равны друг другу. Векторы же внешних нормалей направлены антипараллельно друг другу. Таким образом, интегралы по каждой паре противоположных граней в сумме дадут нуль, так что и весь интеграл окажется равным нулю.

Интеграл по $d\xi_k$ от первого слагаемого в (11.2) равен $\text{div } G^{(\Phi)}$, где

$$G^{(\Phi)} = \int d\xi_k \hbar\Omega \frac{\partial \Omega}{\partial \mathbf{k}} N. \quad (11.3)$$

Наконец, интеграл по $d\xi_k$ от оператора фонон-фононных столкновений, умноженного на $\hbar\Omega$, равен нулю. Это утверждение естественно с физической точки зрения: интеграл описывает изменение энергии системы фононов вследствие их столкновений; для замкнутой системы оно должно быть равно нулю. Мы, однако, проверим его непосредственно, воспользовавшись явным выражением (6.24) для оператора фонон-фононных столкновений.

Для полного изменения плотности энергии фононной системы вследствие столкновений имеем

$$\begin{aligned} \left[\frac{\partial U}{\partial t} \right]_{\text{ст}} &= \int d\xi_k \hbar \Omega \left[\frac{\partial N}{\partial t} \right]_{\text{ст}} = \\ &= \int d\xi_k \int d\xi_{k'} \hbar \Omega \left\{ \sum_{j''} \beta_{jj''} (\mathbf{k}, \mathbf{k}', -\mathbf{k}'') [N''(N+1)(N'+1) - \right. \\ &\quad \left. - (N''+1)NN'] \delta(\Omega + \Omega' - \Omega'') + \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} \sum_{j'''} \beta_{j'j'''} (\mathbf{k}', \mathbf{k}''', -\mathbf{k}) [(N+1)N'N''' - \right. \\ &\quad \left. - (N'+1)(N'''+1)N] \delta(\Omega - \Omega' - \Omega''') \right\}. \quad (11.4) \end{aligned}$$

Воспользуемся симметрией первого слагаемого относительно перестановки аргументов \mathbf{k}, j и \mathbf{k}', j' и заменим частоту Ω в этом слагаемом полусуммой $(\Omega' + \Omega)/2$, которая в силу закона сохранения энергии, выражаемого δ -функцией, равна $\Omega''/2$. С учетом этого перепишем (11.4) в виде

$$\begin{aligned} \frac{\hbar}{2} \int d\xi_k \int d\xi_{k'} \left\{ \sum_{j''} \beta_{jj''} (\mathbf{k}, \mathbf{k}', -\mathbf{k}'') \times \right. \\ \times \Omega'' [N''(N'+1)(N+1) - (N''+1)NN'] \delta(\Omega + \Omega' - \\ - \Omega'') + \Omega \sum_{j'''} \beta_{j'j'''} (\mathbf{k}', \mathbf{k}''', -\mathbf{k}) [(N+1)N'N''' - \\ \left. - (N'+1)(N'''+1)N] \delta(\Omega - \Omega' - \Omega''') \right\}. \end{aligned}$$

Произведем во втором слагаемом переобозначение переменных суммирования и интегрирования: $\mathbf{k}, j \rightarrow \mathbf{k}'', j''$; $\mathbf{k}''', j''' \rightarrow \mathbf{k}', j'$ и, соответственно, $\mathbf{k}', j' \rightarrow \mathbf{k}, j$. После такого переобозначения оказывается, что второе слагаемое в фигурных скобках знаком отличается от первого, так что в сумме они дадут нуль. Мы доказали, таким образом, что

$$\int d\xi_k \hbar \Omega \left[\frac{\partial N}{\partial t} \right]_{\text{ст}} = 0. \quad (11.5)$$

Это утверждение сохраняет силу и в том случае, если помимо рассеяния, обусловленного решеточным ангармонизмом, играет роль также рассеяние фононов дефектами решетки. Действительно, в этом случае, наряду с (11.4),

надо рассмотреть также выражение

$$\begin{aligned} n_d \int d\xi_k \hbar \Omega \int d\xi_{k'} [G(\mathbf{k}', j'; \mathbf{k}, j) N'(N+1) - \\ - G(\mathbf{k}, j; \mathbf{k}', j') N(N'+1)] \delta(\Omega - \Omega'). \end{aligned}$$

Чтобы убедиться, что оно равно нулю, достаточно во втором слагаемом сделать замену переменных интегрирования $\mathbf{k}, j \rightleftharpoons \mathbf{k}', j'$.

Таким образом, дифференциальная форма закона сохранения энергии системы фононов есть

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \text{div } \mathbf{G}^{(\Phi)} = 0. \quad (11.6)$$

Вектор $\mathbf{G}^{(\Phi)}$ представляет собой плотность потока энергии, переносимой фононами.

Как известно, любая изолированная физическая система, находящаяся первоначально в неравновесном состоянии, приходит в состояние термодинамического равновесия. При этом энтропия ее возрастает. Получим закон возрастания энтропии для системы фононов.

Энтропия фононной системы есть (см. § 4)

$$\mathcal{P} = \int d^3r S(\mathbf{r}), \quad S(\mathbf{r}) = \int d\xi_k \sigma(N), \quad (11.7)$$

где $S(\mathbf{r})$ — плотность энтропии,

$$\sigma(N) = (N+1) \ln(N+1) - N \ln N. \quad (11.8)$$

Вычисляя производную по времени от S , имеем

$$\dot{S} = \int d\xi_k \frac{\partial \sigma}{\partial N} \dot{N}.$$

Подставляя сюда \dot{N} из кинетического уравнения (6.4), получаем

$$\dot{S} = \int d\xi_k \frac{\partial \sigma}{\partial N} \left\{ -\frac{\partial \Omega}{\partial \mathbf{k}} \frac{\partial N}{\partial \mathbf{r}} + \frac{\partial \Omega}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial N}{\partial \mathbf{k}} + \left[\frac{\partial N}{\partial t} \right]_{\text{ст}} \right\}.$$

Это выражение удобно переписать в следующем виде:

$$\dot{S} = \int d\xi_k \left\{ \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} \left(\sigma \frac{\partial \Omega}{\partial \mathbf{r}} \right) - \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \left(\sigma \frac{\partial \Omega}{\partial \mathbf{k}} \right) + \frac{\partial \sigma}{\partial N} \left[\frac{\partial N}{\partial t} \right]_{\text{ст}} \right\}.$$

Интеграл от первого слагаемого равен нулю в силу тех же соображений, по которым обращается в нуль интеграл

от второго слагаемого в (11.2). Второе слагаемое можно представить в виде $-\operatorname{div} \mathbf{s}$, где \mathbf{s} есть плотность потока энтропии, равная

$$\mathbf{s} = \int d\xi_k \frac{\partial \Omega}{\partial k} \sigma(N). \quad (11.9)$$

В итоге закон изменения плотности энтропии можно записать в следующей дифференциальной форме:

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{s} = \left[\frac{\partial S}{\partial t} \right]_{\text{ст}}, \quad (11.10)$$

где изменение плотности энтропии вследствие столкновений

$$\left[\frac{\partial S}{\partial t} \right]_{\text{ст}} = \int d\xi_k \frac{\partial \sigma}{\partial N} \left[\frac{\partial N}{\partial t} \right]_{\text{ст}}. \quad (11.11)$$

Подставляя в (11.11) выражение (6.24) для оператора фонон-фононных столкновений, имеем

$$\begin{aligned} \left[\frac{\partial S}{\partial t} \right]_{\text{ст}} = & \int d\xi_k \ln \frac{N+1}{N} \int d\xi_{k'} \left\{ \sum_{j''} \beta_{jj'j''} (k, k', -k'') \times \right. \\ & \times [(N+1)(N'+1)N'' - NN'(N''+1)] \delta(\Omega + \Omega' - \Omega'') + \\ & + \frac{1}{2} \sum_{j''} \beta_{j'j''j} (k', k'', -k) [(N+1)N'N'' - \\ & \left. - N(N'+1)(N''+1)] \delta(\Omega - \Omega' - \Omega'') \right\}. \quad (11.12) \end{aligned}$$

Преобразуем это выражение тем же способом, каким выше преобразовывали выражение для $[\partial U / \partial t]_{\text{ст}}$. А именно: первое слагаемое в (11.12) симметризуем относительно аргументов k, j и k', j' , а во втором произведем переобозначение переменных суммирования и интегрирования: $k', j' \rightarrow k, j$; $k, j \rightarrow k'', j''$; $k'', j'' \rightarrow k', j'$. В итоге (11.12) приводится к следующему виду:

$$\begin{aligned} \left[\frac{\partial S}{\partial t} \right]_{\text{ст}} = & \frac{1}{2} \int d\xi_k \int d\xi_{k'} \beta_{jj'j''} (k, k', -k'') \times \\ & \times f [(N+1)(N'+1)N'', NN'(N''+1)] \times \\ & \times \delta(\Omega + \Omega' - \Omega''), \quad (11.13) \end{aligned}$$

где

$$f(x, y) = (x - y) \ln \frac{x}{y}. \quad (11.14)$$

Интегрируя уравнение (11.10) по всему объему с учетом того, что для изолированной системы поток энтропии через поверхность равен нулю, находим полную скорость изменения энтропии

$$\frac{d\mathcal{P}}{dt} = \int d^3r \left[\frac{\partial S}{\partial t} \right]_{\text{ст}}. \quad (11.15)$$

Поскольку функция $f(x, y)$ остается неотрицательной при любых значениях своих аргументов и обращается в нуль лишь при $x = y$, выражение (11.15) тоже должно быть неотрицательным.

Утверждение, что величина (11.15) может только возрастать или, в крайнем случае, оставаться постоянной, носит название *H-теоремы* Больцмана¹⁾. Саму величину S , взятую с обратным знаком, можно назвать *H-функцией* системы фононов (по аналогии с соответствующей величиной, введенной Л. Больцманом для газа молекул, испытывающих парные столкновения). *H-функция* остается постоянной, т. е. энтропия системы не возрастает, если функция распределения фононов тождественно удовлетворяет условию

$$\frac{(N+1)(N'+1)N''}{NN'(N''+1)} = 1, \quad (11.16)$$

если фононные частоты связаны соотношением

$$\Omega + \Omega' = \Omega''.$$

Можно убедиться, что единственная функция, удовлетворяющая этому условию, есть равновесная функция Планка, так что энтропия остается постоянной лишь для фононной системы, находящейся в равновесии.

Изолированная система фононов в неравновесном состоянии обладает *механической энергией*. Это означает, что за счет процессов, происходящих в самой системе, может производиться механическая работа над внешними телами. Вообще говоря, величина совершенной работы зависит от того, каким именно образом изменяется состояние системы. Механической энергией системы пазывается максимальная работа, которую она может совершить, переходя в состояние термодинамического равновесия.

¹⁾ Соответствующее утверждение для системы фононов было доказано Пайерлсом (R. Peierls, 1929).

Как известно из термодинамики¹⁾, механическая энергия системы равна

$$\mathcal{E}_m = \mathcal{U} - \mathcal{U}_0(\mathcal{P}), \quad (11.17)$$

где \mathcal{U} есть полная внутренняя энергия системы:

$$\mathcal{U} = \int U d^3r = \int d^3r \int d\xi_k \hbar \Omega N,$$

а $\mathcal{U}_0(\mathcal{P})$ — энергия системы в состоянии термодинамического равновесия, выраженная через энтропию системы неравновесных фононов \mathcal{P} по формулам равновесной термодинамики²⁾.

Вычислим производную по времени от механической энергии (11.17):

$$\frac{d\mathcal{E}_m}{dt} = \frac{d\mathcal{U}}{dt} - \frac{\partial \mathcal{U}_0}{\partial \mathcal{P}} \frac{d\mathcal{P}}{dt} = \frac{d\mathcal{U}}{dt} - T_0 \frac{d\mathcal{P}}{dt},$$

где $T_0(\mathcal{P})$ — температура равновесной системы, энтропия которой равна \mathcal{P} . Первое слагаемое в правой части равно нулю, так как полная энергия изолированной системы сохраняется. Подставляя второе слагаемое из (11.15), получаем

$$\frac{d\mathcal{E}_m}{dt} = -T_0 \dot{\mathcal{P}} = -T_0 \int d^3r \left[\frac{\partial S}{\partial t} \right]_{\text{ст}}. \quad (11.18)$$

Таким образом, механическая энергия замкнутой системы, в отличие от ее полной энергии, не сохраняется. По мере того как в системе происходят *релаксационные процессы*, стремящиеся привести эту систему в состояние равновесия, ее механическая энергия убывает или, как говорят, *диссипирует*. Выражение (11.18) и описывает скорость диссипации энергии системы неравновесных фононов вследствие процессов релаксации, обусловленных фононными столкновениями.

Специальный интерес представляет тот случай, когда состояние системы слабо отличается от равновесного с температурой T . В этом случае можно пренебречь различием между T и T_0 и написать

$$\frac{d\mathcal{E}_m}{dt} = -T \dot{\mathcal{P}}. \quad (11.19)$$

¹⁾ См. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Статистическая физика, ч. I. — М.: Наука, 1976, с. 74.

²⁾ Энергии \mathcal{U} и \mathcal{U}_0 берутся при одинаковом объеме системы \mathcal{V} .

Фононную функцию распределения при этом можно представить в виде (9.1). Для того чтобы вычислить механическую энергию, подставим (9.1) в (11.17). Это даст

$$\mathcal{E}_m = \int d^3r \int d\xi_k \hbar \Omega \Delta N - T \Delta \mathcal{P},$$

где $\Delta \mathcal{P} = \mathcal{P} - \mathcal{P}_0$ — есть разность между энтропией фононной системы и ее равновесным значением \mathcal{P}_0 . Считая эту разность малой, мы заменили в (11.19) функцию $T_0(\mathcal{P})$ температурой T , фигурирующей в аргументе равновесной функции Планка N_0 и равной $T_0(\mathcal{P}_0)$.

Чтобы выразить разность $\mathcal{P} - \mathcal{P}_0$ через ΔN , воспользуемся (11.7) и (11.8). Имеем для плотности энтропии

$$S - S_0 = \int d\xi_k \frac{\partial \sigma}{\partial N} \Delta N + \frac{1}{2} \int d\xi_k \frac{\partial^2 \sigma}{\partial N^2} \Delta N^2.$$

Подставляя сюда значения $\partial \sigma / \partial N$ и $\partial^2 \sigma / \partial N^2$ при $N = N_0$, получаем

$$S - S_0 = \frac{1}{T} \int d\xi_k \hbar \Omega \Delta N - \frac{1}{2} \int d\xi_k \frac{(\Delta N)^2}{N_0(N_0 + 1)},$$

откуда для механической энергии имеем

$$\mathcal{E}_m = \frac{T}{2} \int d^3r \int d\xi_k \frac{(\Delta N)^2}{N_0(N_0 + 1)}. \quad (11.20)$$

В случае малых отклонений от равновесия приобретает, таким образом, смысл понятия плотности механической энергии, которая равна

$$E_m = \frac{T}{2} \int d\xi_k \frac{(\Delta N)^2}{N_0(N_0 + 1)}. \quad (11.21)$$

Выражение (11.13) также упрощается при малых отклонениях от равновесия. Чтобы получить упрощенную формулу, удобно исходить непосредственно из выражения (11.11). Подставляя

$$\frac{\partial \sigma}{\partial N} = \ln \frac{N_0 + 1}{N_0} - \frac{\Delta N}{N_0(N_0 + 1)} = \frac{\hbar \Omega}{T} - \frac{\Delta N}{N_0(N_0 + 1)},$$

принимая во внимание (11.5) и пренебрегая членами более высокого порядка по ΔN , мы получаем

$$\left[\frac{\partial S}{\partial t} \right]_{\text{ст}} = \int d\xi_k \frac{\Delta N}{N_0(N_0 + 1)} \hat{I} \Delta N = \int d\xi_k y \hat{J} y. \quad (11.22)$$

Оператор \hat{J} , очевидно, является существенно положительным.

Далее нам придется широко пользоваться понятием *кинетических коэффициентов*, играющим важную роль в физической кинетике. Они характеризуют реакцию макроскопической системы на малые внешние возмущения. В последующих главах мы займемся вычислением кинетических коэффициентов фононных систем для различных типов возмущений. Сейчас же мы дадим общее определение кинетических коэффициентов и сформулируем принцип их симметрии. И то, и другое будет дано для систем с распределенными параметрами, т. е. таких систем, неравновесные состояния которых определяются функцией (или несколькими функциями) непрерывно изменяющихся переменных. Для определенности мы рассмотрим самый распространенный случай, когда эти переменные — пространственные координаты \mathbf{r} ¹⁾. Однако наша формулировка никак принципиально не изменится, если они являются, например, компонентами квазивектора \mathbf{k} .

Рассмотрим замкнутую физическую систему, состояние которой характеризуется заданием ряда величин x_1, x_2, \dots — так называемых *обобщенных координат*, каждая из которых, в свою очередь, может быть функцией пространственных координат \mathbf{r} и времени t .

Определим величины x_a таким образом, чтобы их значения в равновесии во всех точках \mathbf{r} были бы равны нулю. В состоянии равновесия энтропия максимальна; следовательно, вариация

$$\delta \mathcal{P} = \sum_a \int d^3r \frac{\partial S}{\partial x_a} \delta x_a \quad (11.23)$$

должна обратиться в нуль. Это дает условие $X_a = 0$, где

$$X_a = - \frac{\partial S}{\partial x_a} \quad (11.24)$$

— так называемые *обобщенные силы*, сопряженные обобщенным координатам x_a .

¹⁾ Таковы, например, неравновесные состояния, возникающие при создании в среде неоднородного распределения температуры $T(\mathbf{r})$ или при действии на нее переменного электрического поля $E(\mathbf{r}, t)$.

Рассмотрим систему в состоянии, мало отличающемся от равновесного. В этом состоянии величины x_a имеют отличные от нуля, но малые значения. Отличны от нуля также и обобщенные силы X_a . В первом приближении они являются линейными функциями обобщенных координат.

Поскольку в системе протекают процессы, стремящиеся установить равновесие, величины x_a будут изменяться со временем. При малых отклонениях от равновесия скорость их изменения должна быть пропорциональна величине отклонения, и мы можем написать следующие линейные уравнения для обобщенных скоростей \dot{x}_a :

$$\dot{x}_a = - \sum_b \gamma_{ab} X_b. \quad (11.25)$$

Фигурирующие в этих уравнениях постоянные коэффициенты γ_{ab} и носят название *кинетических коэффициентов*. Они могут зависеть от температуры и других термодинамических переменных, характеризующих то равновесное состояние, малые отклонения от которого мы сейчас изучаем.

Применяя уравнения (11.25) к системам с распределенными параметрами, мы существенно основываемся на предположении о том, что величины x_a в какой-то точке \mathbf{r} зависят от значений обобщенных сил X_b в той же самой точке \mathbf{r} . Для фононных систем можно указать простой критерий, когда это имеет место: нужно, чтобы величины X_b как функции координат мало изменялись на расстояниях порядка длины свободного пробега фононов. В случаях, когда этот критерий нарушается, говорят, что имеет место *пространственная дисперсия* кинетических коэффициентов. Здесь мы будем предполагать, что пространственная дисперсия кинетических коэффициентов отсутствует¹⁾.

¹⁾ Аналогичным образом соотношения (11.25) предполагают, что отсутствует и *временная дисперсия* кинетических коэффициентов, т. е. обобщенные скорости \dot{x}_a в любой момент времени t определяются обобщенными силами X_b в тот же самый момент t . В фононных системах для этого время свободного пробега фононов должно быть гораздо меньше характерного времени изменения величин X_b .

Соотношения симметрии кинетических коэффициентов, установленные Онсагером, гласят, что матрица γ_{ab} симметрична:

$$\gamma_{ab} = \gamma_{ba}. \quad (11.26)$$

Эти соотношения являются непосредственным следствием симметрии уравнений механики относительно обращения времени¹⁾.

Через кинетические коэффициенты γ_{ab} выражается скорость возрастания энтропии системы. Дифференцируя (11.23) по времени, получаем

$$\dot{\mathcal{P}} = \sum_a \int d^3r \frac{\partial S}{\partial x_a} \dot{x}_a = - \sum_a \int d^3r X_a \dot{x}_a. \quad (11.27)$$

Или, подставляя сюда (11.25) и пользуясь симметрией матрицы γ_{ab} , имеем

$$\dot{\mathcal{P}} = \sum_{a,b} \int d^3r \gamma_{ab}^{-1} \dot{x}_a \dot{x}_b, \quad (11.28)$$

где γ_{ab}^{-1} есть матрица, обратная γ_{ab} , которая, очевидно, тоже должна быть симметричной. Эта матрица может быть приведена к диагональному виду, причем, поскольку скорость возрастания энтропии (11.28) положительна, ее главные значения также должны быть положительны.

Нужно заметить, что соотношения Онсагера имеют вид (11.26), только если физические величины x_a и x_b таковы, что они сами по себе остаются неизменными при обращении времени или же, если обе они при обращении времени изменяют свой знак. В таких случаях говорят, что обе величины обладают одинаковой четностью относительно обращения времени.

Если же они обладают разной четностью относительно обращения времени, то вместо соотношения (11.26) мы имеем

$$\gamma_{ab} = -\gamma_{ba}. \quad (11.26')$$

¹⁾ Вывод соотношений Онсагера см., например, Ансельм А. И. Основы статистической физики и термодинамики.— М.: Наука, 1973, с. 354 и след.; Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Статистическая физика.— М.: Наука, 1976, с. 397 и след.; де Гроот С. Р. Термодинамика необратимых процессов.— М.: Гостехиздат, 1956, глава II.

В этом последнем случае уравнение

$$\dot{x}_a = -\gamma_{ab} X_b, \quad (11.29)$$

описывающее реакцию системы на возмущение, создаваемое обобщенной силой X_b , инвариантно относительно обращения времени. Поэтому оно не может характеризовать каких бы то ни было необратимых процессов, протекающих в системе, а может служить только характеристикой чисто механического ее поведения, ибо законы механики инвариантны относительно обращения времени. По этой причине соответствующие коэффициенты γ_{ab} не дают вклада в выражение (11.28) для скорости возрастания энтропии.

Перенос тепла

§ 12. Тензор теплопроводности. Расчет теплопроводности кристаллических диэлектриков при высоких температурах

В твердом теле, где имеется градиент температуры, происходит перенос энергии от более нагретых участков к менее нагретым. Этот перенос называется *теплопроводностью*, а поток энергии, возникающий в отсутствие макроскопического движения, — потоком тепла. Плотность потока тепла Q пропорциональна градиенту температуры:

$$Q_i = -\kappa_{ii} \frac{\partial T}{\partial r_i}. \quad (12.1)$$

Коэффициенты пропорциональности κ_{ii} представляют собой симметричный тензор, называемый *тензором теплопроводности*.

Соотношение симметрии

$$\kappa_{ii} = \kappa_{ii} \quad (12.2)$$

можно получить из общего соотношения (11.26). При наличии потока тепла скорость возрастания энтропии есть:

$$\dot{\mathcal{P}} = - \int \frac{\operatorname{div} Q}{T} d^3r = - \int \operatorname{div} \frac{Q}{T} d^3r + \int Q \nabla \frac{1}{T} d^3r.$$

Первый член в правой части можно представить в виде поверхностного интеграла; он обращается в нуль, если поток тепла через поверхность образца равен нулю. Второй интеграл равен

$$\dot{\mathcal{P}} = - \int d^3r Q_i \frac{1}{T^2} \frac{\partial T}{\partial r_i}. \quad (12.3)$$

Сравнивая это выражение с (11.27), заключаем, что

если положить

$$X_i = \frac{1}{T^2} \frac{\partial T}{\partial r_i},$$

то в качестве величин x_i надо выбрать Q_i , а роль кинетических коэффициентов будут играть $T^2 \kappa_{ii}$. А тогда (12.2) есть следствие общих соотношений Онсагера (11.26).

Подставляя (12.1) в (12.3), получаем выражение для скорости возрастания энтропии за счет процессов теплопроводности:

$$\dot{\mathcal{P}} = \int d^3r \frac{1}{T^2} \kappa_{ii} \frac{\partial T}{\partial r_i} \frac{\partial T}{\partial r_i}. \quad (12.4)$$

Чтобы вычислить тензор теплопроводности кристаллического диэлектрика¹⁾, нужно, решив кинетическое уравнение, найти фононную функцию распределения $N_{\mathbf{k}}$ в кристалле, где создан градиент температуры. Требуется, следовательно, описать пространственно-неоднородное состояние, в котором температура зависит от координаты \mathbf{r} . Как уже говорилось, описание в этом случае должно вестись в терминах фононных волновых пакетов. Размер волнового пакета превышает длину волны фонона. Поэтому понятие температуры, зависящей от пространственных координат, сохраняет смысл, если характерная длина L_c , на которой она существенным образом изменяется, гораздо больше характерной фононной длины волны, равной величине \bar{a} при $T \gg \Theta$ и $\bar{a}\Theta/T$ при $T \ll \Theta$. Фактически, однако, имеется гораздо более жесткое ограничение снизу на длину L_c , которое мы получим ниже.

Кинетическое уравнение для функции распределения N при наличии стационарного градиента температуры имеет вид

$$\frac{\partial \Omega}{\partial \mathbf{k}} \nabla N = \left[\frac{\partial N}{\partial t} \right]_{\text{ст}}. \quad (12.5)$$

Будем решать это уравнение методом последовательных приближений. Положим

$$N = N_0 + \Delta N,$$

¹⁾ Результаты, излагаемые ниже в настоящем разделе и § 13, принадлежат Пайерльсу (R. Peierls, 1929).

где N_0 есть функция, соответствующая локальному равновесию, т. е. функция распределения Планка, зависящая от температуры $T(\mathbf{r})$.

Неравновесную добавку ΔN считаем малой. Пренебрегая ею при вычислении левой части (12.5), находим, что левая часть есть

$$N_0(N_0 + 1) \frac{\hbar\Omega}{T^2} \frac{\partial\Omega}{\partial\mathbf{k}} \nabla T.$$

Правую же часть линеаризуем по малой добавке ΔN . Линеаризованное кинетическое уравнение имеет вид

$$N_0(N_0 + 1) \frac{\hbar\Omega}{T^2} \frac{\partial\Omega}{\partial\mathbf{k}} \nabla T = -\hat{I}\Delta N. \quad (12.6)$$

Общее решение этого неоднородного уравнения представляет собой сумму частного решения и общего решения однородного уравнения $\hat{I}\Delta N = 0$. Последнее, как мы видели, есть функция (9.4), описывающая изменение равновесной фононной функции распределения при малом изменении температуры.

Необходимость добавлять решение однородного уравнения имеет простой физический смысл. Она связана с тем, что в неравновесном состоянии температура системы однозначно не определена и нуждается в доопределении. Мы доопределим ее условием, чтобы вклад от неравновесной функции распределения в плотность энергии фононной системы был бы равен нулю:

$$\int d\xi_{\mathbf{k}} \hbar\Omega \Delta N = 0. \quad (12.7)$$

Тем самым плотность энергии выражается только через равновесную функцию распределения, и между нею и температурой сохраняется та же связь, что и в термодинамическом равновесии.

Как мы видели в § 11, оператор фонон-фононных столкновений должен сохранять полную энергию фононной системы. Очевидно, и линеаризованный оператор столкновений должен обладать тем же самым свойством. Это значит, что если умножить правую часть (12.6) на $\Omega_j(\mathbf{k})$ и проинтегрировать по $d\xi_{\mathbf{k}}$, то должен получиться нуль. Следовательно, и левая часть уравнения (12.6) должна дать нуль в результате такой процедуры. Это

есть необходимое условие существования решения уравнения (12.6). В нашем случае это условие выполнено, так как $\Omega_j(\mathbf{k})$ есть четная функция \mathbf{k} , а левая часть (12.6) — нечетная функция; следовательно, интеграл от их произведения равен нулю.

Решение уравнения (12.6) ищем в виде

$$\Delta N = N_0(N_0 + 1)y.$$

Подставляя это выражение в (12.6), получаем уравнение для функции y :

$$N_0(N_0 + 1) \frac{\hbar\Omega}{T^2} \nabla T \frac{\partial\Omega}{\partial\mathbf{k}} = -\hat{J}y, \quad (12.8)$$

где оператор \hat{J} определен соотношением (9.6).

Далее мы будем пользоваться следующей сокращенной записью решений интегральных уравнений типа (12.8). Пусть имеется уравнение

$$a(\mathbf{k}, j) = \hat{J}y. \quad (12.9)$$

Как известно из теории интегральных уравнений, чтобы (12.9) имело решение, его неоднородность (левая часть) должна быть ортогональна решению однородного уравнения $\hat{J}y = 0$, т. е. функции $\Omega_j(\mathbf{k})$:

$$\int d\xi_{\mathbf{k}} \Omega_j(\mathbf{k}) a(\mathbf{k}, j) = 0. \quad (12.10)$$

Это условие мы будем считать выполненным. Тогда решение уравнения (12.9) будет коротко записываться следующим образом:

$$y(\mathbf{k}, j) = \hat{J}^{-1}a. \quad (12.11)$$

Осталось указать, какое именно решение неоднородного уравнения (12.9) имеет в виду краткая запись (12.11). Мы будем считать, что это такое решение, которое удовлетворяет дополнительному условию, вытекающему из (12.7):

$$\int d\xi_{\mathbf{k}} \Omega N_0(N_0 + 1)y = \int d\xi_{\mathbf{k}} \Omega N_0(N_0 + 1)\hat{J}^{-1}a = 0. \quad (12.12)$$

Тем самым операция \hat{J}^{-1} определена однозначно.

Плотность потока тепла, переносимого фононами, есть

$$Q = \int d\xi_{\mathbf{k}} \hbar\Omega \frac{\partial\Omega}{\partial\mathbf{k}} \Delta N.$$

Но

$$\Delta N = N_0(N_0 + 1)y = -\frac{\hbar}{T^2} N_0(N_0 + 1) \hat{J}^{-1} N_0(N_0 + 1) \Omega \frac{\partial \Omega}{\partial k_n} \frac{\partial T}{\partial r_n}.$$

Сравнивая эти выражения с (12.1), получаем

$$\kappa_{mn} = \frac{\hbar^2}{T^2} \int d\xi_k \Omega \frac{\partial \Omega}{\partial k_m} N_0(N_0 + 1) \hat{J}^{-1} N_0(N_0 + 1) \Omega \frac{\partial \Omega}{\partial k_n}. \quad (12.13)$$

Соотношение симметрии (12.2) для тензора κ_{mn} , которое мы получили из соотношений Онсагера, вытекает также и из проделанного конкретного расчета. Действительно, поскольку симметричен оператор \hat{J} , то симметричен и обратный ему оператор \hat{J}^{-1} , а значит, и тензор κ_{mn} .

Перейдем к порядковым оценкам теплопроводности κ при $T \gg \Theta$ и анализу ее температурной зависимости. Для равновесной функции N_0 воспользуемся приближенным выражением, справедливым при $T \gg \Theta$:

$$N_0 = T/\hbar\Omega.$$

Далее нужно оценить по порядку величины выражение $\hat{J}y$. Оценка, проделанная таким же образом и в тех же предположениях, что и оценка времени свободного пробега (10.8), дает

$$\hat{J}y \simeq \frac{\hbar}{Ma^2} \left(\frac{T}{\Theta}\right)^3 y.$$

С учетом (10.8) она переписывается в следующем виде:

$$\hat{J}y \simeq \frac{1}{\tau} \left(\frac{T}{\Theta}\right)^2 y. \quad (12.14)$$

Подставляя (12.14) в (12.13), получаем оценку теплопроводности κ . При этом оператор \hat{J}^{-1} следует считать порядка $\tau(\Theta/T)^2$, величину $\hbar\Omega$ — порядка дебаевской температуры Θ , а производную $\partial\Omega/\partial k$ — порядка средней скорости \bar{v} . Наконец, суммирование по фоновым ветвям и интегрирование по основной ячейке обратной решетки дает $3s/\bar{v}$. Окончательно получаем оценку

$$\kappa \simeq \frac{\bar{v}^2 \tau}{a^3}. \quad (12.15)$$

Согласно (10.8), при $T \gg \Theta$ $\tau \sim 1/T$. Следовательно, при высоких температурах имеет место зависимость

$$\kappa \sim 1/T. \quad (12.16)$$

Ввиду важности вопроса укажем еще один способ оценок теплопроводности. Он имеет достаточно общий характер и применим как для фоновых, так и для примесного или комбинированного рассеяния фононов при любых температурах. Нужно только, чтобы столкновения фононов при каждом значении k можно было бы характеризовать по порядку величины единым временем свободного пробега¹⁾.

Перепишем формулу (12.13) в следующем виде:

$$\kappa_{mn} = \frac{\hbar^2}{T^2} \int d\xi_k \Omega \frac{\partial \Omega}{\partial k_m} \hat{J}^{-1} N_0(N_0 + 1) \Omega \frac{\partial \Omega}{\partial k_n}.$$

Введем далее «теплоемкость фонона» (k, j):

$$c(k, j) = \frac{d}{dT} (\hbar\Omega N_0) = \frac{(\hbar\Omega)^2}{T^2} N_0(N_0 + 1). \quad (12.17)$$

Если теперь заменить по порядку величины оператор \hat{J}^{-1} временем свободного пробега фононов $\tau(k, j)$, то получится оценка:

$$\kappa \simeq \int d\xi_k c(k, j) \bar{v}^2 \simeq \int dk k^2 c(k, j) \bar{v}. \quad (12.18)$$

С помощью этой формулы можно получить уже известный результат (12.15). Для этого нужно учесть, что при высоких температурах $c(k, j) = 1$.

Оценочная формула (12.18) позволяет подробно проследить за предположениями, лежащими в основе оценки (12.15). Время τ есть функция k . Оценка (12.15) получена по существу в предположении, что в интеграле (12.18) существенны k порядка предельного значения k_0 , т. е. что при уменьшении k $\tau(k)$ не возрастает слишком быстро.

Из вида выражения (6.41), характеризующего ангармоническое взаимодействие длинноволновых акустических

¹⁾ Поэтому в более сложных случаях, например, когда таких времен имеется два и они характеризуют два принципиально различных типа процессов таких, как нормальные процессы и процессы переброса, этот метод оценки теряет применимость,

фононов с тепловыми фононами, явствует, что с уменьшением k $\tau(k)$ может достаточно быстро расти. Характер роста $\tau(k)$ подробно исследован в §§ 33—36. Там показано, что все же в ряде важных случаев учет одних только трехфононных процессов в наименьшем приближении теории возмущений дает зависимость $\tau(k)$, обеспечивающую достаточно быструю сходимость интеграла (12.18) при малых k , так что оценка (12.15) имеет место. Там же найдена температурная зависимость теплопроводности в тех случаях, когда обусловленное трехфононными процессами в наименьшем приближении теории возмущений время $\tau(k)$ при $k \rightarrow 0$ возрастает настолько быстро, что для получения конечной теплопроводности приходится рассматривать процессы более высокого порядка.

В заключение выясним, когда поток тепла может считаться линейной функцией градиента температуры и вычисляться с помощью линейризованного кинетического уравнения (12.6). Из (12.6) мы имеем по порядку величины

$$\Delta N \simeq -\tau N_0 (N_0 + 1) \frac{\hbar \Omega}{T^2} \frac{\partial \Omega}{\partial k} \nabla T,$$

откуда

$$\frac{|\Delta N|}{N_0} \simeq \tau g (N_0 + 1) \frac{\hbar \Omega}{T} \frac{|\nabla T|}{T}.$$

При всех фононных частотах вплоть до тепловых произведение $(N_0 + 1) \hbar \Omega / T$ равно по порядку величины единице. Поэтому

$$\frac{|\Delta N|}{N_0} \simeq l \frac{|\nabla T|}{T}.$$

Отсюда явствует, что линейризация кинетического уравнения допустима, а поток тепла, следовательно, есть линейная функция ∇T , если мало относительное изменение температуры на длине свободного пробега фононов:

$$l \frac{|\nabla T|}{T} \ll 1. \quad (12.19)$$

При нарушении этого неравенства само понятие температуры теряет смысл, так как фононную функцию распределения нельзя ни в каком приближении считать

равновесной. Таким образом, при высоких температурах поток тепла есть линейная функция градиента температуры во всех случаях, когда понятие температуры сохраняет смысл.

§ 13. Теплопроводность кристаллических диэлектриков при низких температурах. Роль процессов переброса

При низких температурах ($T \ll \Theta$) оператор фононных столкновений \hat{I} есть сумма двух слагаемых:

$$\hat{I} = \hat{I}_N + \hat{I}_U, \quad (13.1)$$

имеющих разный порядок величины. Первое описывает нормальные процессы, идущие с сохранением квазиволнового вектора, а второе — процессы переброса, при которых квазиволновой вектор сталкивающихся фононов изменяется на вектор обратной решетки \mathbf{b} . Как отмечалось в § 6, процессы переброса происходят обязательно с участием по меньшей мере двух коротковолновых фононов; поскольку число последних при понижении температуры экспоненциально убывает, таким же образом убывает и вероятность соответствующих столкновений. Эту вероятность мы будем обозначать $1/\tau_U$, так что τ_U можно назвать временем свободного пробега фононов по отношению к процессам переброса. Время свободного пробега по отношению к нормальным процессам, τ_N , растет с понижением температуры по степенному закону, т. е. гораздо медленнее, чем τ_U .

При решении уравнения (12.5) естественно применить метод последовательных приближений (А. И. Ахиезер, 1940). Посмотрим, можно ли взять в качестве нулевого приближения уравнение, у которого в правой части стоит только оператор \hat{I}_N :

$$N_0 (N_0 + 1) \frac{\hbar \Omega}{T^2} \nabla T \frac{\partial \Omega}{\partial k} = -\hat{I}_N \Delta N. \quad (13.2)$$

Решение уравнения (13.2) существует, только если его левая часть удовлетворяет двум условиям. Первое из них было сформулировано выше. Это есть условие обращения в нуль интеграла по $d\mathbf{k}$ от левой части (13.2), умноженной на Ω .

Второе условие мы получим, умножая (13.2) на вектор $\hbar k_j$ и интегрируя по $d\xi_k$. Справа получим нуль, поскольку нормальные процессы по определению сохраняют квазиимпульс фононов. Слева же получаем выражение

$$\int d\xi_k \hbar k_j N_0 (N_0 + 1) \frac{\hbar \Omega}{T^2} \frac{\partial T}{\partial r_i} \frac{\partial \Omega}{\partial k_i} = - \frac{\partial T}{\partial r_i} \int d\xi_k k_j \frac{\partial N_0}{\partial \Omega} \frac{\partial \Omega}{\partial k_i} \ln \frac{N_0 + 1}{N_0}. \quad (13.3)$$

Здесь мы использовали соотношение $\ln[(N_0 + 1)/N_0] = \hbar \Omega / T$, справедливое для равновесной функции Планка N_0 . Дальнейшие упрощения выражения (13.3) получатся, если его переписать в виде

$$- \frac{\partial T}{\partial r_i} \int d\xi_k k_j \frac{\partial \sigma(N_0)}{\partial k_i}, \quad (13.4)$$

где $\sigma(N)$ определяется выражением (11.8). Интегрируя (13.4) по частям, приводим его к виду

$$S \partial T / \partial r_i, \quad (13.5)$$

где S — плотность энтропии системы фононов. При наличии градиента температуры это выражение заведомо отлично от нуля. Следовательно, уравнение (13.2) решения не имеет. Чтобы понять физическую причину этого, рассмотрим нестационарное кинетическое уравнение для неравновесной добавки и фононной функции распределения ΔN :

$$\frac{\partial \Delta N}{\partial t} + \frac{\partial \Omega}{\partial k} \frac{\partial \Delta N}{\partial r} + N_0 (N_0 + 1) \frac{\hbar \Omega}{T^2} \frac{\partial \Omega}{\partial k} \nabla T = - \hat{I}_N \Delta N. \quad (13.6)$$

Умножим это уравнение на $\hbar k_j$ и проинтегрируем по $d\xi_k$ и по объему кристалла. При этом второе слагаемое в левой части (13.6) преобразуется в поверхностный интеграл, имеющий смысл потока квазиимпульса через поверхность кристалла; мы будем считать этот поток равным нулю.

Третье слагаемое есть интеграл по объему кристалла от величины (13.5). Интеграл от правой части (13.6) дает нуль, так как нормальные столкновения сохраняют

квазиимпульс фононной системы. Таким образом, интегрируя (13.6), получаем условие баланса

$$\frac{\partial}{\partial t} \int d^3r \int d\xi_k \hbar k \Delta N = - \int d^3r S \nabla T. \quad (13.7)$$

Выражение в левой части есть скорость возрастания полного квазиимпульса фононной системы. Внешний источник, создающий градиент температуры, приводит в отсутствие соответствующих процессов релаксации к неограниченному возрастанию этой величины со временем. Это значит, что сами по себе нормальные процессы не приводят к установлению равновесия в системе фононов, т. е. не дают конечной теплопроводности. Чтобы получить конечную теплопроводность, необходимо учитывать процессы переброса.

Поток тепла устанавливается именно в результате баланса между скоростью притока квазиимпульса в систему фононов за счет градиента температуры и скоростью его уничтожения за счет процессов переброса. Но чтобы записать это условие баланса, нужно сначала понять, какую роль во всей этой ситуации играют нормальные процессы.

Их роль заключается в том, что они контролируют вид неравновесной добавки к фононной функции распределения. Нелиinearизованный оператор нормальных столкновений обращается в нуль любой функцией вида

$$N_0 (\Omega - kV) = n_0 \left(\hbar \frac{\Omega - kV}{T} \right), \quad (13.8)$$

зависящей от двух интегралов движения, Ω и k . Здесь V — любой постоянный вектор такой, что при всех k и j выполняется условие $\Omega > kV$. Это значит, что linearизованный оператор нормальных столкновений обращается в нуль функцией, получающейся linearизацией выражения (13.8) по V :

$$\Delta N = N_0 (N_0 + 1) \hbar kV / T. \quad (13.9)$$

Вектор V имеет размерность скорости. Чтобы понять его физический смысл, вычислим среднюю групповую скорость фононов в функции распределения (13.9). Она

равна

$$\begin{aligned} \int d\xi_k \frac{\partial \Omega}{\partial k} \frac{\hbar (kV)}{T} N_0 (N_0 + 1) \left(\int d\xi_k N_0 \right)^{-1} &= \\ &= - \int d\xi_k \frac{\partial \Omega}{\partial k} \frac{\partial N_0}{\partial \Omega} (kV) \left(\int d\xi_k N_0 \right)^{-1} = \\ &= - \int d\xi_k \frac{\partial N_0}{\partial k} (kV) \left(\int d\xi_k N_0 \right)^{-1}. \end{aligned}$$

Интегрируя по частям (с учетом того, что интеграл по поверхности основной ячейки обратной решетки дает нуль), находим, что это отношение равно V . Эту величину мы будем называть дрейфовой (или гидродинамической) скоростью системы фононов. Она характеризует среднюю скорость движения фононной системы «как целого».

Вернемся к решению кинетического уравнения для фононной функции распределения:

$$N_0 (N_0 + 1) \frac{\hbar \Omega}{T^2} \nabla T \frac{\partial \Omega}{\partial k} = - (\hat{I}_N + \hat{I}_U) \Delta N. \quad (13.10)$$

Будем строить метод последовательных приближений по степеням малого отношения

$$\tau_N / \tau_U \ll 1. \quad (13.11)$$

Форма функции первого приближения, $\Delta_1 N$, определяется нормальными столкновениями, т. е. она имеет вид (13.9) с пока не определенной дрейфовой скоростью V . Поправка второго приближения, $\Delta_2 N$, меньше величины $\Delta_1 N$ в отношении малого параметра (13.11).

Подставим в правую часть уравнения (13.10) сумму первого и второго приближений. Величина $\hat{I}_N \Delta_1 N = 0$, поэтому в первом слагаемом мы должны сохранить $\Delta_2 N$. Во втором же слагаемом, описывающем процессы переброса, мы учтем только $\Delta_1 N$, отбросив величину $\Delta_2 N$ как малую. Это дает

$$N_0 (N_0 + 1) \frac{\hbar \Omega}{T^2} \nabla T \frac{\partial \Omega}{\partial k} = - \hat{I}_N \Delta_2 N - \hat{I}_U \Delta_1 N. \quad (13.12)$$

Решение этого уравнения, $\Delta_2 N$, определяется с точностью до произвольного слагаемого вида $\text{const} \Delta_1 N$. Наличие произвола связано с тем, что в неравновесном

состоянии, где $\Delta_2 N$ отлично от нуля, кроме термодинамической переменной T есть также и переменная V , которая не определена однозначно и нуждается в доопределении. Мы устраним произвол, подчинив функцию $\Delta_2 N$ дополнительному условию

$$\int d\xi_k k \Delta_2 N = 0. \quad (13.13)$$

Умножим уравнение (13.12) на $\hbar k$ и проинтегрируем по $d\xi_k$. Интеграл от левой части даст, как мы видели, выражение (13.5). Интеграл от первого слагаемого в правой части даст нуль при любом виде функции $\Delta_2 N$, поскольку нормальные столкновения сохраняют квазиимпульс. Интегрируя второе слагаемое, получаем уравнение баланса

$$S \frac{\partial T}{\partial r_m} = - \lambda_{mn} V_n, \quad (13.14)$$

где

$$\begin{aligned} \lambda_{mn} &= \frac{1}{T} \int d\xi_k \hbar k_m \hat{I}_U N_0 (N_0 + 1) \hbar k_n = \\ &= \frac{\hbar^2}{T} \int d\xi_k k_m \hat{J}_U k_n. \end{aligned} \quad (13.15)$$

Выражение для тензора λ мы специально переписали через симметричный оператор \hat{J} , чтобы продемонстрировать явным образом, что тензор λ симметричен.

Проделанная выкладка позволяет наглядней представить себе физический смысл времени τ_U и уточнить его определение. Это есть характерное время релаксации дрейфовой скорости V , которое естественно определить как среднее следующего вида от оператора \hat{I}_U :

$$\frac{1}{\tau_U} = \frac{\int d\xi_k k_m \hat{I}_U k_m N_0 (N_0 + 1)}{\int d\xi_k k^2 N_0 (N_0 + 1)} = \frac{T \lambda_{mm}}{\hbar^2 \int d\xi_k k^2 N_0 (N_0 + 1)}, \quad (13.16)$$

так что по порядку величины

$$\lambda \simeq \frac{T^4}{\hbar^3 v^5 \tau_U}. \quad (13.17)$$

Чтобы вычислить теплопроводность, нужно найти поток тепла Q как функцию дрейфовой скорости V . Мы

можем написать с учетом (13.9)

$$Q = \int d\xi_k \hbar \Omega \frac{\partial \Omega}{\partial k} N = \frac{\hbar^2}{T} \int d\xi_k \Omega \frac{\partial \Omega}{\partial k} N_0 (N_0 + 1) (kV). \quad (13.18)$$

Преобразуем это выражение с помощью тождества, которому удовлетворяет равновесная функция Планка N_0 :

$$\frac{\hbar \Omega}{T} N_0 (N_0 + 1) = - \frac{T}{\hbar} \frac{\partial}{\partial \Omega} \sigma(N_0).$$

Мы имеем, интегрируя по частям:

$$Q = -T \int d\xi_k \frac{\partial \sigma(N_0)}{\partial k} (kV) = TV \int d\xi_k \sigma(N_0).$$

Как явствует из (4.4), интеграл равен плотности энтропии равновесной фононной системы, и окончательно:

$$Q = TSV. \quad (13.19)$$

Сравнивая это выражение с (12.1) и принимая во внимание (13.14), мы имеем

$$\kappa_{mn} = TS^2 \lambda_{mn}^{-1}, \quad (13.20)$$

где λ^{-1} обозначает тензор, обратный λ . Воспользовавшись оценкой (13.17) и выражением (5.15) для плотности энтропии фононной системы, мы получаем следующую оценочную формулу:

$$\kappa \simeq k_T^3 \bar{v}^2 \tau_U. \quad (13.24)$$

Чтобы найти температурную зависимость теплопроводности, надо определить зависимость от T тензора λ (или, что то же самое, времени τ_U).

Процессы переброса могут идти только с участием коротковолновых фононов, число которых при $T \ll \Theta$ экспоненциально мало. Рассмотрим в качестве примера процесс слияния фононов с волновыми векторами k и k' . Он относится к процессам переброса, если сумма векторов $k + k'$ выходит за пределы основной ячейки обратной решетке. Если наименьшее отличное от нуля значение вектора обратной решетки есть b_0 , то по крайней мере один из этих векторов должен по абсолютной величине превышать $b_0/2$.

Это значит, что частота по крайней мере одного фонона в начальном состоянии, участвующего в процессе переброса, должна быть порядка предельной. Поскольку число таких фононов при низких температурах уменьшается с температурой экспоненциально, то и зависимость от температуры времени τ_U , обратно пропорционального вероятности процессов переброса, имеет в основном экспоненциальный характер¹⁾, т. е. описывается функцией

$$\exp(C_U \Theta/T), \quad (13.22)$$

где C_U — постоянная порядка единицы.

Это, в свою очередь, означает, что теплопроводность чистых кристаллических диэлектриков при понижении температуры должна в основном расти экспоненциально по закону (13.22).

Осталось обсудить, какие ограничения налагаются на ∇T при низких температурах, чтобы поток тепла был линейной функцией градиента температуры. Для этого найдем условие малости отношения $\Delta_1 N/N_0$, где $\Delta_1 N$ определяется выражением (13.9). Имеем

$$\frac{|\Delta_1 N|}{N_0} \simeq (N_0 + 1) \frac{\hbar kV}{T}.$$

В интеграле (13.18), куда нужно подставить это выражение, чтобы вычислить поток тепла, существенны k порядка k_T . При таких k по порядку величины

$$\frac{|\Delta_1 N|}{N_0} \simeq \frac{V}{\bar{v}}.$$

Таким образом, условие применимости линейной по ∇T теории есть малость дрейфовой скорости фононов V по сравнению со средней скоростью звука: $V \ll \bar{v}$.

Чтобы понять, какие ограничения налагает это условие на ∇T , оценим по порядку величины дрейфовую скорость из соотношения (13.14) и воспользуемся для λ оценкой (13.17), а для S — выражением (5.15). В результате

¹⁾ Экспонента описывает основную зависимость от температуры; кроме того, в выражениях для τ_U и для теплопроводности может войти в качестве множителя и какая-то более слабая функция температуры (например, степенная).

получится неравенство

$$\bar{v}\tau_v |\nabla T|/T \ll 1. \quad (13.23)$$

Таким образом, при $T \ll \Theta$ поток тепла есть линейная функция градиента температуры, если мало относительное изменение температуры на длине $\bar{v}\tau_v$.

Условие (13.23) напоминает (12.19); между ними, однако, существует и принципиальное различие. Мы уже указывали, что при нарушении неравенства (12.19) само понятие температуры теряет смысл. При нарушении же неравенства (13.23) понятие температуры может сохранять смысл¹⁾, однако равновесную функцию распределения (13.8) нельзя разлагать по малому параметру, пропорциональному V , и поток тепла становится нелинейной функцией градиента температуры²⁾.

§ 14. Влияние рассеяния фононов дефектами кристаллической решетки на теплопроводность

Наличие дефектов должно уменьшать теплопроводность, так как они вызывают дополнительное рассеяние фононов. Рассеяние описывается линеаризованным оператором столкновений (9.9) или (9.10). В кинетическом уравнении (12.6) должна теперь фигурировать сумма этого оператора и оператора фонон-фононных столкновений (9.2).

Будем снабжать оператор фонон-фононных столкновений индексом p , а оператор столкновений с дефектами — индексом d ³⁾. Общее выражение для тензора теплопроводности примет теперь вид

$$\kappa_{mn} = \frac{\hbar^2}{T^2} \int d\xi_k \Omega \frac{\partial \Omega}{\partial k_m} N_0 (N_0 + 1) (\hat{J}_p + \hat{J}_d)^{-1} \times \\ \times \Omega \frac{\partial \Omega}{\partial k_n} N_0 (N_0 + 1). \quad (14.1)$$

¹⁾ Если $|\Delta_2 N|/N_0 (\Omega - kV) \ll 1$.

²⁾ Теплопроводность диэлектрика в условиях, когда градиент температуры настолько велик, что неравенство (13.23) нарушается, теоретически изучалась в работе: Нильсен Х., Шкловский Б. И. — ЖЭТФ, 1969, т. 56, с. 709. В ней вычислена нелинейная зависимость потока тепла от разности температур на концах образца.

³⁾ Это начальные буквы слов phonon и defect.

Оно естественным образом обобщает выражение (12.13) на случай комбинированного рассеяния фононов.

Оператор \hat{J}_p , как мы видели в § 9, является симметричным. Оператор \hat{J}_d в общем случае обладает только свойством обобщенной симметрии. Тем же свойством, следовательно, обладает и их сумма, а значит и обратный оператор $(\hat{J}_p + \hat{J}_d)^{-1}$.

Функции слева и справа от оператора $(\hat{J}_p + \hat{J}_d)^{-1}$ в (14.1) — нечетные функции k . Следовательно, они принадлежат к тому классу функций, в котором определено свойство обобщенной симметрии. Таким образом, из проведенного расчета следует вывод о том, что тензор κ_{mn} является симметричным. Представляется естественным, что соотношения Онсагера, общий вывод которых основан на обратимости уравнений механики, при конкретном расчете кинетических коэффициентов κ_{ii} могут быть получены как следствие теоремы взаимности (7.5), также вытекающей из обратимости уравнений механики.

Выясним, какой должна быть концентрация дефектов, чтобы они заведомо оказывали существенное влияние на теплопроводность диэлектрика при $T \gg \Theta$. Мы уже знаем, что если преобладает фонон-фононное рассеяние, причем трехфононные процессы обеспечивают достаточно быструю сходимость интеграла (12.18) при малых k , то основной вклад в него дают большие k , порядка предельного значения k_0 . Поэтому чтобы узнать, при какой концентрации дефектов рассеяние на них начинает преобладать над фононным, надо сравнить соответствующие длины свободного пробега для предельных значений k . Составляя отношение величин (10.9) и (10.3), мы находим, что рассеяние на дефектах должно заведомо существенно сказываться на теплопроводности диэлектрика, если их концентрация удовлетворяет условию

$$n_d/n \gg T/\bar{M}\bar{v}^2. \quad (14.2)$$

Это довольно жесткое условие: его выполнение требует значительной концентрации дефектов.

Вопрос о том, как именно ведет себя теплопроводность, если это условие выполнено, весьма сложен по следующей причине. Мы видели (см. § 10), что длина свободного пробега акустических фононов за счет рассеяния

дефектами при малых k пропорциональна k^{-4} , т. е. растет при уменьшении k очень быстро, как правило, быстрее, чем длина свободного пробега, обусловленная фоно-фононными столкновениями. Это обстоятельство приводит к значительному изменению физической картины теплопроводности по сравнению с рассмотренной в § 12.

В этих условиях основной вклад в интеграл (12.18) дают отнюдь не значения k порядка предельных, а некоторые промежуточные, при которых обе длины свободного пробега оказываются одного порядка. Какие именно это значения k , определяется зависимостью от k длины свободного пробега за счет фоно-фононных столкновений. Эта зависимость будет изучена в главе IV, и мы должны отложить до § 37 этой главы исследование теплопроводности в режиме (14.2).

Перейдем к обсуждению роли рассеяния фононов дефектами в теплопроводности при низких температурах $T \ll \Theta$. При рассеянии на дефектах квазиимпульс фононов не сохраняется, и потому в отношении влияния на теплопроводность время свободного пробега τ_d следует сравнивать не со временем нормальных процессов τ_N , а со временем процессов переброса τ_U . Точнее, надо оценить вклад примесного рассеяния в тензор λ_{mn} , определяемый выражением (13.15), где вместо оператора \hat{J}_U нужно подставить оператор рассеяния на дефектах \hat{J}_d .

Отметим одно важное обстоятельство. Если имеется несколько различных механизмов рассеяния (процессы переброса, изотопы, различные виды дефектов), то их вклады в теплосоппротивление аддитивны, и каждый из этих вкладов можно вычислять по отдельности. Этот вывод справедлив при низких температурах в наименьшем приближении по параметру $\tau_N/\tau_n \ll 1$, которым мы и ограничиваемся. Здесь $1/\tau_n$ есть суммарная вероятность всех процессов рассеяния фонона, не сохраняющих квазиимпульса.

Обозначим вклад в тензор λ за счет рассеяния фононов дефектами посредством $\lambda^{(d)}$. При его оценке будем считать, что оператор столкновений фононов с дефектами определяется выражением (7.11). Оно проще общего выражения (7.10) и потому приводит к менее громоздким выкладкам; можно, однако, убедиться, что оба они дают

одинаковую окончательную оценку (14.4). Подставляя оператор (7.11) вместо \hat{J}_U в формулу (13.15) для λ_{mn} , получаем

$$\lambda_{mn}^{(d)} = n_d \frac{\hbar^2}{T} \int d\xi_k \int d\xi_{k'} G(k, a; k', a') k_m (k_n - k'_n) \times \\ \times \delta(\Omega - \Omega') N_0 (N_0 + 1). \quad (14.3)$$

Мы учтем при оценках вклад в это выражение только от акустических колебательных ветвей, так как вклад от оптических при $T \ll \Theta$ экспоненциально мал.

Воспользовавшись оценкой (7.30) для функции G и принимая во внимание, что в силу свойств функции N_0 интегрировать фактически придется вплоть до k порядка k_T , мы находим

$$\lambda^{(d)} \simeq \frac{\hbar n_d}{a^2} \left(\frac{T}{\Theta} \right)^8. \quad (14.4)$$

Отсюда теплопроводность

$$\kappa \simeq \frac{\Theta^2}{\hbar a T} \frac{n}{n_d}. \quad (14.5)$$

Таким образом, при $T \ll \Theta$ теплопроводность, обусловленная рассеянием фононов дефектами решетки, обратно пропорциональна T .

Очевидно, однако, что закон (14.5) справедлив только при определенном ограничении снизу на температуру T . А именно, при его выводе предполагалось, что характерное время рассеяния фононов дефектами, τ_d , которое при $\Omega \simeq T/\hbar$ имеет порядок

$$\tau_d \simeq \frac{n}{n_d} \frac{1}{\Omega_D} \left(\frac{\Theta}{T} \right)^4,$$

гораздо больше времени τ_N , которое, как мы видели в § 10, обратно пропорционально T^5 . При достаточно низких температурах соотношение между этими временами обязательно должно сделаться обратным, и выражение (14.5) станет непригодным.

Поведение теплопроводности в этом случае опять-таки определяется деталями зависимости длины свободного пробега фононов $l(k)$ от волнового вектора k и будет подробно исследовано в главе IV.

Поскольку $l(k)$ возрастает при убывании k , при некоторой температуре длина свободного пробега тепловых фононов $l(k_T)$ может сравниться с размерами образца диэлектрика. Поведение теплопроводности при температурах ниже этой существенно зависит от характера отражения фононов от поверхности образца.

Поверхность кристалла всегда имеет шероховатости, размеры которых заметно превышают межатомные расстояния. Если характерная длина волны фононов превышает размер шероховатости, то их отражение от поверхности кристалла приходит по законам геометрической акустики. Это значит, что при отражении сохраняется проекция квазиимпульса фонона на направление, параллельное поверхности кристалла.

Чаще, однако, на эксперименте имеет место противоположный случай, когда характерная длина волны тепловых фононов гораздо меньше размера шероховатости поверхности. В этом случае рассеяние является диффузным, т. е. при рассеянии не сохраняется никакая компонента квазиимпульса. При этом длина свободного пробега фононов может при оценках считаться постоянной величиной (порядка линейного размера кристалла L), не зависящей от k .

В этом случае при порядковой оценке можно в (12.18) вынести фононную длину свободного пробега порядка L за знак интеграла. Это дает (Н. В. Г. Casimir, 1938)

$$\kappa \simeq L \bar{v} \left(\frac{T}{\hbar v} \right)^3. \quad (14.6)$$

Таким образом, теплопроводность, которая определяется рассеянием фононов на границах образца, пропорциональна T^3 .

§ 15. Дисперсия теплопроводности. Уравнения фононной гидродинамики. Второй звук

В предыдущих разделах мы рассматривали возникновение потока тепла в диэлектрике под действием стационарного и пространственно-однородного градиента температуры. В настоящем разделе мы хотим исследовать связь между Q и ∇T , когда градиент температуры зависит от времени t и пространственных координат r . Если эта за-

висимость достаточно плавная, то плотность потока тепла в некоторой точке кристалла и в некоторый момент времени есть линейная функция значения градиента температуры в той же самой точке и в тот же момент времени, так что сохраняет силу соотношение

$$Q = -\kappa \nabla T. \quad (15.1)$$

Представим себе теперь, что ∇T изменяется со временем достаточно быстро. Тогда соотношение (15.1) уже не имеет места: значение потока тепла в данный момент времени зависит от значений ∇T в предыдущие моменты. Возникает временная дисперсия тензора теплопроводности.

Поскольку связь между Q и ∇T остается при этом линейной, мы можем разложить ∇T как функцию времени в интеграл Фурье и изучать связь между Q и ∇T для каждой компоненты Фурье по отдельности. Коэффициент пропорциональности между компонентами Фурье будет функцией частоты ω ; это и есть проявление временной дисперсии.

Нужно подчеркнуть, что говорить об изменении температуры со временем имеет смысл, только если это изменение происходит достаточно медленно. Температура характеризуется равновесное распределение фононов, которое устанавливается за время τ_N . Таким образом, характерные частоты изменения температуры должны удовлетворять условию

$$\omega \tau_N \ll 1. \quad (15.2)$$

С другой стороны, нас интересует ситуация, когда временная дисперсия теплопроводности играет существенную роль. Для этого период изменения градиента температуры, $1/\omega$, должен быть меньше, чем характерное фононное время релаксации, определяющее процесс переноса тепла. Такое требование не противоречит условию (15.2) при низких температурах, когда теплопроводность определяется характерным временем τ_V (или, в общем случае, τ_x), которое мы будем считать гораздо больше, чем τ_N . Следует ожидать, что сильная временная дисперсия теплопроводности имеет место при частотах ω , удовлетворяющих неравенству

$$\omega \tau_x \gg 1. \quad (15.3)$$

Представим себе теперь, что ∇T изменяется не только во времени, а и в пространстве. В этом случае значения потока тепла в данной точке могут зависеть от значений градиента температуры в соседних точках, т. е. имеет место пространственная дисперсия теплопроводности.

Говорить об изменении температуры в пространстве тоже можно, только если она меняется достаточно медленно. Именно: равновесное распределение фононов устанавливается на длине порядка $l_N = v\tau_N$. Поэтому волновой вектор q , характеризующий пространственный масштаб изменения температуры, должен удовлетворять условию

$$ql_N \ll 1. \quad (15.4)$$

Если в начальный момент времени система фононов была выведена из состояния равновесия, то за время τ_N в ней устанавливается равновесное распределение вида

$$N = N_0(\Omega - kV) = n_0 \left(\hbar \frac{\Omega - kV}{T} \right). \quad (15.5)$$

Релаксация дрейфовой скорости V происходит, как мы видели, гораздо медленнее — за характерное время τ_v . Таким образом, состояние с распределением (15.5) можно рассматривать как состояние неполного термодинамического равновесия, а величину V — как добавочную термодинамическую переменную, характеризующую (наряду с T) это состояние.

Наряду с парой переменных T и V состояние неполного термодинамического равновесия можно характеризовать и другой парой переменных

$$U = \int d\xi_k \hbar \Omega N, \quad (15.6)$$

$$P = \int d\xi_k \hbar k N, \quad (15.7)$$

имеющих смысл, соответственно, плотности внутренней энергии и квазиимпульса системы. Суммирование в этих выражениях производится фактически только по акустическим колебательным ветвям, поскольку при низких температурах, когда справедливо наше рассмотрение, оптические ветви не возбуждены. Все прочие термодинамические величины выражаются через избранную пару с

помощью термодинамических соотношений, характеризующих данное состояние неполного равновесия.

Еще одной термодинамической переменной служит объем системы или, в общем случае, тензор деформации. В данной главе мы будем рассматривать процессы при постоянной деформации. Более общий случай взаимодействия потоков тепла с переменной деформацией будет рассмотрен в §§ 31, 32.

Наряду с U , введем также величину

$$\tilde{U} = \int d\xi_k \hbar (\Omega - kV) N. \quad (15.8)$$

Очевидно,

$$\tilde{U} = U - PV. \quad (15.9)$$

\tilde{U} представляет собой среднее от той же самой комбинации величин, которая входит и в аргумент равновесной функции распределения фононов. Применяя в этом случае известную теорему статистической физики¹⁾, мы получаем, что

$$\left(\frac{\partial \tilde{U}}{\partial V} \right)_S = -P.$$

Отсюда при постоянной деформации

$$d\tilde{U} = T dS - P dV, \quad (15.10)$$

$$dU = T dS + V dP. \quad (15.11)$$

В настоящем разделе мы хотим получить замкнутую систему уравнений, связывающих эти величины, в пренебрежении всеми диссипативными процессами, в том числе и обусловленными процессами, не сохраняющими

¹⁾ Согласно этой теореме, при термодинамическом усреднении производной от функции Гамильтона по какому-либо параметру получается производная от внутренней энергии системы по этому параметру, взятая при постоянной энтропии (см. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Статистическая физика.— М.: Наука, 1976, с. 57; Кубо Р. Статистическая механика.— М.: Мир, 1967, с. 40).

В нашем случае $\hbar(\Omega - kV)$ можно рассматривать формально как функцию Гамильтона фонона; (15.5) есть равновесная функция распределения фононов, зависящая от величины $\hbar(\Omega - kV)$; роль параметра, по которому производится дифференцирование, играет V .

квазимпульс. Ограничимся линейным приближением, считая скорость дрейфа малой. Тогда между \mathbf{P} и \mathbf{V} имеет место линейная связь

$$P_i = \psi_{ii} V_i, \quad (15.12)$$

где

$$\psi_{ii} = - \left(\frac{\partial^2 \tilde{U}}{\partial V_i \partial V_i} \right)_S \quad (15.13)$$

— симметричный тензор, имеющий размерность плотности. Явное выражение для него проще всего получить, воспользовавшись определением (15.7) и подставив в него первый член разложения по V функции распределения (15.5). Это дает

$$\psi_{ii} = \frac{\hbar^2}{T} \int d\xi_k k_i k_i N_0 (N_0 + 1). \quad (15.14)$$

По порядку величины

$$\psi \simeq \frac{T^4}{\hbar^3 v^5}. \quad (15.15)$$

Плотность квазимпульса \mathbf{P} должна удовлетворять уравнению вида

$$\frac{\partial P_i}{\partial t} - \frac{\partial F_{il}}{\partial r_l} = 0, \quad (15.16)$$

где F_{ii} — тензор плотности потока квазимпульса. Обозначим посредством $F_{il}^{(0)}$ этот тензор, вычисленный в пренебрежении диссипативными эффектами. Мы покажем, что

$$F_{il}^{(0)} = F \delta_{il}, \quad (15.17)$$

где F — плотность свободной энергии фононного газа. Действительно, по определению

$$F_{il}^{(0)} = - \int d\xi_k \hbar k_i \frac{\partial \Omega}{\partial k_l} N_0. \quad (15.18)$$

Функцию распределения фононов в этом выражении мы будем считать равной $N_0(\Omega)$, пренебрегая поправкой, пропорциональной V^2 , учет которой в интеграле (15.18) лежит за пределами точности расчета.

Примем во внимание тождество

$$N_0 = -(T/\hbar) \partial \ln(1 + N_0) / \partial \Omega$$

и перепишем (5.18) в виде

$$F_{il}^{(0)} = T \int d\xi_k k_i \frac{\partial}{\partial k_l} \ln(1 + N_0). \quad (15.19)$$

Проинтегрируем это выражение по частям. Внеинтегральный член обратится в нуль, и мы получим

$$F_{il}^{(0)} = - \delta_{il} T \int d\xi_k \ln(1 + N_0). \quad (15.20)$$

Сравнивая эту формулу с зависящей от T частью выражения (5.9) для плотности свободной энергии фононного газа¹⁾, получаем соотношение (15.17).

Учитывая, что плотность свободной энергии $F = U - TS$ и, следовательно,

$$dF = -S dT + V dP,$$

а значит,

$$\left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_P = -S, \quad (15.21)$$

мы можем переписать (15.16) в виде

$$\frac{\partial P}{\partial t} + S \nabla T = 0. \quad (15.22)$$

Другим уравнением, устанавливающим связь между введенными величинами, служит закон сохранения энергии

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \text{div } Q = 0. \quad (15.23)$$

Мы видели, что величины Q и V пропорциональны друг другу и связаны соотношением (13.19):

$$Q = TS V.$$

В отсутствие диссипации полная энтропия системы сохраняется и, следовательно, величина \dot{S} должна быть равна дивергенции некоторого вектора. Убедимся в этом. Из (15.11) мы имеем

$$\dot{S} = \frac{1}{T} \dot{U} - \frac{1}{T} V \dot{P}.$$

С учетом (15.22), (15.23) и (13.19) это соотношение

¹⁾ Для которой мы сохраним обозначение F .

приводится к нужному виду:

$$\dot{S} + \operatorname{div} SV = 0. \quad (15.24)$$

Выпишем полную систему дифференциальных уравнений, связывающих в линейном приближении градиент температуры и дрейфовую скорость фононов $V(r, t)$. Последняя, как мы знаем, представляет собой среднюю скорость газа взаимодействующих фононов в данной точке пространства и в данный момент времени и в этом отношении аналогична гидродинамической скорости обычной жидкости или газа. Поэтому соответствующую систему уравнений мы будем называть *уравнениями фононной гидродинамики*. Она имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} \dot{P} + S \nabla T &= 0, \\ C \dot{T} + ST \operatorname{div} V &= 0, \\ P_i &= \psi_{ii} V_i. \end{aligned} \quad (15.25)$$

Здесь мы учли, что $\dot{U} = C \dot{T}$, где C — удельная теплоемкость при $V = 0$.

В качестве граничных условий к этой системе могут быть заданы (в зависимости от условий теплообмена между диэлектриком и телами, находящимися с ним в тепловом контакте) значения температуры или же нормальной компоненты дрейфовой скорости на поверхности диэлектрика. В более общем случае на поверхности может быть задана линейная комбинация той и другой величины.

Система уравнений (15.25) имеет решения вида незатухающих волн — так называемые волны второго звука в твердом теле (J. C. Ward, J. Wilks, 1951). Чтобы найти эти решения, продифференцируем второе уравнение по времени:

$$\ddot{T} = -\frac{ST}{C} \operatorname{div} \dot{V},$$

а \dot{V} выразим из первого уравнения с учетом соотношения $\dot{V} = \psi^{-1} \dot{P}$. Это дает

$$\ddot{T} = \frac{TS^2}{C} \psi_{ii}^{-1} \frac{\partial^2 T}{\partial r_i \partial r_i}. \quad (15.26)$$

Будем считать, что температура T есть сумма постоянной части (для которой мы сохраним обозначение T) и переменной добавки ΔT , изменяющейся в пространстве и во времени по закону

$$\Delta T \sim e^{i(qr - \omega t)}. \quad (15.27)$$

Подставляя (15.27) в (15.26), получаем закон дисперсии второго звука

$$\omega^2 = \frac{TS^2}{C} \psi_{ii}^{-1} q_i q_i. \quad (15.28)$$

Второй звук, таким образом, представляет собой температурные волны в твердом теле. Волновой вектор в этих волнах направлен по P , а групповая скорость $\partial \omega / \partial q$ — по V , т. е. по направлению потока энергии (тепла). Принимая во внимание соотношение $C = 3S$, справедливое при низких температурах, мы можем переписать закон дисперсии второго звука в виде

$$\omega^2 = \frac{TC}{9} \psi_{ii}^{-1} q_i q_i. \quad (15.29)$$

Пользуясь выражением (5.18) и оценкой (15.15), можно заключить, что скорость второго звука

$$w_{II} \simeq (TC/\psi)^{1/2} \quad (15.30)$$

равна по порядку величины скорости обычного звука.

Температурные волны второго звука могут распространяться не только в твердых телах, а и в гелии II. Фактически вывод об их существовании и был сделан сначала для гелия II (L. Tisza, 1938; Л. Д. Ландау, 1941) и лишь впоследствии перенесен на твердые тела.

Закон дисперсии II звука в гелии II в интересующей нас фононной области температур можно получить непосредственно из выражения (15.29). В изотропной жидкости, каковой является гелий II, тензор ψ_{ii} сводится к скаляру:

$$\psi_{ii} = \psi \delta_{ii}.$$

Величина $\psi(T)$ называется *нормальной частью плотности жидкости* и представляет собой коэффициент в линейном соотношении

$$P = \psi V,$$

где под P следует понимать плотность истинного импульса (а не квазиимпульса, как в кристалле), а V — это дрейфовая скорость фононов в той системе координат, где жидкость покоится. Подставляя в интеграл (15.14) закон дисперсии фононов $\Omega = vk$, мы получаем следующее точное выражение для нормальной части плотности гелия II:

$$\psi = \frac{2\pi^2 T^4}{45h^3 v^5}. \quad (15.31)$$

Учитывая, что удельная теплоемкость гелия II

$$C = \frac{2\pi^2 T^3}{15h^3 v^3},$$

получаем закон дисперсии II звука в гелии II в фононной области температур (Л. Д. Ландау, 1941):

$$w_{II} = v/\sqrt{3}. \quad (15.32)$$

Следует заметить, что во всей фононной области температур выполняется неравенство

$$\psi \ll \rho,$$

где ρ — плотность гелия II; дисперсионное соотношение (15.32) имеет место в наименьшем приближении по параметру ψ/ρ ¹⁾.

¹⁾ В теории сверхтекучести Ландау в качестве переменных скоростей используются следующие величины: так называемые сверхтекучая скорость $v_s = \dot{u}$ и нормальная скорость $v_n = V + \dot{u}$. Таким образом, дрейфовая скорость $V = v_n - v_s$.

С отличной от нуля скоростью V в гелии II связан (в отличие от твердых тел) некоторый поток массы. Если обций перенос массы отсутствует, то этот поток массы должен быть скомпенсирован потоком, пропорциональным сверхтекучей скорости \dot{u} (u — смещение данного участка жидкости).

При $\dot{u} \neq 0$ в выражении для частоты фононов возникает добавка, обусловленная эффектом Доплера и пропорциональная \dot{u} . Этой добавки мы не учитываем, так как она пропорциональна, помимо дрейфовой скорости V , взятой с обратным знаком, также и малому отношению ψ/ρ ; соответственно, учет вклада от нее, например, в выражение для P дал бы член высшего порядка по ψ/ρ .

§ 16. Диссипативные члены в уравнениях фононной гидродинамики. Поглощение второго звука

В системе фононов диссипация может происходить по двум причинам. Первой являются процессы переброса. Их можно учесть, дополнив уравнение (15.22) слагаемым, описывающим релаксацию квазиимпульса. Скорость релаксации должна быть в линейном приближении пропорциональна плотности квазиимпульса, так что в итоге получается уравнение:

$$\frac{\partial P_i}{\partial t} + S \frac{\partial T}{\partial r_i} + D_{ii} P_i = 0.$$

Коэффициенты D_{ii} порядка $1/\tau_V$ (в общем случае, когда релаксация квазиимпульса может происходить также благодаря рассеянию фононов дефектами решетки, они порядка $1/\tau_k$)¹⁾. В статическом случае (или вообще при $\omega\tau_k \ll 1$) это уравнение должно давать обычное выражение для потока тепла:

$$Q_i = -\kappa_{ii} \partial T / \partial r_i.$$

Отсюда с учетом (15.12) и (13.19) получаем следующее тензорное равенство:

$$\kappa^{-1} = \frac{1}{TS^2} D\psi,$$

с учетом которого уравнение для \dot{P} запишется в виде

$$\frac{\partial P_i}{\partial t} + S \frac{\partial T}{\partial r_i} + TS^2 \kappa_{ii}^{-1} V_i = 0. \quad (16.1)$$

При более высоких частотах, если величины P , V и Q меняются со временем по закону $e^{-i\omega t}$, уравнение (16.1) дает следующую связь между градиентом температуры и Q :

$$Q = -\tilde{\kappa} \nabla T, \quad \tilde{\kappa}^{-1} = \kappa^{-1} - \frac{i\omega}{TS^2} \psi. \quad (16.2)$$

Это выражение описывает временную дисперсию теплопроводности. В кристаллах кубической симметрии, где

¹⁾ Тензор λ , введенный в § 13, связан с тензором D соотношением $\lambda = D\psi$.

тензоры второго ранга вырождаются в скаляры, мы получаем отсюда

$$\tilde{\kappa} = \frac{\kappa}{1 - i\omega\tau_{\kappa}}. \quad (16.3)$$

Величина τ_{κ}^{-1} , где

$$\tau_{\kappa} = \frac{\kappa\eta}{TS^2}, \quad (16.4)$$

и есть та характерная частота, на которой начинает сказываться временная дисперсия теплопроводности.

Характерному времени τ_{κ} можно дать еще и следующее толкование. Предположим, что в момент $t=0$ создано пространственно-однородное состояние неполного равновесия с отличной от нуля дрейфовой скоростью V . Система фононов будет стремиться прийти в состояние полного равновесия; убывание V со временем будет описываться уравнением

$$\frac{\partial V}{\partial t} + \frac{TS^2}{\kappa\eta} V = 0,$$

откуда

$$V(t) = V(0) \exp(-t/\tau_{\kappa}).$$

Ранее время τ_{κ} было определено только по порядку величины. Его точное определение как времени релаксации дрейфовой скорости V дается соотношением (16.4).

Кроме процессов переброса существует и источник диссипации, связанный с нормальными процессами и проявляющийся, если величины P и T зависят от координат. Если P зависит от пространственных координат r , то нормальные столкновения приводят к процессу необратимого ее переноса типа диффузии. Этот процесс может быть описан добавочным слагаемым в тензоре плотности потока квазиимпульса, $-F'_{il}$, которое имеет вид

$$F'_{il} = v_{ilmn} \frac{\partial V_m}{\partial r_n}. \quad (16.5)$$

Это выражение аналогично вязкому вкладу в тензор плотности потока импульса вязкой жидкости: соответственно, тензор v_{ilmn} можно назвать *тензором фонон-гид-*

родинамической вязкости. Аналогичным образом, выражение для плотности потока тепла приобретает диссипативную добавку, пропорциональную ∇T :

$$Q_i = TSV_i - \chi_{ii} \partial T / \partial r_i; \quad (16.6)$$

тензор χ_{ii} можно назвать *тензором фонон-гидродинамической теплопроводности*.

Выпишем полную систему уравнений фононной гидродинамики в линейном приближении с учетом диссипативных членов:

$$\begin{aligned} \frac{\partial P_i}{\partial t} + S \frac{\partial T}{\partial r_i} - v_{ilmn} \frac{\partial^2 V_m}{\partial r_l \partial r_n} + TS^2 \kappa_{ii}^{-1} V_i = 0, \\ C \frac{\partial T}{\partial t} + \text{div} Q = 0, \end{aligned} \quad (16.7)$$

$$Q_i = TSV_i - \chi_{ii} \partial T / \partial r_i,$$

$$P_i = \chi_{ii} V_i.$$

Граничные условия к этой системе уравнений, помимо условия на нормальную компоненту скорости \dot{V} , о котором шла речь в § 15, должны также включать и условия на тангенциальные компоненты скорости. Обычно поверхность любого кристалла является шероховатой, причем размеры шероховатостей, как правило, гораздо больше характерных длин волн тепловых фононов. Поэтому отражение фононов от поверхности является диффузным. Это значит, что вблизи самой поверхности в направлении, касательном к ней, упорядоченное движение фононов должно отсутствовать. Таким образом, мы получаем граничное условие, что на поверхности тангенциальные компоненты скорости V должны обратиться в нуль.

Получим соотношение симметрии для кинетических коэффициентов v_{ilmn} и χ_{ii} (симметрия тензора χ_{ii} была установлена в § 12). Вычисляя производную по времени от энтропии с помощью (15.11), мы имеем

$$\dot{\mathcal{S}} = \int d^3r \left(\frac{1}{T} \dot{U} - \frac{1}{T} V \dot{P} \right).$$

Мы хотим получить для $\dot{\mathcal{S}}$ выражение типа (11.27) или (11.28) — квадратичное по малым отклонениям от

равновесия. Соответственно, подставим в интеграл следующее линейное выражение для $\dot{\mathbf{P}}$:

$$\dot{P}_i = -S \frac{\partial T}{\partial r_i} + \frac{\partial F'_{il}}{\partial r_l} - TS^2 \kappa_{il}^{-1} V_l \quad (16.8)$$

и $\dot{U} = -\text{div } Q$, причем пока не будем предполагать выражение для Q линейной функцией V и ∇T .

Мы имеем

$$\dot{\mathcal{P}} = \int d^3r \left(-\frac{1}{T} \text{div } Q + \frac{S}{T} V \nabla T - \frac{1}{T} V_i \frac{\partial F'_{il}}{\partial r_l} + S^2 \kappa_{il}^{-1} V_i V_l \right).$$

Интегрируя первый и третий члены по частям и учитывая, что с принятой точностью нужно считать в третьем члене температуру T постоянной, мы находим

$$\dot{\mathcal{P}} = \int d^3r \left[-\frac{\partial}{\partial r_i} \left(\frac{Q_i}{T} + \frac{1}{T} V_l F'_{li} \right) + Q \nabla \frac{1}{T} + \frac{S}{T} V \nabla T + \frac{1}{T} \frac{\partial V_i}{\partial r_l} F'_{li} + S^2 \kappa_{il}^{-1} V_i V_l \right].$$

Здесь интеграл от первого слагаемого сводится к поверхностному; считая, что поток энтропии через поверхность отсутствует, мы полагаем его равным нулю. Во второе слагаемое мы можем подставить выражение (16.6) для Q , которое дается линейной теорией, поскольку $\nabla(1/T) = -\nabla T/T^2$ есть величина, пропорциональная малому отклонению от равновесия. Окончательно мы получаем

$$\dot{\mathcal{P}} = \int d^3r \left[-\frac{1}{T^2} (Q_i - TSV_i) \frac{\partial T}{\partial r_i} + \frac{1}{T} F'_{li} \frac{\partial V_i}{\partial r_l} + S^2 \kappa_{il}^{-1} V_i V_l \right]. \quad (16.9)$$

Выберем в качестве величин x_a , фигурирующих в соотношении (11.25), переменные $Q_i - TSV_i$, F'_{li} и V_i . Тогда роль обобщенных термодинамических сил играют величины $-\partial T^{-1}/\partial r_i$, $-T^{-1}\partial V_i/\partial r_l$, $-S^2\kappa_{il}^{-1}V_l$. Коэффициенты же в линейных соотношениях, связывающих эти две группы величин, должны удовлетворять следующим со-

отношениям симметрии, вытекающим из принципа Онсагера:

$$\nu_{ilmn} = \nu_{mnl}, \quad \chi_{il} = \chi_{li}. \quad (16.10)$$

Таким образом, тензор фонов-гидродинамической вязкости ν_{ilmn} симметричен относительно перестановки первой и второй пары значков (но, вообще говоря, несимметричен относительно перестановки первого и второго или третьего и четвертого значков).

Выражение (16.9) можно переписать в следующем виде:

$$\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial t} = \int d^3r \left(\frac{1}{T^2} \chi_{il} \frac{\partial T}{\partial r_i} \frac{\partial T}{\partial r_l} + \frac{1}{T} \nu_{ilmn} \frac{\partial V_i}{\partial r_l} \frac{\partial V_m}{\partial r_n} + S^2 \kappa_{il}^{-1} V_i V_l \right). \quad (16.11)$$

В таком виде это выражение удобно использовать для расчета диссипации энергии.

Определим коэффициент поглощения второго звука. Рассмотрим простейшую геометрию, когда второй звук распространяется вдоль оси симметрии кристалла третьего или более высокого порядка (ось x), и найдем для этого случая решение системы уравнений (16.7), пропорциональное $\exp[i(qx - \omega t)]$. В этом случае система сводится к следующим уравнениям:

$$\begin{aligned} -i\omega \nu V + iqS\Delta T + \nu q^2 V + \frac{TS^2}{\kappa} V &= 0, \\ -i\omega C\Delta T + iq(TSV - iq\chi\Delta T) &= 0, \end{aligned} \quad (16.12)$$

где ΔT есть малая переменная добавка к температуре T (здесь мы опустили индексы x у компонент тензоров ν , χ и κ). Приравняв нулю определитель системы (16.12), получаем дисперсионное уравнение

$$q^2 = \frac{\omega^2 \nu C}{TS^2} \left(1 + \frac{i\nu q^2}{\nu\omega} + \frac{iTS^2}{\kappa\nu\omega} \right) \left(1 + \frac{i\chi q^2}{C\omega} \right). \quad (16.13)$$

Мы считаем, что второй звук возбуждается на поверхности диэлектрика в виде гармонического колебания частоты ω и затухает по мере удаления от поверхности. Соответственно, волновой вектор q будет считаться комплексным, так что интенсивность звука, пропорциональная квадрату его амплитуды, затухает в пространстве

как $\exp(-2 \operatorname{Im} q x)$. Коэффициент поглощения второго звука Γ_{II} характеризует закон экспоненциального убывания его интенсивности в пространстве, имеющий вид $\exp(-\Gamma_{II} x)$; таким образом,

$$\Gamma_{II} = 2 \operatorname{Im} q. \quad (16.14)$$

Будем затухание второго звука считать малым и находить методом последовательных приближений. В первом приближении (16.13) дает закон дисперсии второго звука $\omega = w_{II} q$, где, согласно (15.29), скорость второго звука

$$w_{II} = \frac{1}{3} \sqrt{\frac{TC}{\rho}}. \quad (16.15)$$

В следующем приближении получаем коэффициент затухания:

$$\Gamma_{II} = 2 \operatorname{Im} q = \omega^2 \left(\frac{\chi}{C w_{II}^3} + \frac{\nu}{w_{II}^3 \rho} \right) + \frac{TS^2}{\kappa \rho w_{II}}. \quad (16.16)$$

Он представляет собой сумму двух слагаемых; одно из них пропорционально квадрату звуковой частоты, другое же от частоты не зависит. Второй звук существует при условии

$$q \gg \Gamma_{II}.$$

Поскольку $q \propto \omega$, это неравенство нарушается как при достаточно низких, так и при достаточно высоких звуковых частотах. Может, однако, существовать промежуточный интервал частот, где затухание второго звука сравнительно мало. Чтобы выяснить, когда такой интервал существует и существует ли он вообще, нужно оценить кинетические коэффициенты χ , ν и κ . Эти оценки мы сделаем в § 17.

§ 17. Вычисление кинетических коэффициентов в уравнениях фоновой гидродинамики

Вычислим кинетические коэффициенты ν и χ , фигурирующие в уравнениях фоновой гидродинамики (16.7) при диссипативных членах, содержащих пространственные производные от V и T . При расчете будем исходить из линеаризованного кинетического уравнения для про-

странственно-неоднородной и нестационарной добавки $\Delta N(\mathbf{r}, t)$ к равновесной функции распределения фононов. Кинетическое уравнение имеет сложный вид, так как оно содержит пространственные и временные производные от функции распределения.

Решение его заметно упрощается, если использовать введенные выше малые параметры

$$\omega \tau_N \ll 1, \quad (17.1)$$

$$q l_N \ll 1 \quad (17.2)$$

и построить метод последовательных приближений по этим параметрам. Такого рода метод был предложен в кинетической теории газов Чапменом (S. Chapman, 1916) и Энскогом (D. Enskog, 1917). Мы обобщим этот метод применительно к кинетике фоновых систем.

Сущность метода заключается в следующем. Разлагая решение кинетического уравнения по малым параметрам (17.1) и (17.2), мы получаем в качестве наименьшего приближения выведенные выше макроскопические уравнения фоновой гидродинамики. В следующем приближении мы оказываемся в состоянии определить кинетические коэффициенты, фигурирующие в диссипативных членах в этих уравнениях. Весьма важно, что для нахождения этих коэффициентов уже не приходится решать пространственно-неоднородной или нестационарной задачи — они определяются однородными и стационарными решениями кинетического уравнения.

Линеаризованное кинетическое уравнение для неравновесной добавки ΔN запишем в виде ¹⁾

$$\frac{\partial \Delta N}{\partial t} + \frac{\partial \Omega}{\partial \mathbf{k}} \frac{\partial N}{\partial \mathbf{r}} = -\hat{I}_N \Delta N - \hat{I}_U \Delta N. \quad (17.3)$$

Будем считать, что $\Delta N = \Delta_1 N + \Delta_2 N$, где $\Delta_1 N$ определяется выражением (13.9), а функция $\Delta_2 N$ ($|\Delta_2 N| \ll |\Delta_1 N|$) удовлетворяет условиям

$$\int d\xi_k \Delta_2 N \mathbf{k} = 0, \quad \int d\xi_k \Delta_2 N \Omega = 0. \quad (17.4)$$

¹⁾ Если кроме процессов переброса играет роль также и рассеяние фононов дефектами решетки, то в правой части (17.3) следует писать сумму операторов $\hat{I}_U + \hat{I}_d$, а характерное время, фигурирующее в оценках, будет не τ_U , а τ_d .

Они означают, что вклад от добавки $\Delta_2 N$ как в плотность квазимпульса, так и в плотность энергии равен нулю. Эти соотношения определяют однозначно величины T и V , нуждающиеся, как уже указывалось, в доопределении в неравновесном состоянии.

Если умножить уравнение (17.3) на $\hbar k_i$ и проинтегрировать по $d\xi_k$, то с учетом (17.4) получим

$$\frac{\partial P_i}{\partial t} - \frac{\partial F_{ii}}{\partial r_i} = - \int d\xi_k \hbar k_i \hat{I}_U \Delta_1 N. \quad (17.5)$$

Здесь P_i определяется выражением (15.7), а

$$F_{ii} = - \int d\xi_k \hbar k_i \frac{\partial \Omega}{\partial k_i} N. \quad (17.6)$$

Из уравнения (17.5) легко получить макроскопическое уравнение (16.1), учитывающее релаксацию квазимпульса за счет процессов переброса. Для этого подставим в интеграл (17.6) равновесную функцию распределения фононов $N_0(\Omega)$. Далее, учтем, что под знаком интеграла в (17.5) фигурирует только оператор \hat{I}_U , поскольку нормальные столкновения сохраняют квазимпульс. Под знаком оператора \hat{I}_U мы сохраним только главное слагаемое $\Delta_1 N$ и пренебрежем $\Delta_2 N$. В итоге правую часть (17.5) можно переписать в виде $-\lambda_{ii} V_i$, где λ_{ii} определяется выражением (13.15) и, в свою очередь, может быть выражено через статическую теплопроводность (13.20), что и дает уравнение (16.1), описывающее перенос и релаксацию квазимпульса.

Аналогичным образом, умножая (17.3) на $\hbar \Omega$ и интегрируя по $d\xi_k$, получаем закон сохранения энергии в форме

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \text{div } Q = 0, \quad (17.7)$$

$$Q = \int d\xi_k \hbar \Omega \frac{\partial \Omega}{\partial k} N. \quad (17.8)$$

Чтобы получить выражение для кинетических коэффициентов, описывающих диссипацию квазимпульса фононов за счет нормальных процессов, нужно подставить в интеграл (17.6) неравновесную добавку $\Delta_2 N$ к функции распределения фононов, определив, таким образом, не-

равновесную добавку F'_{ii} к тензору плотности потока квазимпульса. Чтобы вычислить $\Delta_2 N$, отбросим в правой части кинетического уравнения (17.3) член $-\hat{I}_U \Delta N$ (поскольку вклад от процессов переброса мы уже учли, вычислив последнее слагаемое в левой части (16.1)) и оставим только член, описывающий нормальные столкновения (напомним, что $\hat{I}_N \Delta_1 N = 0$). В левую же часть (17.3) подставим сумму $N_0 + \Delta_1 N$. Тогда левая часть уравнения, которую мы обозначим через $\psi(k, j)$, приобретет вид

$$\begin{aligned} \psi &= \frac{\partial}{\partial t} (N_0 + \Delta_1 N) + \frac{\partial \Omega}{\partial k} \frac{\partial}{\partial r} (N_0 + \Delta_1 N) = \\ &= \frac{1}{T} N_0 (N_0 + 1) \left(\frac{\hbar \Omega}{T} \dot{T} + \hbar k \dot{V} + \frac{\hbar \Omega}{T} \frac{\partial \Omega}{\partial k} \frac{\partial \Delta T}{\partial r} + \hbar k_i \frac{\partial \Omega}{\partial k_i} \frac{\partial V_i}{\partial r_i} \right). \end{aligned}$$

Выразим производные \dot{T} и \dot{V} в правой части с помощью уравнений (15.25). Тогда кинетическое уравнение (17.3) приводится к следующему виду:

$$\psi(k, j) = -\hat{J}_{Nj}. \quad (17.9)$$

Здесь $\psi = \psi^+ + \psi^-$,

$$\psi^+ = \frac{1}{T} N_0 (N_0 + 1) \left(\hbar k_i \frac{\partial \Omega}{\partial k_i} - \hbar \Omega \frac{S}{C} \delta_{ii} \right) \frac{\partial V_i}{\partial r_i}, \quad (17.10)$$

$$\psi^- = \frac{1}{T} N_0 (N_0 + 1) \left(\frac{\hbar \Omega}{T} \frac{\partial \Omega}{\partial k_i} \delta_{ii} - \hbar k_i S \psi_{ii}^{-1} \right) \frac{\partial T}{\partial r_i}. \quad (17.11)$$

ψ^+ и ψ^- представляют собой, соответственно, четную и нечетную (относительно замены k на $-k$) части функции $\psi(k, j)$. При записи уравнения (17.9) мы ввели новую неизвестную функцию

$$y = \Delta_2 N / N_0 (N_0 + 1)$$

и воспользовались соотношением $\hat{I} \Delta_2 N = \hat{J} y$.

Оператор \hat{J}_N имеет четыре собственные функции, соответствующие нулевому собственному значению, Ω и k_i .

Соответственно, условия разрешимости уравнения (17.9) имеют вид

$$\int d\xi_k \hbar \Omega \psi = 0, \quad \int d\xi_k \hbar k_i \psi = 0.$$

Для функций ψ^+ и ψ^- эти условия дают

$$\int d\xi_k \psi^+ \hbar \Omega = 0, \quad (17.12)$$

$$\int d\xi_k \psi^- \hbar k_i = 0. \quad (17.13)$$

Убедимся, что функции ψ^+ и ψ^- удовлетворяют этим условиям.

Рассмотрим интеграл (17.12) от первого слагаемого в выражении (17.10) для ψ^+ :

$$\int d\xi_k \frac{\hbar \Omega}{T} N_0 (N_0 + 1) \hbar k_i \frac{\partial \Omega}{\partial k_i} \frac{\partial V_i}{\partial r_i}.$$

Замечая, что

$$\frac{\hbar \Omega}{T} = \frac{\partial \sigma(N_0)}{\partial N_0}, \quad (17.14)$$

где $\sigma(N_0)$ дается выражением (11.8), мы можем привести этот интеграл к следующему виду:

$$\begin{aligned} & - \int d\xi_k \frac{\partial \sigma(N_0)}{\partial N_0} \frac{\partial N_0}{\partial (\hbar \Omega / T)} k_i \frac{\partial \hbar \Omega}{\partial k_i} \frac{\partial V_i}{\partial r_i} = \\ & = - T \int d\xi_k k_j \frac{\partial}{\partial k_j} \sigma(N_0) \frac{\partial V_i}{\partial r_i} = T \int d\xi_k \sigma(N_0) \operatorname{div} V = \\ & = TS \operatorname{div} V. \end{aligned}$$

Интеграл от второго слагаемого в (17.10) с учетом тождества

$$\frac{\partial \sigma(N_0)}{\partial (1/T)} = - \hbar \Omega N_0 (N_0 + 1) \ln \frac{N_0 + 1}{N_0}$$

и соотношения (17.14) приводится к виду

$$\frac{S}{C} \int d\xi_k \frac{\partial \sigma(N_0)}{\partial (1/T)} \operatorname{div} V = - \frac{S}{C} T^2 \frac{\partial S}{\partial T} \operatorname{div} V = - ST \operatorname{div} V$$

(здесь мы воспользовались термодинамическим соотношением $C = T \partial S / \partial T$). Сумма обоих интегралов равна нулю, что доказывает соотношение (17.12).

Чтобы убедиться в справедливости соотношения (17.13), прежде всего замечаем, что с учетом определения (15.14) тензора φ_{ij} интеграл (17.13) от второго слагаемого в выражении (17.11) для ψ^- приводится к виду $-S \partial T / \partial r_i$. В то же время интеграл от первого слагаемого:

$$\begin{aligned} & - \int d\xi_k \frac{\partial N_0}{\partial \Omega} \ln \frac{N_0 + 1}{N_0} \frac{\partial \Omega}{\partial k_i} k_i \frac{\partial T}{\partial r_i} = - \int d\xi_k \frac{\partial \sigma}{\partial N_0} \frac{\partial N_0}{\partial \Omega} \frac{\partial \Omega}{\partial k_i} k_i \frac{\partial T}{\partial r_i} = \\ & = - \int d\xi_k \frac{\partial \sigma}{\partial k_i} k_i \frac{\partial T}{\partial r_i} = \int d\xi_k \sigma \frac{\partial T}{\partial r_i} = S \frac{\partial T}{\partial r_i}, \end{aligned}$$

т. е. интегралы от первого и второго слагаемых взаимно уничтожаются.

Решение уравнения (17.9) запишем, как и выше, вводя обратный оператор \hat{J}_N^{-1} :

$$y = - \hat{J}_N^{-1} \psi + c_0 \hbar \Omega + c \hbar k. \quad (17.15)$$

Константы c_0 и c определяются четырьмя условиями (17.4):

$$\int d\xi_k \hbar \Omega N_0 (N_0 + 1) y = 0, \quad \int d\xi_k \hbar k N_0 (N_0 + 1) y = 0, \quad (17.16)$$

которые делают однозначным определение обратного оператора \hat{J}_N^{-1} .

Представим функцию $y(k)$ в виде суммы четной и нечетной частей:

$$y^+(k) = \frac{1}{2} [y(k) + y(-k)], \quad y^-(k) = \frac{1}{2} [y(k) - y(-k)].$$

Как мы убедились в § 9, оператор \hat{J} не меняет четности функции, на которую он действует. Точно таким же образом можно было бы убедиться, что сохраняет четность и оператор \hat{J}_N , а значит и оператор \hat{J}_N^{-1} . Пользуясь этим свойством, получаем, отделяя в уравнении (17.9) четную часть, выражение для функции $y^+(k)$:

$$y^+ = - \hat{J}_N^{-1} \psi^+ + c_0 \hbar \Omega. \quad (17.17)$$

Константа c_0 определяется первым условием (17.16) и оказывается равной

$$c_0 = \frac{\hbar}{CT^2} \int d\xi_k N_0 (N_0 + 1) \Omega \hat{J}_N^{-1} \psi^+.$$

Зная y^+ , можно найти F'_{lm} — диссипативную часть тензора F_{lm} :

$$F'_{lm} = - \int d\xi_k \hbar k_l \frac{\partial \Omega}{\partial k_m} \Delta_2 N.$$

Используя первое условие (17.16), нам будет удобно переписать это выражение в виде ¹⁾

$$F'_{lm} = - \hbar \int d\xi_k \left(k_l \frac{\partial \Omega}{\partial k_m} - \delta_{lm} \Omega \frac{S}{C} \right) \Delta_2 N.$$

Подставляя сюда $\Delta_2 N = N_0(N_0 + 1)y^+$, где в качестве y^+ можно взять выражение (17.17), и сравнивая получившееся выражение с формулой феноменологической теории

$$F'_{lm} = \nu_{lmnp} \partial V_n / \partial r_p,$$

мы находим тензор фонов-гидродинамической вязкости

$$\nu_{lmnp} = \frac{\hbar^2}{T} \int d\xi_k N_0(N_0 + 1) \left(k_l \frac{\partial \Omega}{\partial k_m} - \delta_{lm} \Omega \frac{S}{C} \right) \times \\ \times \hat{J}_N^{-1} N_0(N_0 + 1) \left(k_n \frac{\partial \Omega}{\partial k_p} - \delta_{np} \Omega \frac{S}{C} \right). \quad (17.18)$$

Таким образом, в выражение для ν_{lmnp} дает вклад только симметричная часть функции ψ . Из симметричности оператора \hat{J}_N^{-1} вытекает соотношение симметрии для тензора ν :

$$\nu_{lmnp} = \nu_{nplm},$$

которое мы получали в § 16, исходя из общего принципа симметрии кинетических коэффициентов.

Осталось получить порядковую оценку для компонент тензора ν . Заменяя по порядку величины обратный оператор $\hat{J}_N^{-1} N_0(N_0 + 1)$ величиной τ_N и считая, что в выражение (17.18) дают вклад одни только акустические

¹⁾ Основной вклад в этот интеграл дают длинноволновые акустические фононы, для которых, как мы видели в § 5, $S/C = 1/3$. Соответственно, выражение в скобке (которое часто будет встречаться в дальнейшем) можно представить в виде

$$k_l \frac{\partial \Omega}{\partial k_m} - \frac{1}{3} \Omega \delta_{lm}.$$

фононы, мы находим

$$\nu \simeq T \left(\frac{T}{\hbar v} \right)^3 \tau_N. \quad (17.19)$$

Для времени τ_N справедлива оценка (10.12), откуда следует, что тензор ν обратно пропорционален температуре T .

Перейдем к вычислению y^- — антисимметричной части функции y . Выражение для нее имеет вид

$$y^- = - \hat{J}_N^{-1} \psi^- + c \hbar k, \quad (17.20)$$

причем векторная константа c определяется из второго условия (17.16). Зная функцию y^- , мы можем вычислить диссипативную часть плотности потока энергии

$$Q'_i = \int d\xi_k \hbar \Omega \frac{\partial \Omega}{\partial k_i} N_0(N_0 + 1) y^-.$$

Это выражение удобно переписать в следующей форме:

$$Q'_i = \int d\xi_k \hbar \left(\Omega \frac{\partial \Omega}{\partial k_i} - T S \psi_{i1}^{-1} k_l \right) N_0(N_0 + 1) y^-. \quad (17.21)$$

Эквивалентность обоих выражений есть следствие второго соотношения (17.16).

Определяя постоянную c из (17.16), мы находим

$$c_i = \frac{1}{T} \psi_{i1}^{-1} \int d\xi_k \hbar k_l N_0(N_0 + 1) \hat{J}_N^{-1} \psi^-. \quad (17.22)$$

Подставляя выражение (17.20) для y^- с учетом (17.13) и сравнивая получившуюся формулу с феноменологическим выражением для диссипативной части плотности потока тепла $Q'_i = -\chi_{ii} \partial T / \partial r_i$, получаем следующую общую формулу для тензора фонов-гидродинамической теплопроводности:

$$\chi_{ii} = \frac{\hbar^2}{T^2} \int d\xi_k \left(\Omega \frac{\partial \Omega}{\partial k_i} - T S \psi_{im}^{-1} k_m \right) N_0(N_0 + 1) \times \\ \times \hat{J}_N^{-1} \left(\Omega \frac{\partial \Omega}{\partial k_l} - T S \psi_{ln}^{-1} k_n \right) N_0(N_0 + 1). \quad (17.23)$$

Этот тензор симметричен, как и должно быть в силу

общих принципов, и для него можно получить оценку

$$\chi \simeq \bar{v}^2 \tau_N \left(\frac{T}{h\nu} \right)^3. \quad (17.24)$$

Таким образом, тензор χ_{ij} пропорционален T^{-2} .

Воспользовавшись оценками для тензоров χ , ν и D , мы приходим, воспользовавшись (16.16), к следующей оценке для коэффициента поглощения второго звука (E. W. Prohofsky, J. A. Krumhansl, R. A. Guyer, 1964):

$$\frac{\Gamma_{II}}{q} \simeq \omega \tau_N + \frac{1}{\omega \tau_U}. \quad (17.25)$$

Здесь первое слагаемое $\ll 1$, так как только при условии $\omega \tau_N \ll 1$ фононная функция распределения имеет в первом приближении вид (15.5), и изложенная теория применима. Чтобы было также мало и второе слагаемое, частота второго звука должна удовлетворять неравенству

$$\omega \tau_U \gg 1. \quad (17.26)$$

Таким образом, второй звук может существовать в интервале частот

$$1/\tau_U \ll \omega \ll 1/\tau_N, \quad (17.27)$$

ограниченном сверху и снизу.

Еще раз подчеркнем, что под временем τ_U не обязательно понимать собственно время процессов переброса. К процессам, дающим вклад в $1/\tau_U$, можно причислить любые процессы, происходящие с несохранением квазиимпульса, например, рассеяние фононов на дефектах. В этом случае при оценках τ_U надо заменить на τ_* , и вся изложенная теория остается справедливой, если только продолжает выполняться неравенство $\tau_N \ll \tau_*$.

§ 18. «Пуазейлево» течение фононов

Уравнения фононной гидродинамики могут описывать также стационарный перенос тепла в диэлектрике под действием градиента температуры. В стационарном случае система уравнений (16.7) приобретает вид

$$S \frac{\partial T}{\partial r_i} - \nu_{ilmn} \frac{\partial^2 V_m}{\partial r_l \partial r_n} + TS^2 (\kappa^{-1})_{il} V_l = 0, \quad (18.1)$$

$$\operatorname{div} Q = 0. \quad (18.2)$$

В выражении для Q в (16.7) надо сохранить первое слагаемое TSV и пренебречь диссипативным членом, который, как мы убедимся, лежит в стационарном случае за пределами точности расчета.

Эту систему уравнений нужно дополнить соответствующими граничными условиями. Типичная ситуация, в которой наблюдаются стационарные явления фононной гидродинамики, такова. Имеется стержень цилиндрической формы, вдоль которого (в направлении оси z) создан однородный градиент температуры. Длина стержня предполагается гораздо больше его толщины. Требуется найти поток тепла, переносимый вдоль стержня.

В этой ситуации краевыми эффектами на концах стержня можно пренебречь и считать, что скорость V зависит только от поперечных координат и не зависит от координаты z . Нам, таким образом, следует задать граничные условия на боковых стенках цилиндра. Считая, что фононы отражаются от боковых стенок диффузно и стенки теплоизолированы, мы потребуем равенства нулю всех компонент V на поверхности цилиндра.

Рассмотрим решение поставленной задачи для простейшей геометрии: поток тепла распространяется в цилиндре, вырезанном вдоль оси кристалла третьего или более высокого порядка. В этом случае отлична от нуля только z -компонента вектора V . Опуская индекс z у вектора V и тензора κ , запишем для данного случая систему уравнений фононной гидродинамики

$$S \frac{\partial T}{\partial z} - \nu \Delta_2 V + \frac{TS^2}{\kappa_z} V = 0, \quad (18.3)$$

$$\frac{\partial V}{\partial z} = 0, \quad (18.4)$$

где Δ_2 — двумерный оператор Лапласа. Эти уравнения были впервые изучены Зуссманом и Теллунгом (J. A. Sussmann, A. Thellung, 1963) и Р. Н. Гуржи (1964), который принял во внимание также и последнее слагаемое в уравнении (18.3), учитывающее вклад процессов переброса.

Будем считать цилиндр круговым и искать решение системы (18.3)—(18.4), обладающее цилиндрической симметрией. Тогда система сведется к одному уравнению

относительно функции $V(r)$:

$$\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(r \frac{dV}{dr} \right) - \frac{TS^2}{\kappa\nu} V = \frac{S}{\nu} \frac{dT}{dz}. \quad (18.5)$$

Решение уравнения, удовлетворяющее граничному условию

$$V|_{r=L} = 0, \quad (18.6)$$

где L — радиус цилиндра, и условию ограниченности в точке $r=0$, есть

$$V = -\frac{\kappa}{TS} \left[1 - \frac{I_0(r/r_c)}{I_0(L/r_c)} \right] \frac{dT}{dz}, \quad (18.7)$$

где $I_n(x)$ — функция Бесселя порядка n от мнимого аргумента, а характерная длина r_c равна

$$r_c = \frac{1}{S} \sqrt{\frac{\kappa\nu}{T}}. \quad (18.8)$$

С помощью формул (17.19), (13.21) и (5.15) для этой длины легко получить оценку

$$r_c \simeq \bar{\nu} \sqrt{\tau_N \tau_U}. \quad (18.9)$$

Плотность потока тепла в стержне есть функция координаты r :

$$Q(r) = TSV(r).$$

Полный поток тепла через стержень радиуса L выражается интегралом

$$2\pi \int_0^L dr r Q(r) = -\pi L^2 \kappa \left[1 - \frac{2I_1(L/r_c)}{(L/r_c) I_0(L/r_c)} \right] \frac{dT}{dz}. \quad (18.10)$$

Можно вычислить также средний по сечению цилиндра поток тепла \bar{Q} . Эту величину удобно выразить, вводя эффективную теплопроводность $\kappa_{\text{эф}}$ соотношением

$$\bar{Q} = -\kappa_{\text{эф}} \frac{dT}{dz}. \quad (18.11)$$

Тогда, вычисляя \bar{Q} с помощью (18.10), получаем

$$\kappa_{\text{эф}} = \kappa \left[1 - \frac{2r_c}{L} \frac{I_1(L/r_c)}{I_0(L/r_c)} \right]. \quad (18.12)$$

Естественно выделить два предельных случая. При $L \gg r_c$ можно в (18.12) воспользоваться асимптотикой функций Бесселя $I_n(x) \approx e^x / \sqrt{2\pi x}$, и мы получим

$$\kappa_{\text{эф}} \simeq \kappa \left(1 - \frac{2r_c}{L} \right). \quad (18.13)$$

Получается естественный результат, что теплопроводность диэлектрического цилиндра отличается от теплопроводности массивного образца на малую величину порядка r_c/L .

Более интересен противоположный случай

$$L \ll r_c. \quad (18.14)$$

Разумеется, при этом мы должны считать, что $L \gg l_N$, иначе окажутся неприменимыми те макроскопические уравнения, на которых основывается наш расчет. Разлагая в этом случае функции Бесселя по степеням малого аргумента:

$$I_0(x) = 1 + x^2/4 + \dots, \quad I_1(x) = (x/2)(1 + x^2/8 + \dots), \quad (18.15)$$

мы получаем для среднего потока тепла

$$\bar{Q} = -\frac{L^2}{8r_c^2} \kappa \frac{dT}{dz} = -\frac{TS^2 L^2}{8\nu} \frac{dT}{dz},$$

так что

$$\kappa_{\text{эф}} = \frac{TS^2 L^2}{8\nu}. \quad (18.16)$$

Отсюда для полного потока тепла через цилиндр имеем

$$-\frac{\pi TS^2 L^4}{8\nu} \frac{dT}{dz}. \quad (18.17)$$

Это выражение пропорционально L^4 и обратно пропорционально кинетическому коэффициенту ν . Оно только обозначениями отличается от формулы Пуазейля¹⁾, описывающей количество вязкой жидкости, протекающей через трубу кругового сечения. Это естественно, поскольку пренебрежение членами высшего порядка по параметру $(L/r_c)^2$ означает по существу отбрасывание последнего

¹⁾ См. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Механика сплошных сред.— М.: Гостехиздат, 1954, с. 74; Ламб Г. Гидродинамика.— М.— Л.: Гостехиздат, 1947, с. 733.

члена в исходном уравнении (18.3). Тогда оставшаяся система уравнений совпадает с уравнениями, описывающими течение вязкой жидкости по трубе. В этом случае название «уравнения фоновой гидродинамики» приобретает буквальный смысл.

Осталось оправдать отбрасывание диссипативного члена $-\chi dT/dz$ по сравнению с учтенным слагаемым в выражении для потока тепла. Составим отношение диссипативного слагаемого к среднему потоку тепла (18.16). По порядку величины оно равно $\nu\chi/TS^2L^2$. Пользуясь для ν и χ оценками (17.19) и (17.24), соответственно, мы заключаем, что это отношение равно по порядку величины $(l_N/L)^2$. Оно всегда мало, поскольку уравнения фоновой гидродинамики применимы лишь при $l_N \ll L$.

Поучительно сравнить два выражения для теплопроводности, (14.6) и (18.16). Оба они описывают теплопроводность, ограниченную конечными размерами кристалла. Но в то время как в первом случае фононы вообще не испытывают столкновений на длине порядка L , во втором случае они испытывают большое число нормальных столкновений на длине порядка поперечных размеров образца. Поэтому в первом случае они теряют упорядоченную составляющую своего квазимульса при каждом столкновении, а во втором — только в результате «пристеночных» столкновений.

Чтобы наглядно представить себе различие этих двух случаев, сравним теплопроводность двух кристаллов, находящихся при одинаковой температуре T и имеющих одинаковые поперечные размеры L , но таких, что в первом из них нормальная длина свободного пробега $l_N^{(1)} \ll L$, а во втором $l_N^{(2)} \gg L$ ¹⁾. Составим отношение выражений (18.16) и (14.6). Оно должно быть обратно пропорционально $l_N^{(1)}$ и не зависит от $l_N^{(2)}$. Используя выражение (5.15) для S и оценку (17.19), находим, что отношение теплопроводностей равно по порядку величины $L/l_N^{(1)}$, т. е. гораздо больше единицы. Таким образом, теплопроводность в гидродинамическом режиме оказывается гораздо больше, чем в бесстолкновительном.

¹⁾ Такое различие длин l_N может быть обусловлено различием ангармонических коэффициентов этих двух диэлектриков.

Кристаллические диэлектрики в электромагнитном поле

§ 19. Диэлектрическая релаксация в пьезоэлектриках

В диэлектрике, находящемся в электрическом поле, устанавливается электрическая поляризация, пропорциональная полю. Если поле E постоянно и диэлектрик находится в равновесном состоянии, каждому значению E отвечает определенное значение индукции D .

В переменном поле поляризация также является переменной величиной, т. е. зависит от времени. При этом значение поляризации P , а значит и индукции D , в какой-то момент времени, вообще говоря, не определяется значением поля в тот же самый момент, а зависит и от значений, которые принимало поле в предыдущие моменты. Такое «запаздывание» связано с тем, что диэлектрик в переменном поле уже не может находиться в равновесии. Установление равновесия требует конечного времени, поле же изменяется непрерывно. Поэтому в любой данный момент времени t равновесное значение индукции, соответствующее мгновенному значению поля $E(t)$, не успевает установиться.

Соответственно, в диэлектрике все время протекают процессы, стремящиеся восстановить равновесие. Эти релаксационные процессы сопровождаются диссипацией механической энергии поля в тепло. Настоящая глава и посвящена изучению такого рода диэлектрических потерь энергии, или *диэлектрической релаксации*.

Подчеркнем, что, строго говоря, теория диэлектрической релаксации, которую мы здесь изложим, относится только к пьезоэлектрическим диэлектрикам. В пьезоэлектриках в электрическом поле возникает упругая деформация, пропорциональная полю E . Поэтому в них диэлектрическую релаксацию можно рассматривать только совместно с диссипацией упругой энергии. Этому посвящен § 39 главы IV. Известно, однако, большое число пьезоэлектрических кристаллов, в которых пьезоэлектри-

ческие модули малы. К таким кристаллам со слабой электромеханической связью теория, о которой будет рассказано в данной главе, также применима с достаточной точностью.

Частоту изменения поля ω мы будем считать ограниченной сверху, полагая ее гораздо меньше характерных частот электронных переходов в кристалле. В этом случае запаздывание, о котором идет речь, определяется одними только фононами и связано с неравновесностью фононной системы; электронная же часть поляризации запаздывания не испытывает.

В статическом электрическом поле индукция D равна

$$D_i = D_{0i} + \varepsilon_{ii}^{(0)} E_i, \quad (19.1)$$

где $\varepsilon_{ii}^{(0)}$ есть статическая диэлектрическая проницаемость, введенная в § 2. Как мы уже отмечали в § 2, постоянный вектор D_0 может быть отличен от нуля только в кристаллах определенной симметрии — так называемых *пироэлектриках*.

В переменном поле связь (19.1) уже не имеет места. Если, однако, скорость изменения поля достаточно мала, то связь между индукцией и полем можно написать в общем виде, добавляя в правой части (19.1) член, пропорциональный скорости изменения поля:

$$D_i = D_{0i} + \varepsilon_{ii}^{(0)} E_i - \zeta_{ii} \frac{\partial E_i}{\partial t}. \quad (19.2)$$

Записывая переменное поле в комплексной форме $E \propto e^{-i\omega t}$, мы можем переписать соотношение, связывающее перемещенную часть индукции и поле в виде

$$D_i = \varepsilon_{ii}(\omega) E_i. \quad (19.3)$$

Сравнивая (19.2) и (19.3), мы имеем

$$\varepsilon_{ii}(\omega) = \varepsilon_{ii}^{(0)} + i\omega \zeta_{ii}, \quad (19.4)$$

где $\varepsilon_{ii}^{(0)}$ — статическая диэлектрическая проницаемость, фигурирующая в (19.1). Выражение (19.4) представляет собой по существу первых два члена разложения диэлектрической проницаемости по степеням малой частоты ω .

Определим скорость диссипации энергии электрического поля в диэлектрике. Вектор плотности потока электромагнитной энергии (вектор Пойнтинга) равен

$$G^{(e)} = \frac{c}{4\pi} [EH]. \quad (19.5)$$

Энергия, диссипирующая в единице объема в единицу времени, есть $-\operatorname{div} G^{(e)}$. Вычисляя эту величину с помощью уравнений Максвелла (2.33) и пренебрегая поглощением, связанным с магнитным полем, мы получаем для полной энергии, диссипирующей в единицу времени,

$$T\dot{\mathcal{S}} = \frac{1}{4\pi} \int d^3r E \dot{D}. \quad (19.6)$$

Подставим в (19.6) выражение для E_i и $\dot{D}_i = -i\omega \varepsilon_{ii}(\omega) E_i$ в комплексном виде и произведем усреднение по периоду¹⁾ с учетом (19.4). Это дает следующее выражение для скорости диссипации плотности энергии поля:

$$T\dot{\mathcal{S}} = \frac{1}{8\pi} \omega^2 \zeta_{ii} E_i^* E_i. \quad (19.7)$$

Таким образом, скорость диссипации электрической энергии в диэлектрике пропорциональна тензору ζ . Мы будем называть его *тензором коэффициентов диэлектрической релаксации*. Его симметрия совпадает с симметрией тензора диэлектрической проницаемости ε_{ii} .

При достаточно низких частотах ω тензор ζ от ω не зависит. При увеличении ω разложение (19.4) становится

¹⁾ Здесь мы пользуемся общим правилом усреднения таких выражений, заключающихся в следующем. Пусть имеются две величины с комплексными амплитудами A и B , зависящие от времени как $e^{-i\omega t}$, и требуется найти среднее по времени от их произведения. Перейдем к вещественному представлению, в котором эти величины имеют, соответственно, вид

$$\frac{1}{2} (Ae^{-i\omega t} + A^*e^{i\omega t}) \quad \text{и} \quad \frac{1}{2} (Be^{-i\omega t} + B^*e^{i\omega t}).$$

Перемножая эти выражения и учитывая, что среднее по периоду от быстро осциллирующих функций $e^{-2i\omega t}$ и $e^{2i\omega t}$ дает нуль, мы получаем, что среднее от произведения равно

$$\frac{1}{2} \operatorname{Re} A^* B.$$

ся неприменимым: диссипативная часть тензора диэлектрической проницаемости $\varepsilon_{ii}(\omega)$ начинает зависеть от ω не по линейному закону, а сложнее.

Чтобы усреднить выражение (19.6) по периоду в этом общем случае, нужно учесть соотношение (19.3), связывающее комплексные величины E и D , и перейти описанным выше образом от комплексного представления к вещественному. Это дает

$$T\dot{S} = \frac{i\omega}{16\pi} (\varepsilon_{ii}^* - \varepsilon_{ii}) E_i E_i^*$$

С учетом соотношений симметрии тензора $\varepsilon_{ii}(\omega)^{1)}$, справедливых в отсутствие постоянного магнитного поля:

$$\varepsilon_{ii}(\omega) = \varepsilon_{ii}(\omega)$$

отсюда получается

$$T\dot{S} = \frac{\omega}{8\pi} \varepsilon_{ii}''(\omega) E_i E_i^*, \quad (19.8)$$

где $\varepsilon_{ii}''(\omega)$ есть мнимая часть тензора $\varepsilon_{ii}(\omega)$.

Полезно отметить соотношения, которым удовлетворяют вещественная часть этого тензора $\varepsilon_{ii}'(\omega)$ и его мнимая часть $\varepsilon_{ii}''(\omega)$ как функции частоты ω^2):

$$\varepsilon_{ii}'(-\omega) = \varepsilon_{ii}'(\omega), \quad \varepsilon_{ii}''(-\omega) = -\varepsilon_{ii}''(\omega). \quad (19.9)$$

Выражение (19.8) упрощается для кубических кристаллов, когда тензор ε_{ii} вырождается в скаляр: $\varepsilon_{ii} = \varepsilon \delta_{ii}$, и

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon' + i\varepsilon''. \quad (19.10)$$

Скорость диссипации плотности энергии в этом случае есть

$$T\dot{S} = \frac{\omega}{8\pi} \varepsilon''(\omega) |E|^2. \quad (19.11)$$

Поскольку диссипация, которую мы изучаем, имеет чисто решеточную природу, выразим ее через решеточную

¹⁾ См. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Электродинамика сплошных сред.— М.: Гостехиздат, 1957, с. 461, 468; Зубарев Д. Н. Неравновесная статистическая термодинамика.— М.: Наука, 1971, с. 175.

²⁾ См. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Статистическая физика, т. I.— М.: Наука, 1976, с. 430; Исихара А. Статистическая физика.— М.: Мир, 1973, с. 366.

диэлектрическую восприимчивость χ . Определим χ как величину, фигурирующую в линейном соотношении

$$P = \chi E; \quad (19.12)$$

P в данной главе будет обозначать решеточную поляризацию, т. е. полную поляризацию за вычетом электронного вклада. Величины ε и χ связаны соотношением

$$\varepsilon = \varepsilon^{(\infty)} + 4\pi\chi. \quad (19.13)$$

Поскольку $\varepsilon^{(\infty)}$ — вещественная величина, мы имеем отсюда

$$\varepsilon'' = 4\pi\chi''. \quad (19.14)$$

Подставляя (19.12) в (19.11) и принимая во внимание (19.14), получаем

$$T\dot{S} = \frac{\omega}{2} \frac{\chi''}{|\chi|^2} |P|^2 = -\frac{\omega}{2} \operatorname{Im} \frac{1}{\chi} |P|^2. \quad (19.15)$$

Очевидно, при $\omega > 0$ должно быть $\operatorname{Im} \chi^{-1} < 0$.

Чтобы обобщить (19.15) для анизотропных сред, введем тензор диэлектрической восприимчивости решетки с помощью соотношения

$$P_i = \chi_{ii} E_i. \quad (19.16)$$

Как и тензор диэлектрической проницаемости, этот тензор симметричен.

Для обратного тензора мы можем написать

$$\chi^{-1} = \xi' - i\xi'',$$

где первое слагаемое есть вещественный тензор, а второе — мнимый. Скорость диссипации плотности энергии выражается через ξ'' по формуле

$$T\dot{S} = \frac{\omega}{2} \xi_{ii}'' P_i P_i^*. \quad (19.17)$$

Тензоры ξ' и ξ'' удовлетворяют соотношениям, аналогичным (19.9):

$$\xi'(\omega) = \xi'(-\omega), \quad \xi''(\omega) = -\xi''(-\omega). \quad (19.18)$$

Главные значения тензора ξ'' при $\omega > 0$ положительны.

В следующих разделах данной главы мы определим частотную и температурную зависимости тензора ε'' для кристаллов различной симметрии.

§ 20. Взаимодействие однородного электрического поля с фононами

Определим конкретную форму взаимодействия однородного электрического поля с фононами, т. е. того взаимодействия, которое при нестационарном электрическом поле вызывает перавпесность фононной системы и связанную с ней диэлектрическую релаксацию.

В § 2 мы изучали взаимодействие электрического поля с оптическими колебаниями решетки в гармоническом приближении. Взаимодействие было резонансным: электрическое поле менялось во времени и в пространстве по тому же закону, что и вектор относительного смещения подрешеток.

Здесь же нас интересуют случаи, когда резонанс отсутствует: внешнее электрическое поле вообще не меняется в пространстве, а частота ω его изменения со временем отнюдь не совпадает с предельными частотами оптических колебаний (в основном нас будут интересовать случаи, когда частота ω гораздо меньше предельных частот). Значит, в гармоническом приближении отсутствует и взаимодействие. Таким образом, природа интересующего нас взаимодействия — ангармоническая.

Такое утверждение нуждается в уточнении. Имеются, вообще говоря, два различных источника этого взаимодействия. Во-первых, электрическое поле, поляризуя связанные электроны диэлектрика, изменяет постоянные взаимодействия атомов решетки $A_{\gamma\gamma'}^{nn}$. Во-вторых, в полярных диэлектриках электрическое поле вызывает относительное смещение подрешеток, что, благодаря решеточному ангармонизму, также приводит к изменению взаимодействия между атомами.

Ангармоническая природа второго источника взаимодействия видна непосредственно. Что же касается первого, то соответствующий член в энергии решетки представляет собой квадратичную форму из амплитуд колебаний решетки, умноженную на напряженность электрического поля. Выше (см. § 2) мы записывали внутреннюю энергию решетки в гармоническом приближении в виде квадратичной формы из компонент напряженности электрического поля и смещений атомов решетки (или же пространственных производных от этих смеще-

ний). Соответственно, кубическую форму из таких же величин естественно считать ангармонической. В частности, этот член в энергии решетки дает вклад в такие ангармонические процессы, как распад длинноволнового оптического фонона на два коротковолновых акустических.

Первый источник взаимодействия существует в любых диэлектриках, как полярных, так и неполярных; второй, очевидно, имеется только в полярных. Всю теорию диэлектрической релаксации мы будем излагать на примере полярных диэлектриков, так как это — более общий случай. Диэлектрическое поглощение в неполярных кристаллах при этом получится как частный случай.

Поскольку однородное электрическое поле не нарушает трансляционной симметрии кристалла, классификация колебаний диэлектрика в стационарном однородном поле остается такой же, как и в отсутствие поля¹⁾. Меняются только частоты колебаний, т. е. закон дисперсии фононов. В первом приближении соответствующая добавка к частоте фонона должна быть пропорциональна внешнему возмущению. В качестве такового можно выбрать либо электрическое поле E , либо любую величину, ему пропорциональную. Для большинства приложений удобнее считать внешним возмущением решеточную поляризацию P .

Запишем добавку к энергии фонона в следующем виде:

$$\hbar\Delta\Omega_j(\mathbf{k}) = -\mathcal{V}PE(\mathbf{k}, j). \quad (20.1)$$

Величина $\Delta E(\mathbf{k}, j)$ имеет размерность напряженности электрического поля. Запись (20.1) отвечает следующей физической картине. Мы можем представить себе, что в кристаллах определенной симметрии (какой именно — выяснится позже) при распространении колебания (\mathbf{k}, j) возникает постоянное, однородное электрическое поле $\Delta E(\mathbf{k}, j)$, которое можно выразить через ангармонические силовые постоянные.

Выражение (20.1) сохраняет смысл и в том случае, если P есть переменная величина. Только в этом случае $\hbar\Delta\Omega_j(\mathbf{k})$ лучше понимать не буквально как поправку

¹⁾ Так, колебание по-прежнему характеризуется вектором \mathbf{k} и номером колебательной ветви j .

к энергии фонона, а как гамильтониан взаимодействия переменной поляризации с колебаниями решетки.

Далее нам будет удобно переписать выражение (20.1) с учетом следующих двух обстоятельств. Во-первых, поправка к энергии (20.1) не должна зависеть явным образом от объема кристалла. Поэтому для описания взаимодействия удобно ввести величину, пропорциональную непосредственно произведению $\mathcal{U} \Delta E(\mathbf{k}, j)$.

Во-вторых, в зависимости от номера ветви j и волнового вектора \mathbf{k} , абсолютные значения добавок $\Delta \Omega_j(\mathbf{k})$ могут весьма существенно различаться по порядку величины. Однако, как мы убедимся ниже, относительные изменения частот оказываются, грубо говоря, одного порядка. Это естественно отразить в формуле для $\Delta \Omega_j(\mathbf{k})$, записав ее в виде

$$\Delta \Omega_j(\mathbf{k}) = \Omega_j(\mathbf{k}) \Lambda(\mathbf{k}, j) \mathbf{P}. \quad (20.2)$$

Вектор

$$\Lambda(\mathbf{k}, j) = -\frac{\mathcal{U}}{\hbar \Omega_j(\mathbf{k})} \Delta E(\mathbf{k}, j) \quad (20.3)$$

мы будем называть *вектором электрофононного потенциала*. Если поляризация \mathbf{P} медленно изменяется во времени и в пространстве, то, в соответствии со сказанным в § 4, слагаемое (20.2) играет роль потенциала поля, в котором движение фононов можно рассматривать как движение классических частиц с законом дисперсии

$$\tilde{\Omega}_j(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t) = \Omega_j(\mathbf{k}) + \Delta \Omega_j(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t). \quad (20.4)$$

Выясним, какие требования налагаются симметрией кристалла, чтобы выражение (20.1) или (20.2), линейное по \mathbf{P} , было отлично от нуля. Покажем, что необходимое условие для этого — отсутствие у кристалла центра симметрии.

Рассмотрим ограничения, налагаемые на выражение (20.2) в кристаллах с центром симметрии. Наименее жесткие ограничения возникают, очевидно, для волновых векторов общего положения, т. е. не имеющих никакой собственной симметрии.

Рассмотрим волновой вектор общего положения, \mathbf{k} . Операция обращения времени переводит выражение $\Lambda(\mathbf{k})$ в $\Lambda(-\mathbf{k})$. Операция инверсии, примененная к кри-

сталлу, в котором распространяется колебание (\mathbf{k}, j) , переводит $\Lambda(-\mathbf{k})$ в $-\Lambda(\mathbf{k})$. Таким образом, преобразование симметрии, являющееся произведением преобразований инверсии и обращения времени, с одной стороны, оставляет инвариантным волновой вектор \mathbf{k} , а с другой стороны — изменяет знак выражения (20.3). А поскольку величина $\Lambda_j(\mathbf{k})$ должна оставаться инвариантной относительно преобразований симметрии, оставляющих инвариантным волновой вектор \mathbf{k} , вектор $\Lambda(\mathbf{k})$ в этом случае должен быть тождественно равен нулю (R. A. Cowley, 1963).

В кристаллах же, лишенных центра симметрии, не существует преобразований, оставляющих инвариантным волновой вектор \mathbf{k} , занимающий общее положение. В таких кристаллах выражение (20.2) может фигурировать в качестве слагаемого в формуле для фононных частот.

Произведем микроскопическое вычисление вектора электрофононного потенциала $\Lambda(\mathbf{k}, j)$. Ограничимся рассмотрением полярных диэлектриков с двумя различными атомами, 1 и 2, в элементарной ячейке.

Требуется в выражении (6.3) для энергии тройного фононного ангармонизма выделить слагаемое $\mathcal{U}_3^{(P)}$, пропорциональное относительному смещению подрешеток \mathbf{w} и, тем самым, вектору решеточной поляризации \mathbf{P} . Выразим для этого через \mathbf{w} векторы относительного смещения подрешеток 1 и 2, которые в данном разделе будем обозначать $\mathbf{R}_1^{(w)}$ и $\mathbf{R}_2^{(w)}$.

При однородном смещении подрешеток эти векторы не зависят от номера элементарной ячейки \mathbf{n} . Из определения вектора \mathbf{w} (2.23) и соотношения

$$\rho_1 \mathbf{R}_1 + \rho_2 \mathbf{R}_2 = 0, \quad (20.5)$$

выражающего условие (1.28) неподвижности центра тяжести элементарной ячейки, мы получаем

$$\mathbf{R}_1^{(w)} = (\rho_2 / \rho \rho_1)^{1/2} \mathbf{w}, \quad \mathbf{R}_2^{(w)} = -(\rho_1 / \rho \rho_2)^{1/2} \mathbf{w}. \quad (20.6)$$

Полное смещение атома из положения равновесия запишется в виде

$$\mathbf{R}_p^{(w)} + \mathbf{R}_{np}, \quad (20.7)$$

где \mathbf{R}_{np} определяется выражением (3.22).

Подставим (20.7) в разложение (6.3) для кубической ангармонической энергии решетки и выделим слагаемое,

содержащее первую степень w . Учитывая симметрию ангармонических силовых постоянных относительно перестановки пар индексов n, γ , его можно представить в виде

$$\frac{1}{2} \sum_{\gamma_1} R_{\gamma_1}^{(w)} \sum_{\gamma_2 \gamma_3} \sum_{n_1 n_2 n_3} B_{\gamma_1 \gamma_2 \gamma_3}^{n_1 n_2 n_3} R_{n_2 \gamma_2} R_{n_3 \gamma_3}. \quad (20.8)$$

Записанное в такой форме, оно имеет вид добавки к гармонической энергии решетки:

$$\frac{1}{2} \sum_{n_2 n_3} \sum_{\gamma_2 \gamma_3} \Delta A_{\gamma_2 \gamma_3}^{n_2 n_3} R_{n_2 \gamma_2} R_{n_3 \gamma_3}, \quad (20.9)$$

где

$$\Delta A_{\gamma_2 \gamma_3}^{n_2 n_3} = \sum_{\gamma_1} R_{\gamma_1}^{(w)} \sum_{n_1} B_{\gamma_1 \gamma_2 \gamma_3}^{n_1 n_2 n_3}.$$

Это выражение соответствует физической картине, описанной в начале раздела. При относительном смещении подрешеток происходит изменение энергии колебаний решетки. Будучи чисто ангармоническим по своему происхождению, оно, тем не менее, можно быть описано как изменение гармонических силовых постоянных $A_{\gamma \gamma'}^{nn'}$, если их рассматривать как функции относительного смещения подрешеток w . В линейном по w приближении, которым мы ограничиваемся, выражение (20.9) можно переписать как

$$\frac{1}{2} \sum_{nn'} \sum_{\gamma \gamma'} (\partial A_{\gamma \gamma'}^{nn'} / \partial w) w R_{n \gamma} R_{n' \gamma'}, \quad (20.10)$$

где производная берется при $w = 0$.

Как говорилось выше, это есть только часть вклада в энергию $\mathcal{U}_3^{(P)}$. Другая часть связана с тем, что электрическое поле $E = \chi^{-1} P$ оказывает непосредственное воздействие на частоты колебаний решетки: оно поляризует связанные электроны диэлектрика и, тем самым, изменяет константы взаимодействия атомов решетки друг с другом. Соответствующее изменение потенциальной энергии решетки

$$\frac{1}{2} \sum_{nn'} \sum_{\gamma \gamma'} \frac{\partial A_{\gamma \gamma'}^{nn'}}{\partial E} E R_{n \gamma} R_{n' \gamma'}, \quad (20.11)$$

где производная берется при $E = 0$.

Полное изменение потенциальной энергии есть сумма (20.10) и (20.11):

$$\mathcal{U}_3^{(P)} = \frac{1}{2} \sum_{nn'} \sum_{\gamma \gamma'} \left(\frac{\partial A_{\gamma \gamma'}^{nn'}}{\partial w} w + \frac{\partial A_{\gamma \gamma'}^{nn'}}{\partial E} E \right) R_{n \gamma} R_{n' \gamma'}.$$

Здесь гармонические силовые постоянные рассматриваются как функции двух независимых переменных, E и w , характеризующих состояние диэлектрика; производные берутся при $E = w = 0$. Учитывая соотношения $E = \chi^{-1} P$ и $P = -\beta^T w$, можем переписать это выражение:

$$\mathcal{U}_3^{(P)} = \frac{1}{2} P \sum_{nn'} \sum_{\gamma \gamma'} \left(-\beta^{-1} \frac{\partial A_{\gamma \gamma'}^{nn'}}{\partial w} + \chi^{-1} \frac{\partial A_{\gamma \gamma'}^{nn'}}{\partial E} \right) R_{n \gamma} R_{n' \gamma'}. \quad (20.12)$$

Подставляя сюда выражение (3.22) для оператора смещения атома решетки $\hat{R}_{n \gamma}$ и принимая во внимание, что силовые постоянные $A_{\gamma \gamma'}^{nn'}$ зависят от разности $n - n'$, мы получаем следующее выражение для оператора энергии взаимодействия фононов с переменной поляризацией $\hat{\mathcal{U}}_3^{(P)}$:

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{U}}_3^{(P)} = & \frac{\hbar}{4M} P \sum_{n-n'} \sum_{\gamma \gamma'} \sum_k \sum_{j j'} \left(-\beta^{-1} \frac{\partial A_{\gamma \gamma'}^{nn'}}{\partial w} + \chi^{-1} \frac{\partial A_{\gamma \gamma'}^{nn'}}{\partial E} \right) \times \\ & \times \frac{1}{\sqrt{\Omega_{k j} \Omega_{k j'}}} e_{\gamma}^*(k, j) e_{\gamma'}(k, j') \exp[-ik(a_n - a_{n'})] \times \\ & \times (\hat{c}_{k j'} + \hat{c}_{-k j}^\dagger) (\hat{c}_{-k j} + \hat{c}_{k j}^\dagger). \end{aligned} \quad (20.13)$$

Чтобы установить связь этого выражения с электрофононным потенциалом, введенным выше, перепишем (20.13) следующим образом:

$$\begin{aligned} \mathcal{U}_3^{(P)} = & \frac{1}{2} \hbar P \sum_{j j'} \sum_k \Lambda_{j j'}(k) \sqrt{\Omega_{k j} \Omega_{k j'}} \times \\ & \times (\hat{c}_{k j'} + \hat{c}_{-k j}^\dagger) (\hat{c}_{-k j} + \hat{c}_{k j}^\dagger), \end{aligned} \quad (20.14)$$

где

$$\Lambda_{j j'}(k) = \lambda_{j j'}^{(1)}(k) + \lambda_{j j'}^{(2)}(k), \quad (20.15)$$

$$\begin{aligned} \lambda_{j j'}^{(1)}(k) = & -\beta^{-1} \frac{1}{2M \Omega_{k j} \Omega_{k j'}} \sum_{n-n'} \sum_{\gamma \gamma'} \exp[-ik(a_n - a_{n'})] \times \\ & \times e_{\gamma}^*(k, j) e_{\gamma'}(k, j') \frac{\partial A_{\gamma \gamma'}^{nn'}}{\partial w}, \end{aligned} \quad (20.15a)$$

$$\lambda_{jj'}^{(2)}(\mathbf{k}) = \chi^{-1} \frac{1}{2M\Omega_{kj}\Omega_{kj'}} \sum_{n=n'} \sum_{\gamma\gamma'} \exp[-i\mathbf{k}(\mathbf{a}_n - \mathbf{a}_{n'})] \times \\ \times e_{\gamma}^*(\mathbf{k}, j) e_{\gamma'}(\mathbf{k}, j') \frac{\partial A_{\gamma\gamma'}^{nn'}}{\partial E}. \quad (20.15б)$$

Сдвиг фононных частот $\hbar\Delta\Omega_j(\mathbf{k})$ в первом приближении представляет собой коэффициент при произведении операторов $\widehat{c}_{\mathbf{k}j}^{\dagger}\widehat{c}_{\mathbf{k}j}$ в (20.14). Поскольку с другой стороны, он дается формулой (20.2), диагональные элементы матрицы $\Lambda_{jj'}(\mathbf{k})$ и представляют собой вектор электрофононного потенциала.

Как мы видели, в кристаллах с центром симметрии $\Lambda_{jj}(\mathbf{k}) = 0$. Однако чрезвычайно важно для всей дальнейшей теории, что недиагональные компоненты матрицы $\Lambda_{jj'}(\mathbf{k})$, вообще говоря, отличны от нуля. Действительно, преобразование обращения времени переводит $\Lambda_{jj'}(\mathbf{k})$ в $\Lambda_{j'j}(-\mathbf{k})$. Преобразование же инверсии переводит эту величину в $-\Lambda_{j'j}(\mathbf{k})$. Таким образом, матрица электрофононного потенциала у кристаллов с центром симметрии должна удовлетворять условию

$$\Lambda_{j'j}(\mathbf{k}) = \Lambda_{jj'}^*(\mathbf{k}) = -\Lambda_{jj'}(\mathbf{k}), \quad (20.16)$$

т. е. диагональные компоненты должны быть равны нулю, а недиагональные должны быть чисто мнимыми.

Для матричных элементов электрического поля $\Delta E_{jj'}$ мы можем написать на основании (20.3):

$$\Delta E_{jj'}(\mathbf{k}) = -\frac{1}{\rho'} \hbar \sqrt{\Omega_j(\mathbf{k})\Omega_{j'}(\mathbf{k})} \Lambda_{jj'}(\mathbf{k}). \quad (20.17)$$

Дадим порядковую оценку величины (20.15), для чего вычислим сумму в правой части при $j=j'$. С этой целью умножим уравнение (1.10) на $e_{\gamma}^*(\mathbf{k}, j)$ и просуммируем по γ с учетом соотношения (1.22). Это дает

$$\frac{1}{M} \sum_{n=n'} \sum_{\gamma\gamma'} A_{\gamma\gamma'}^{n-n'} e_{\gamma}^*(\mathbf{k}, j) e_{\gamma'}(\mathbf{k}, j) \times \\ \times \exp[-i\mathbf{k}(\mathbf{a}_n - \mathbf{a}_{n'})] = \Omega_{kj}^2. \quad (20.18)$$

Отсюда мы получаем

$$\lambda_{jj}^{(1)}(\mathbf{k}) = -\beta^{-1} \frac{1}{\Omega_{kj}} \frac{\partial \Omega_{kj}}{\partial w}, \quad \lambda_{jj}^{(2)}(\mathbf{k}) = \chi^{-1} \frac{1}{\Omega_{kj}} \frac{\partial \Omega_{kj}}{\partial E}. \quad (20.19)$$

Производную $\partial \Omega_{kj} / \partial w$ можно оценить по порядку величины из тех соображений, что при относительном смещении подрешеток порядка \bar{a} относительное изменение частоты должно быть порядка единицы. Это дает

$$\left| \frac{\partial \Omega}{\partial w} \right| \simeq \frac{\Omega}{\rho^{1/2} \bar{a}}.$$

Аналогичным образом, если электрическое поле имеет атомный порядок $\mathcal{E}^{1/2} / \bar{a}^{3/2}$, относительное изменение фононных частот должно быть порядка единицы. Следовательно,

$$\left| \frac{\partial \Omega}{\partial E} \right| \simeq \frac{\Omega}{\mathcal{E}^{1/2} \bar{a}^{3/2}} = \frac{\Omega}{\rho^{1/2} v}.$$

Отсюда по порядку величины

$$|\lambda_{jj}^{(1)}| \simeq \frac{1}{|\beta| \rho^{1/2} \bar{a}}, \quad |\lambda_{jj}^{(2)}| \simeq \frac{1}{|\chi| \rho^{1/2} v}.$$

Далее для оценок воспользуемся значениями величин β^{-1} и χ^{-1} для кубических кристаллов:

$$\beta^{-1} = \frac{1}{\sqrt{\chi(0)} \Omega_t}, \quad \chi^{-1} = \frac{1}{\chi(0)} \frac{\Omega_t^2 - \omega^2}{\Omega_t^2},$$

где $\chi(0) = (4\pi)^{-1}(\epsilon^{(0)} - \epsilon^{(\infty)})$ — статическая диэлектрическая восприимчивость решетки.

В итоге оценки слагаемых, входящих в выражение (20.15) для электрофононного потенциала, получаются следующими:

$$|\lambda_{jj}^{(1)}| \simeq \frac{1}{\sqrt{\chi(0)}} \frac{1}{\rho^{1/2} v}, \quad |\lambda_{jj}^{(2)}| \simeq \frac{1}{\chi(0)} \frac{1}{\rho^{1/2} v} \left| \frac{\Omega_t^2 - \omega^2}{\Omega_t^2} \right|. \quad (20.20)$$

Здесь следует сделать одно существенное замечание. При выводе соотношений (20.19) мы рассмотрели реак-

цию системы на стационарные возмущения, пропорциональные w и E . В этом случае матричные элементы электрофононного потенциала $\Lambda_{jj'}$ можно вычислять по отношению к колебательным состояниям (\mathbf{k}, j) двоякого типа: 1) перестроенным под влиянием внешних возмущений; 2) невозмущенным. Далее нам с помощью формализма электрофононного потенциала придется изучать реакцию системы на действие нестационарных возмущений, причем в общем случае частота ω не обязательно мала по сравнению с фононными частотами. Поэтому в качестве системы колебательных состояний, по отношению к которым определяется матрица возмущения, удобно выбирать невозмущенные состояния. При таком выборе мы должны подставлять в выражения (20.15а) и (20.15б) векторы поляризации невозмущенных состояний. При этом можно определить аналогичным образом и недиагональные элементы матрицы $\Lambda_{jj'}(\mathbf{k})$; оценки же (20.19) будут теперь, вообще говоря, относиться как к диагональным, так и к недиагональным матричным элементам.

Следует, однако, подчеркнуть, что имеется один важный случай, к которому оценки (20.20) неприменимы. Это случай кристаллов с центром симметрии, когда обе ветви j и j' — акустические, причем $k\bar{a} \ll 1$. Чтобы дать оценку величины $\Lambda_{aa'}(\mathbf{k})$ для $a \neq a'$, запишем выражение для одного из слагаемых в (20.15), например, для второго. Имеем

$$\chi \lambda_{aa'}^{(2)}(\mathbf{k}) = \frac{1}{2M\Omega_{ka}\Omega_{ka'}} \sum_{n-n'} \sum_{\gamma\gamma'} \exp[-ik(a_n - a_{n'})] \times \\ \times e_{\gamma}^*(\mathbf{k}, a) e_{\gamma'}(\mathbf{k}, a') \frac{\partial}{\partial E} A_{\gamma\gamma'}^{nn'}.$$

Учитывая, что векторы поляризации акустических колебаний можно считать не зависящими от номера атома p в элементарной ячейке, и воспользовавшись формулой (1.30), мы можем переписать это соотношение в следующем виде:

$$\chi \lambda_{aa'}^{(2)}(\mathbf{k}) = \frac{1}{2\rho\Omega_{ka}\Omega_{ka'}} e_i^*(\mathbf{k}, a) e_{i'}(\mathbf{k}, a') \frac{\partial}{\partial E} \lambda_{ii'i'}^{(0)} k_i k_{i'}.$$

Это выражение содержит тензор пятого ранга — производную от тензора модулей упругости по полю, который

должен быть равен нулю в кристаллах с центром симметрии. Отличным от нуля может быть только следующий член разложения по $k\bar{a}$, содержащий тензор шестого ранга, и порядковая оценка для $\Lambda_{aa'}(\mathbf{k})$ получается в $k\bar{a}$ раз меньше, чем оценка (20.20) для кристаллов без центра симметрии.

Отметим, что для некоторых приложений оказывается удобнее выражать взаимодействие колебаний решетки с электрическим полем непосредственно через поле E , представляя гамильтониан взаимодействия в виде

$$\hbar V \sqrt{\Omega_j \Omega_{j'}} \Lambda'_{jj'} E. \quad (20.24)$$

Векторы $\hat{\Lambda}$ и $\hat{\Lambda}'$, очевидно, связаны соотношением

$$\hat{\Lambda}' = \chi \hat{\Lambda}. \quad (20.22)$$

Величиной $\hat{\Lambda}'$ (которую мы тоже иногда будем называть электрофононным потенциалом) приходится пользоваться для описания взаимодействия фононов с электрическим полем в неполярных кристаллах. Для этого достаточно в наших формулах положить $\epsilon^{(0)} = \epsilon^{(\infty)}$. При этом первое слагаемое в выражении

$$\Lambda' = \chi \lambda^{(1)} + \chi \lambda^{(2)} \quad (20.23)$$

обратится в нуль, поскольку производные $\partial A_{\gamma\gamma'}^{nn'}/\partial w$, которые определяются одной только механикой решетки, непосредственно не зависят от разности $\epsilon^{(0)} - \epsilon^{(\infty)}$, а диэлектрическая восприимчивость χ ей пропорциональна. Производные $\partial A_{\gamma\gamma'}^{nn'}/\partial E$ определяются связанными электронами диэлектрика и потому тоже непосредственно не зависят от разности $\epsilon^{(0)} - \epsilon^{(\infty)}$. Соответственно, второе слагаемое в выражении (20.23) при $\epsilon^{(0)} \rightarrow \epsilon^{(\infty)}$ стремится к постоянному значению, которое равно

$$\Lambda'_{jj'}(\mathbf{k}) = \frac{1}{2M\Omega_{kj}\Omega_{kj'}} \sum_{n-n'} \sum_{\gamma\gamma'} \exp[-ik(a_n - a_{n'})] \times \\ \times e_{\gamma}^*(\mathbf{k}, j) e_{\gamma'}(\mathbf{k}, j') \frac{\partial}{\partial E} A_{\gamma\gamma'}^{nn'}. \quad (20.24)$$

По порядку величины из оценки (20.20) для $\lambda_{jj}^{(2)}(\mathbf{k})$ мы имеем

$$|\Lambda'_{jj'}(\mathbf{k})| \simeq 1/\rho^{1/2} \bar{v}. \quad (20.25a)$$

Эта оценка, как нетрудно убедиться с помощью порядковых соотношений (20.20), сохраняет силу и для полярных кристаллов, если разность $\varepsilon^{(0)} - \varepsilon^{(\infty)}$ меньше или порядка единицы.

Для длинноволновых колебаний в кристаллах с центром симметрии мы имеем

$$|\Lambda'_{aa'}(\mathbf{k})| \simeq \frac{k\bar{a}}{\rho^{1/2}\bar{v}}. \quad (20.25б)$$

Подход, развитый в настоящем разделе, можно применить для описания взаимодействия длинноволновых оптических колебаний в полярных кристаллах со всеми прочими колебаниями решетки. Применим его для оценки ангармонического коэффициента $b_{ojj'}(0, -\mathbf{k}, \mathbf{k})$, описывающего рождение оптическим фононом с $\mathbf{k} = 0$, принадлежащим ветви o , двух фононов, (\mathbf{k}, j) и $(-\mathbf{k}, j')$ ¹⁾. (В § 6 мы ограничились тем, что привели только результат этой оценки.)

Соответствующее слагаемое в выражении (20.14) имеет вид

$$-\frac{\hbar}{2} w\beta \sum_{jj'} \sum_{\mathbf{k}} \Lambda_{jj'}(\mathbf{k}) \sqrt{\Omega_{kj}\Omega_{kj'}} \times \\ \times (\hat{c}_{kj'} + \hat{c}_{-kj'}^\dagger)(\hat{c}_{-\mathbf{k}j} + \hat{c}_{\mathbf{k}j}^\dagger). \quad (20.14')$$

Величину w мы здесь должны считать оператором и выразить через операторы \hat{c}_o и \hat{c}_o^\dagger рождения и уничтожения оптического фонона ветви o :

$$\hat{w} = \left(\frac{\hbar}{2\gamma\Omega_o} \right)^{1/2} \mathbf{e}_o (\hat{c}_o + \hat{c}_o^\dagger), \quad (20.26)$$

где \mathbf{e}_o есть приведенный вектор поляризации оптического колебания, определяемый выражением (1.36).

Подставляя (20.26) в (20.14') и сравнивая полученное выражение с (6.4), находим

$$b_{ojj'}(0, \mathbf{k}, -\mathbf{k}) = \\ = -\rho^{1/2}\Omega_j(\mathbf{k})\Omega_{j'}(\mathbf{k})\mathbf{e}_o\beta [\Lambda_{jj'}(\mathbf{k}) + \Lambda_{j'j}(-\mathbf{k})]. \quad (20.27)$$

Учитывая, что β равно по порядку величины Ω_t , а $|\Lambda_{jj'}|$

¹⁾ Фактически здесь может идти речь о распаде оптического фонона на два акустических с $k\bar{a} \simeq 1$.

определяется оценкой (20.20), и считая разность $\varepsilon^{(0)} - \varepsilon^{(\infty)}$ порядка единицы, получаем оценку ангармонического коэффициента (20.27):

$$|b_{ojj'}(0, \mathbf{k}, -\mathbf{k})| \simeq \Omega_j\Omega_{j'}/\bar{v}. \quad (20.28)$$

Не составляет труда обобщить данный метод для длинноволновых оптических колебаний с $k \neq 0$ и убедиться, что для соответствующего ангармонического коэффициента остается справедливой оценка (20.28).

§ 21. Вывод общих выражений для диссипативной части диэлектрической проницаемости, обусловленной двухфононными процессами

В настоящем разделе мы получим выражение для диссипативной части диэлектрической проницаемости, справедливое для кристаллов с центром симметрии при всех частотах, удовлетворяющих условию $\omega\tau \gg 1$. Здесь при $T \geq \Theta$ τ обозначает фононное время свободного пробега; при $T \ll \Theta$ мы будем понимать под τ характерное время нормальных процессов τ_N .

Условие $\omega\tau \gg 1$ означает, что неопределенность в энергии тепловых фононов \hbar/τ гораздо меньше энергии кванта переменного электрического поля $\hbar\omega$. При этом диэлектрическую релаксацию можно рассматривать как поглощение квантов поля фононной системой. При поглощении должны, естественно, удовлетворяться законы сохранения энергии и квазиимпульса. Это означает, в частности, что суммарное изменение квазиимпульса фононов, участвующих в таком процессе, должно быть равно нулю — поскольку равен нулю квазиимпульс однородного электрического поля. Следовательно, число фононов, участвующих в таком процессе, должно быть по меньшей мере равно двум. Рассмотрением двухфононных процессов мы и ограничимся, так как им соответствует наименьшее приближение по малому решеточному ангармонизму. Оба фонона должны принадлежать к разным колебательным ветвям j и j' — только в этом случае отличны от нуля матричные элементы электрофононного потенциала $\Lambda_{jj'}(\mathbf{k})$ в кристаллах с центром инверсии.

Выражения, которые мы получим, без труда обобщаются и на кристаллы без центра симметрии — достаточно

лишь учесть, что в этом случае электрофононный потенциал имеет отличные от нуля диагональные матричные элементы, так что могут рождаться и фононы, принадлежащие к одной ветви. Существенная особенность кристаллов без центра симметрии заключается, однако, в том, что двухфононные (трехквантовые) процессы дают основной вклад в релаксацию лишь при достаточно высоких частотах ω . При более низких частотах, как будет показано в § 24, преобладающую роль играет релаксация за счет трехфононных (четырёхквантовых) процессов, т. е. процессов, в которых участвуют квант поля и три фонона. Таким образом, полные диэлектрические потери в кристаллах без центра симметрии определяются суммой выражений, полученных в данном разделе и § 24.

Для расчета диссипативной части диэлектрической проницаемости полагаем, что к диэлектрику приложено переменное электрическое поле частоты ω . Это поле вызывает поляризацию решетки

$$P = \frac{1}{2} (P_0 e^{-i\omega t} + P_0^* e^{i\omega t}). \quad (21.1)$$

Энергия взаимодействия внешнего возмущения с фононами есть

$$\mathcal{U}_3^{(P)} = -\mathcal{V} P \Delta E, \quad (21.2)$$

$$\Delta E = -\frac{\hbar}{2\mathcal{V}} \sum_k \sum_{jj'} \sqrt{\Omega_j(\mathbf{k}) \Omega_{j'}(\mathbf{k})} \Lambda_{jj'}(\mathbf{k}) \times \\ \times (\hat{c}_{kj'} + \hat{c}_{-kj'}^\dagger) (\hat{c}_{-kj} + \hat{c}_{kj}^\dagger).$$

Чтобы не загромождать обозначений, начнем с вычисления мнимой части диэлектрической проницаемости кубических кристаллов. А затем укажем, какие изменения в окончательных формулах возникают в кристаллах иной симметрии.

Нам будет удобно непосредственно вычислить величину $\text{Im } \chi^{-1}$, где χ — решеточная диэлектрическая восприимчивость, определенная, согласно (19.12). Полная диэлектрическая проницаемость кристалла $\varepsilon(\omega) = \varepsilon^{(\infty)} + 4\pi\chi(\omega)$. Сравнивая это выражение с формулой (2.40), не учитывающей диссипации и потому определяющей

только вещественную часть $\varepsilon(\omega)$, мы находим

$$\text{Re } \chi^{-1} = \frac{4\pi}{\varepsilon^{(0)} - \varepsilon^{(\infty)}} \frac{\Omega_i^2 - \omega^2}{\Omega_i^2}.$$

Отсюда комплексная диэлектрическая проницаемость

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon^{(\infty)} + 4\pi (\text{Re } \chi + i \text{Im } \chi) = \\ = \varepsilon^{(\infty)} + (\varepsilon^{(0)} - \varepsilon^{(\infty)}) \frac{\Omega_i^2}{\Omega_i^2 - \omega^2 + i \frac{\varepsilon^{(0)} - \varepsilon^{(\infty)}}{4\pi} \Omega_i^2 \text{Im } \chi^{-1}} \quad (21.3)$$

(здесь мы пренебрегаем вещественной агармонической поправкой к $\varepsilon(\omega)$ вследствие ее малости). Окончательно, с учетом (2.40),

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon^{(\infty)} \frac{\Omega_i^2 - \omega^2 - i\Omega_i^2 \eta}{\Omega_i^2 - \omega^2 - i\Omega_i^2 \eta}, \quad (21.4)$$

где

$$\eta = -\frac{\varepsilon^{(0)} - \varepsilon^{(\infty)}}{4\pi} \text{Im } \chi^{-1}. \quad (21.5)$$

Таким образом, задача теории заключается в расчете $\text{Im } \chi^{-1}(\omega)$.

Для этого вычислим энергию внешнего поля, поглощаемую фононной системой. Воспользуемся известным из квантовой механики результатом¹⁾, согласно которому вероятность перехода в единицу времени между состояниями i и f под влиянием периодического внешнего возмущения равна

$$W_{if} = \frac{\pi \mathcal{V}^2}{2\hbar^2} |(\Delta E P_0)_{if}|^2 [\delta(\omega + \omega_{fi}) + \delta(\omega + \omega_{if})].$$

Здесь

$$\omega_{fi} = -\omega_{if} = (\mathcal{E}_f - \mathcal{E}_i)/\hbar.$$

где \mathcal{E}_i и \mathcal{E}_f — соответственно, энергии начального и конечного состояний системы.

¹⁾ См. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика — М.: Наука, 1974, с. 184.

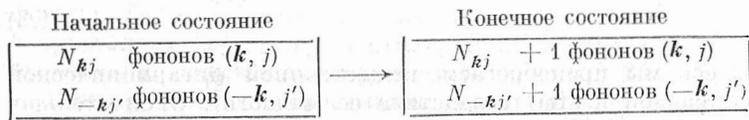
Энергия, поглощаемая в единицу времени системой, находящейся в начальном состоянии i , есть

$$\sum_f W_{if} \hbar \omega_{fi} = \frac{\pi \omega}{2 \hbar} \mathcal{V}^2 \sum_f |(\Delta E P_0)_{if}|^2 \times \\ \times [\delta(\omega - \omega_{fi}) - \delta(\omega + \omega_{fi})]. \quad (21.6)$$

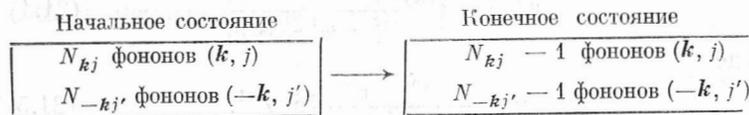
В выражение (21.6) вносят вклад фононные процессы двойного типа:

1) Процессы распада:

Поглощение энергии фононами

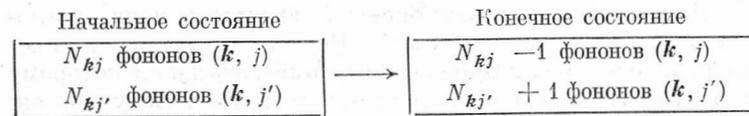


Испускание энергии фононами

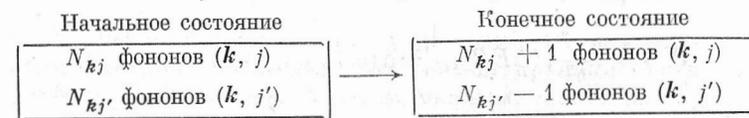


2) Процессы присоединения:

Поглощение энергии фононами



Испускание энергии фононами



Подставляя эти значения ω_{fi} в (21.6) и усредняя по равновесному распределению фононов, что сводится к замене N_{kj} равновесными функциями Планка, получаем выражение для скорости диссипации плотности энергии

$$T \dot{S} = |P_0|^2 \frac{\pi}{4} \hbar \omega \sum_{jj'} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} |\Lambda_{jj'}^{(P)}(k)|^2 \Omega_j(k) \Omega_{j'}(k) \times$$

$$\times \{[(N_{kj} + 1)(N_{-kj'} + 1) - N_{kj} N_{-kj'}] [\delta(\omega - \Omega_{kj} - \Omega_{kj'}) - \delta(\omega + \Omega_{kj} + \Omega_{kj'})] + 2[(N_{kj'} + 1)N_{kj} - (N_{kj} + 1)N_{kj'}] \delta(\omega + \Omega_{kj} - \Omega_{kj'})\}. \quad (21.7)$$

Здесь $\Lambda_{jj'}^{(P)}$ обозначает проекцию вектора $\Lambda_{jj'}$ на направление P . Сравнивая это выражение с (19.15) и (21.5), мы имеем (В. С. Виноградов, 1962)

$$\eta(\omega) = \frac{\varepsilon^{(0)} - \varepsilon^{(\infty)}}{8} \hbar \sum_{jj'} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} |\Lambda_{jj'}^{(\infty)}(k)|^2 \Omega_{kj} \Omega_{kj'} \times \\ \times \{(N_{kj} + N_{-kj'} + 1)[\delta(\omega - \Omega_{kj} - \Omega_{kj'}) - \delta(\omega + \Omega_{kj} + \Omega_{kj'})] + 2(N_{kj} - N_{kj'}) \delta(\omega + \Omega_{kj} - \Omega_{kj'})\}. \quad (21.8)$$

Ось x , на которую проектируется вектор Λ , в кубическом кристалле может быть направлена произвольным образом.

Легко проверить, что выражение (21.8) удовлетворяет соотношению $\eta(-\omega) = -\eta(\omega)$, как и должно быть в силу общего соотношения (19.18). Поэтому ниже мы ограничимся вычислением функции $\eta(\omega)$ только для $\omega > 0$.

При $\omega > 0$ выражение для η можно представить в виде

$$\eta = \eta^{(p)} + \eta^{(m)},$$

где вклад от процессов распада:

$$\eta^{(p)} = \frac{\varepsilon^{(0)} - \varepsilon^{(\infty)}}{8} \hbar \sum_{jj'} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} |\Lambda_{jj'}^{(\infty)}(k)|^2 \times \\ \times \Omega_j(k) \Omega_{j'}(k) (N_{kj} + N_{-kj'} + 1) \delta(\omega - \Omega_{kj} - \Omega_{kj'}), \quad (21.9)$$

а вклад от процессов присоединения

$$\eta^{(m)} = \frac{\varepsilon^{(0)} - \varepsilon^{(\infty)}}{4} \hbar \sum_{jj'} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} |\Lambda_{jj'}^{(\infty)}(k)|^2 \Omega_j(k) \Omega_{j'}(k) \times \\ \times (N_{kj} - N_{kj'}) \delta(\omega + \Omega_{kj} - \Omega_{kj'}). \quad (21.10)$$

Укажем теперь, какие отличия возникают при расчете диссипации энергии в анизотропных диэлектриках. Отделим в тензоре χ^{-1} вещественную и мнимую части:

$$\chi^{-1} = \xi' - i\xi'' . \text{ Для тензора } \xi''_{il} \text{ при } \omega > 0 \text{ мы получаем}$$

$$\xi''_{il} = \frac{1}{2} \pi \hbar \sum_{jj'} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \Lambda_{jj'}^{(i)}(\mathbf{k}) \Lambda_{jj'}^{(l)*}(\mathbf{k}) \Omega_j(\mathbf{k}) \Omega_{j'}(\mathbf{k}) \times$$

$$\times \{ (N_{kj} + N_{-kj'} + 1) \delta(\omega - \Omega_{kj} - \Omega_{kj'}) +$$

$$+ 2(N_{kj} - N_{kj'}) \delta(\omega + \Omega_{kj} - \Omega_{kj'}) \} . \quad (21.11)$$

Далее нас будет специально интересовать случай одноосных кристаллов. В этом случае тензоры ξ' и ξ'' могут быть одновременно приведены к главным осям, причем одна из них (ось z) направлена вдоль оси кристалла, а две другие произвольным образом в перпендикулярной ей плоскости.

Соответственно, для продольной компоненты диэлектрической проницаемости ε_3 и поперечных компонент ε_1 мы имеем выражения, аналогичные (21.4):

$$\varepsilon_{1,3}(\omega) = \varepsilon_{1,3}^{(\infty)} \frac{\Omega_{1,3}^2 - \omega^2 - i\Omega_{1,3}^2 \eta_{1,3}}{\Omega_{1,3}^2 - \omega^2 - i\Omega_{1,3}^2 \eta_{1,3}} . \quad (21.12)$$

Здесь

$$\eta_{1,3} = \eta_{1,3}^{(p)} + \eta_{1,3}^{(n)}$$

причем

$$\eta_{1,3}^{(p)} = \frac{1}{8} (\varepsilon_{1,3}^{(0)} - \varepsilon_{1,3}^{(\infty)}) \hbar \sum_{jj'} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} |\Lambda_{jj'}^{(1,3)}(\mathbf{k})|^2 \Omega_j(\mathbf{k}) \Omega_{j'}(\mathbf{k}) \times$$

$$\times (N_{kj} + N_{-kj'} + 1) \delta(\omega - \Omega_{kj} - \Omega_{kj'}) , \quad (21.13)$$

где $\Lambda^{(3,1)}$ обозначает, соответственно, проекцию вектора Λ на ось z и на плоскость, перпендикулярную оси z . Аналогично,

$$\eta_{1,3}^{(n)} = \frac{1}{4} (\varepsilon_{1,3}^{(0)} - \varepsilon_{1,3}^{(\infty)}) \hbar \sum_{jj'} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} |\Lambda_{jj'}^{(1,3)}(\mathbf{k})|^2 \Omega_j(\mathbf{k}) \Omega_{j'}(\mathbf{k}) \times$$

$$\times (N_{kj} - N_{kj'}) \delta(\omega + \Omega_{kj} - \Omega_{kj'}) . \quad (21.14)$$

Таким образом, величины η_i получаются из соответствующего выражения для кубического кристалла простой заменой матричного элемента.

Аналогичные выражения получаются и для главных значений тензора ε кристаллов ромбической системы.

Выражение для диэлектрической проницаемости кристаллов триклинной и моноклинной систем также легко получить. Мы, однако, не будем их выписывать из-за их громоздкости.

Приведем еще явное выражение для мнимой части диэлектрической проницаемости $\varepsilon''(\omega)$ в неполярных кристаллах, где $\varepsilon^{(0)} = \varepsilon^{(\infty)}$. Чтобы получить его, удобно сначала считать в наших формулах разность $\varepsilon^{(0)} - \varepsilon^{(\infty)}$ малой и отбросить члены высшего порядка по этой разности, а в ответе положить ее равной нулю, выразив ответ через величины $\Lambda'_{jj'}(\mathbf{k})$ (20.24).

Опуская индексы, указывающие номер компоненты тензора, мы имеем из (21.12):

$$\varepsilon'' = \frac{1}{4\pi} (\varepsilon^{(0)} - \varepsilon^{(\infty)})^2 \left(\frac{\Omega_i^2}{\Omega_i^2 - \omega^2} \right)^2 \xi'' = 4\pi (\text{Re } \chi)^2 \xi'' .$$

Подставляя сюда выражение (21.11) для ξ'' и принимая во внимание соотношение $\Lambda' = (\text{Re } \chi) \Lambda$, справедливое в наименьшем приближении по параметру ангармонизма, мы получаем, положив $\varepsilon^{(0)} = \varepsilon^{(\infty)}$:

$$\varepsilon''_{il} = 2\pi^2 \hbar \sum_{jj'} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \Lambda'_{jj'}^{(i)}(\mathbf{k}) \Lambda'_{jj'}^{(l)*}(\mathbf{k}) \Omega_j(\mathbf{k}) \Omega_{j'}(\mathbf{k}) \times$$

$$\times \{ (N_{kj} + N_{-kj'} + 1) \delta(\omega - \Omega_{kj} - \Omega_{kj'}) +$$

$$+ 2(N_{kj} - N_{kj'}) \delta(\omega + \Omega_{kj} - \Omega_{kj'}) \} . \quad (21.15)$$

В качестве $\Lambda'_{jj'}(\mathbf{k})$ сюда следует подставить выражение (20.24).

§ 22. Диэлектрическая релаксация, обусловленная двухфононными процессами. Низкие температуры

Определим частотную и температурную зависимости и дадим порядковые оценки величины ε'' для достаточно низких частот ω , удовлетворяющих условиям

$$\hbar \omega \ll T, \Theta . \quad (22.1)$$

В этом частотном интервале связь величины η с мнимой частью диэлектрической проницаемости ε'' в полярных кристаллах приобретает совсем простой вид. Прене-

брегая в (21.4) ω^2 по сравнению с Ω_i^2 (а значит, и с $\Omega_i'^2$) и ограничиваясь первым членом разложения по малому параметру, пропорциональному η , мы получаем

$$\varepsilon'' = (\varepsilon^{(0)} - \varepsilon^{(\infty)})\eta. \quad (22.2)$$

Здесь η дается выражением (21.8), причем фигурирующей в этом выражении электрофононный потенциал Λ можно оценить с помощью формул (20.20). При анализе случая неполярных (или слабополярных) кристаллов удобно исходить непосредственно из выражения (21.15), а для Λ' воспользоваться оценкой (20.25).

Фактически, однако, оценивать ε'' по отдельности для слабополярных кристаллов ($\varepsilon^{(0)} - \varepsilon^{(\infty)} \ll 1$) и кристаллов с выраженной полярностью ($\varepsilon^{(0)} - \varepsilon^{(\infty)} \simeq 1$) нет необходимости, поскольку при $\omega \ll \Omega_i$ оценки для обоих этих случаев совпадают. Действительно, выражение (21.15) отличается от (21.8) лишь заменой матричных элементов в подынтегральном выражении, при этом важно, что при $\varepsilon^{(0)} - \varepsilon^{(\infty)} \simeq 1$ для $|\Lambda|^2$ справедливы те же оценки (20.25), которые написаны для $|\Lambda'|^2$. Это значит, что для получения оценки величины ε'' достаточно исходить из формулы (22.2), считая $\varepsilon^{(0)} - \varepsilon^{(\infty)}$ порядка единицы.

Имеются сильнополярные диэлектрики, где разность $\varepsilon^{(0)} - \varepsilon^{(\infty)}$ аномально велика, и в этом случае возникает вопрос, как она входит в ответ. Рассмотрим вклады от первого и второго слагаемых в выражение (20.15) для $\Lambda_{jj'}$. Поскольку β^{-1} пропорционально $(\varepsilon^{(0)} - \varepsilon^{(\infty)})^{-1/2}$, вклад от первого слагаемого также пропорционален этой величине. Вклад же от второго слагаемого пропорционален $(\varepsilon^{(0)} - \varepsilon^{(\infty)})^{-1}$.

Итак, в случае сильнополярных кристаллов, когда

$$\varepsilon^{(0)} - \varepsilon^{(\infty)} \gg 1,$$

преобладает первое слагаемое в (20.15). Ограничившись этим замечанием, далее приводим все оценки для случая

$$\varepsilon^{(0)} - \varepsilon^{(\infty)} \leq 1.$$

Начнем с вычисления слагаемого $\eta^{(p)}$. В сумме по колебательным ветвям фактически фигурируют только акустические ветви a и a' : частоты Ω_{kj} не могут превысить частоту внешнего поля ω , которая в силу условия (22.1)

гораздо меньше предельной частоты Θ/\hbar . Поэтому можно пренебречь единицей по сравнению с равновесными функциями распределения N_{ka} , а для них воспользоваться приближенным выражением $N_{ka} = T/\hbar\Omega_{ka}$. В итоге мы получаем из (21.9)

$$\eta^{(p)} = \frac{\omega}{8} (\varepsilon^{(0)} - \varepsilon^{(\infty)}) \times \\ \times T \sum_{a,a'} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} |\Lambda_{aa'}^{(x)}(k)|^2 \delta(\omega - \Omega_{ka} - \Omega_{ka'}). \quad (22.3)$$

При анализе частотных и температурных зависимостей величины ε'' мы получим в ряде случаев разные результаты для кристаллов без центра и с центром симметрии. В таких случаях мы будем в данной главе под одним номером давать две формулы. Мы будем, более этого специально не оговаривая, снабжать буквой «а» номер формулы, относящейся к кристаллам без центра симметрии, а буквой «б» — номер формулы, относящейся к кристаллам с центром симметрии.

Чтобы найти зависимость выражения (22.3) от частоты ω , нужно учесть, что частоты акустических фононов суть линейные функции волнового вектора

$$\Omega_{ka} = v_a k, \quad (22.4)$$

а скорости v_a от абсолютной величины k не зависят. Переходя в интеграле (22.3) к безразмерной переменной интегрирования $k\bar{v}/\omega$ и воспользовавшись оценками (20.25), мы находим, что слагаемое $\eta^{(p)}$ дает вклад в ε'' , по порядку величины равный

$$\varepsilon'' \simeq \frac{\omega^3 T}{\rho v^5}, \quad (22.5a)$$

$$\varepsilon'' \simeq \frac{\hbar^2 \omega^5 T}{\rho v^5 \Theta^2}. \quad (22.5б)$$

Вплоть до частот, соответствующих верхнему краю радиочастотного диапазона, эта величина даже при высоких температурах весьма мала, и ее трудно наблюдать на опыте. Физическая причина малости заключается в следующем. В интеграл (22.3) вносят вклад длинноволновые фононы, частота которых не превышает ω ,

Малость фазового объема, в котором могут происходить процессы с участием таких фононов, и определяет малость результирующего выражения.

Однако фазовый объем, а вместе с ним и величина $\eta^{(p)}$ быстро растет с увеличением частоты ω , и при частотах, удовлетворяющих неравенству $\omega \gg T/\hbar$, соответствующий вклад может стать большим. Его частотная зависимость в этом предельном случае и порядковые оценки будут даны в § 25.

Физические представления, которые привели нас к оценочной формуле (22.5), никак не использовали предположения о кубической симметрии кристалла. Поэтому у кристаллов более низкой симметрии, где имеются две или три различные величины $\eta_i^{(p)}$ (соответствующие двум или трем независимым компонентам тензора ε''), для каждой из них остается справедливой оценка (22.5).

Перейдем к анализу слагаемого $\eta^{(n)}$ (выражения (21.10) для кубического и (21.14) для одноосных кристаллов). Оценки этих выражений существенным образом зависят от того, при каких значениях волнового вектора k можно удовлетворить закону сохранения энергии

$$\Omega_{kj'} - \Omega_{kj} - \omega = 0, \quad (22.6)$$

который выражается аргументом δ -функции в интеграле (21.14). Разлагая функцию Планка $N_{kj'}$ по малой величине $\hbar\omega/T$, мы можем переписать выражение для $\eta^{(n)}$ в виде

$$\eta^{(n)} = (\varepsilon_i^{(0)} - \varepsilon_i^{(\infty)}) \frac{\hbar^2 \omega}{4T} \sum_{jj'} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} |\Lambda_{jj'}^{(l)}(k)|^2 \times \\ \times \Omega_j^2(k) N_{kj}(N_{kj} + 1) \delta(\omega + \Omega_{kj} - \Omega_{kj'}). \quad (22.7)$$

Уравнение (22.6) описывает некоторую поверхность в k -пространстве. Ее можно назвать *поверхностью сохранения*. В (22.7) можно с учетом δ -функции перейти к интегрированию по этой поверхности:

$$\eta_i^{(n)} = (\varepsilon_i^{(0)} - \varepsilon_i^{(\infty)}) \frac{\hbar^2 \omega}{4T} \sum_{jj'} \int \frac{dS_{jj'}}{(2\pi)^3} \frac{|\Lambda_{jj'}^{(l)}(k)|^2}{\left| \frac{\partial}{\partial k} (\Omega_{kj'} - \Omega_{kj}) \right|} \times \\ \times \Omega_j^2(k) N_{kj}(N_{kj} + 1). \quad (22.8)$$

Здесь $dS_{jj'}$ есть элемент площади поверхности сохранения.

В данном разделе мы рассмотрим случай низких температур, $T \ll \Theta$, когда в интегралах (22.7) или (22.8) играют роль фононные частоты гораздо меньше предельной, так что суммировать фактически приходится по акустическим колебательным ветвям a, a' .

Выясним сначала, можно ли удовлетворить соотношению (22.6) при изотропном упругом спектре. Легко убедиться, что можно, если взять в качестве ветви a' продольные фононы со скоростью распространения v_l , а в качестве ветви a — поперечные фононы со скоростью v_t . В этом случае значение k , удовлетворяющее (22.6), есть $k = \omega/(v_l - v_t)$.

При малых ω это значение k дает в мнимую часть диэлектрической проницаемости вклад порядка (22.5). Так же, как и для процессов распада, малость этого вклада определяется малостью соответствующего фазового объема. Такой вклад нас сейчас не будет интересовать.

Мы будем интересоваться, не может ли ситуация «исправить» анизотропия, т. е. не существует ли анизотропных кристаллов, где основной вклад в эффект вносят не k порядка ω/v , а k порядка $k_T = T/\hbar v \gg \omega/v$. Этим фононам соответствует значительно больший фазовый объем, и, следовательно, их вкладу могла бы отвечать гораздо большая мнимая часть диэлектрической проницаемости.

Рассмотрим с этой целью изочастотные поверхности (поверхности постоянной частоты)¹⁾

$$\Omega_a(k) = \omega_1 \quad (22.9)$$

для анизотропных кристаллов. В соответствии со сказанным, нас будет интересовать форма изочастотных поверхностей (22.9) для значений константы ω_1 порядка T/\hbar .

Наряду с поверхностями (22.9), рассмотрим также поверхности

$$\Omega_a(k) = \omega_1 + \omega, \quad (22.10)$$

которые соответствуют изменению фононной частоты ω_1

¹⁾ О совокупности поверхностей (22.9) при различных a мы будем иногда говорить как об одной изочастотной поверхности.

на малую величину ω . Требуется выяснить, пересекаются ли поверхности (22.9) и (22.10). Если пересечение имеет место, то δ -функция в (22.7) оказывается отличной от нуля на некотором множестве точек в k -пространстве. В этом случае и может возникнуть интересная для нас ситуация, когда в интеграл (22.7) вносят вклад фононы с энергией порядка тепловой.

Чтобы представить себе две принципиально различные возможности, которые тут могут встретиться, обратимся к рис. 4. Здесь изображено несколько типичных

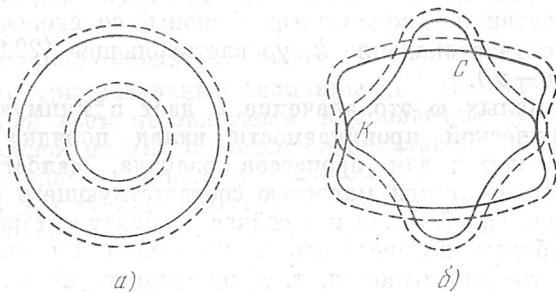


Рис. 4.

случаев сечения плоскостью изочастотных поверхностей упругого спектра кристалла. Сплошными линиями показаны сечения поверхности (22.9), а пунктирными — сечения поверхности (22.10).

Первая из возможностей показана на рис. 4, а: изочастотная поверхность состоит из отдельных частей, не имеющих общих точек. В этом случае, как видно из рисунка, при достаточно малых значениях ω и сравнительно больших значениях ω_1 пересечение поверхностей (22.9) и (22.10) отсутствует. Тепловые фононы не вносят вклада в мнимую часть диэлектрической проницаемости, и для нее остается справедливой оценка (22.5). Изотропный фононный спектр относится именно к этому случаю и изображен на рис. 4, а. С другой стороны, к этому случаю может относиться и фононный спектр двухосных кристаллов, группа симметрии которых не содержит осей третьего или более высокого порядка.

Вторая возможность заключается в том, что две ка-кие-либо поверхности (22.9), соответствующие разным

значениям номера ветви a , имеют общие точки — точки контакта¹⁾. Соответствующий пример представлен на рис. 4, б (фактически на рисунке изображено сечение изочастотных поверхностей упругого спектра кубического кристалла плоскостью, проходящей через ось третьего и четвертого порядка). Как видно из рисунка, в этом случае при сколь угодно малых значениях ω поверхности (22.9) и (22.10) обязательно пересекутся друг с другом. Пересечение может иметь различный характер. Укажем, какие тут могут встретиться варианты, ограничиваясь пока, как сказано выше, рассмотрением длинноволновых акустических колебаний, описываемых уравнениями теории упругости.

Стык изочастотных поверхностей заключается в том, что поверхности $\Omega_a(k) = \omega_1$ и $\Omega_{a'}(k) = \omega_1$ имеют контакт в изолированной точке²⁾, причем при удалении от нее на малое расстояние δk вдоль одной из поверхностей расстояния до другой поверхности растет с δk линейно. Иными словами, поверхности $\Omega_a(k) = \omega_1$ и $\Omega_{a'}(k) = \omega_1$ имеют вблизи точки стыка вид конусов с общей вершиной³⁾ (точка C на рис. 4, б).

Наличие точек стыка у поверхностей постоянной частоты обязательно в направлении оси симметрии третьего порядка, C_3 . В этом можно убедиться непосредственно, рассматривая дисперсионное уравнение теории упругости в кристаллах ромбоэдрической системы. Однако проще это сделать, используя методы теории групп.

¹⁾ Важная роль контакта изочастотных поверхностей в кинетике фононов в диэлектриках была впервые указана Херрингом (С. Herring, 1954) применительно к поглощению звука в кристаллах; соответствующие результаты изложены в § 36. На роль контакта непосредственно для явления диэлектрической релаксации указали впервые В. Я. Балагуров, В. Г. Вакс и Б. И. Шкловский (1970), построившие теорию диэлектрической релаксации в кубических сегнетоэлектриках.

²⁾ В силу центральной симметрии, которой обладают поверхности постоянной частоты, такие точки всегда встречаются парами.

³⁾ Оптические свойства двухосных кристаллов характеризуются так называемой поверхностью волновых векторов, которая обладает особенностью такого же типа (см. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Электродинамика сплошных сред.— М.: Гостехиздат, 1957, с. 409, Зоммерфельд А. Оптика.— М.: ИЛ, 1953, с. 205). Наличие такой особенности обуславливает известное явление конической рефракции света.

Рассмотрим упругие колебания, распространяющиеся вдоль оси третьего порядка (ось z) или под малыми углами к ней. Не нарушая общности, мы можем считать, что группа симметрии волнового вектора, направленного вдоль оси третьего порядка, есть C_{3v} ¹⁾. Далее можно представлять себе дело так, что имеется гамильтониан, который определяет спектр упругих колебаний, когда волновой вектор ориентирован вдоль оси C_3 . Группа C_{3v} имеет три неприводимых представления: два одномерных — A_1 и A_2 и двумерное, E . По последнему преобразуются векторы поляризации двух поперечных упругих колебаний, распространяющихся вдоль оси C_3 . Соответственно, частоты этих колебаний совпадают.

При малом отклонении волнового вектора от направления C_3 возникает малая добавка к гамильтониану вида $\hat{h}\delta k$, где δk есть малый вектор в плоскости k_x, k_y , а \hat{h} — некоторый векторный оператор. Разделение фононных ветвей может быть линейным по δk , если этот оператор имеет отличные от нуля диагональные матричные элементы.

Для того чтобы это выяснить, нужно составить прямое произведение двумерных представлений E , по которому преобразуются x - и y -компоненты вектора, δk_x и δk_y . Имеем

$$E \times E = A_1 + A_2 + E.$$

Поскольку само представление E содержится в этом произведении, то вдоль осей третьего порядка обязательно имеется стык колебательных ветвей.

Оси третьего порядка могут быть в диэлектриках, кристаллизующихся как в кубической, так и в ромбоэдрической системе. В кубических кристаллах имеется четыре оси третьего порядка и, следовательно, восемь точек стыка изочастотных поверхностей.

¹⁾ Это видно из того, что для всех классов ромбоэдрической системы можно выбрать оси x и y , перпендикулярные оси z , таким образом, чтобы остались отличными от нуля одни и те же шесть модулей упругости (см. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теория упругости. — М.: Наука, 1965, с. 56). Значит, для всех кристаллов ромбоэдрической системы остается одним и тем же закон дисперсии упругих колебаний, выраженный через эти модули.

В ромбоэдрических кристаллах имеются две точки стыка, лежащие на оси третьего порядка, т. е. обусловленные симметрией. Кроме них в ромбоэдрических кристаллах, как можно показать, исследуя дисперсионное уравнение для звуковых колебаний, имеется еще шесть дополнительных точек стыка, положение которых определяется уже не соображениями симметрии, а соотношениями между модулями упругости (см. ниже). Вблизи этих точек стыка изочастотные поверхности имеют вид эллиптических конусов. Эти точки стыка попарно расположены в трех плоскостях, переходящих друг в друга при повороте на 120° вокруг оси третьего порядка. Сечение изочастотных поверхностей одной из таких плоскостей схематически изображено на рис. 5. Точки стыка, расположенные на оси C_3 , обозначены на рисунке буквой C , а дополнительные точки стыка — буквами C' .

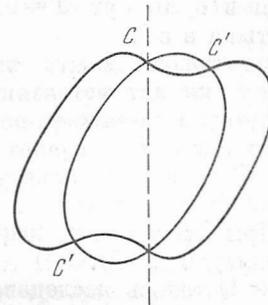


Рис. 5.

Определим вклад точек стыка в $\eta^{(n)}$. Найдем вклад от одной такой точки, например, расположенной на оси третьего порядка. Поскольку при удалении от точки стыка на малый угол ϑ расщепление частот линейно, пишем

$$\omega = \Omega_{kj'} - \Omega_{kj} = v_1 k \vartheta, \quad (22.11)$$

где v_1 — константа размерности скорости, по порядку величины равная v . Приравнявая нулю аргумент δ -функции, находим угол

$$\vartheta = \omega / v_1 k, \quad (22.12)$$

т. е. при k порядка k_T он действительно мал в силу неравенства (22.1). Интегрирование по ϑ в (22.7) сводится к вычислению интеграла

$$\int_0^\pi d\vartheta \sin \vartheta \delta(\omega - kv_1 \vartheta) \approx \int_0^\pi d\vartheta \vartheta \delta(\omega - kv_1 \vartheta) = \frac{\omega}{v_1^2 k^2}. \quad (22.13)$$

Здесь мы заменили $\sin \vartheta$ аргументом $\vartheta \ll 1$.

Далее, в коэффициенте в (22.7) перед δ -функцией мы положим $\phi = 0$ (т. е. будем считать, что вектор k направлен по оси z). Так можно поступать, если при этом соответствующая компонента матричного элемента $\Lambda_{jj}(k)$ не обратится в нуль. Вопрос о том, когда эти компоненты отличны от нуля, мы, чтобы не прерывать изложения, исследуем ниже. А сейчас, считая, что они не обращаются в нуль при $\phi = 0$, приведем оценку вклада от точки стыка в ϵ'' :

$$\epsilon'' \simeq \frac{\omega^2 T^2}{\rho v^5 \hbar^3} \quad (22.14a)$$

$$\epsilon'' \simeq \frac{\omega^2 T^4}{\rho v^5 \hbar \Theta^2} \quad (22.14б)$$

При $\hbar\omega \ll T$ эти выражения гораздо больше распадных вкладов (22.5).

Осталось исследовать поведение матричных элементов $\Lambda_{jj}(k)$ в точке стыка изочастотных поверхностей, т. е. в точке вырождения фононного спектра. Произведение $\hat{\Lambda}P$ представляет собой с точностью до множителя гамильтониан взаимодействия фононов с макроскопической поляризацией решетки. Поляризация P , а значит, и вектор $\hat{\Lambda}$ инвариантны относительно обращения времени. В этом случае, как известно¹⁾, правила отыскания компонент вектора $\hat{\Lambda}$, имеющих отличные от нуля матричные элементы, сводятся к следующему.

Нужно рассмотреть симметричную часть, $[E^2]$, прямого произведения представления E (по которому преобразуется вырожденное колебание) самого на себя. В нашем случае, когда группа волнового вектора есть C_{3v} , это прямое произведение распадается на следующие неприводимые представления:

$$[E^2] = A_1 + E.$$

Представление E двумерное; по нему преобразуются x - и y -компоненты вектора. Следовательно, x - и y -компоненты вектора $\hat{\Lambda}$ имеют матричные элементы, отличные

¹⁾ См. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика.— М.: Наука, 1974, с. 442.

от нуля. Представление A_1 единичное; по нему преобразуется z -компонента вектора. Ее оператор, таким образом, имеет только диагональные матричные элементы; недиагональный же элемент для перехода между двумя ортогональными поперечными колебаниями, который нас и интересует, должен быть равен нулю. Таким образом, точки стыка на оси C_3 дают вклад в поперечную часть тензора ϵ'' и не дают в том же приближении вклада в его продольную часть.

Вклад от дополнительных точек стыка, положение которых не связано с осью C_3 , оценивается так же, как и выше. Для расщепления частот по-прежнему справедлива формула типа (22.11), где ϕ теперь есть угол, отсчитанный от направления дополнительного стыка. Скорость v_1 теперь следует считать не константой, а функцией угла ϕ . Для вклада от дополнительных точек стыка получается прежняя оценка (22.14). Поскольку, однако, соображения симметрии теперь не требуют обращения в нуль никаких матричных элементов вектора $\hat{\Lambda}$, вклад от этих точек стыка в продольную и поперечную части тензора ϵ'' оказывается одного порядка. Таким образом, в ромбоэдрических кристаллах оценки продольной и поперечной частей тензора ϵ'' даются формулой (22.14). Та же самая оценка, очевидно, описывает и вклад от восьми точек стыка в тензор ϵ'' кубических кристаллов.

Касание изочастотных поверхностей — это такая форма контакта, когда поверхности $\Omega(k) = \omega_1$ и $\Omega_j(k) = \omega_1$ имеют одну общую точку, причем при удалении от этой точки на малое расстояние δk вдоль одной из поверхностей расстояния до другой поверхности растут квадратично с δk . Точнее, сечения поверхностей $\Omega_j(k) = \omega_1$ и $\Omega_j(k) = \omega_1$ плоскостями, проходящими через ось симметрии, имеют вблизи точки касания вид парабол, касающихся друг друга (точка касания обозначена K на рис. 4, б).

Вообще говоря, касание происходит вдоль элементов симметрии кристалла, а именно: осей четвертого или шестого порядка. В этом опять-таки легко убедиться, используя методы теории групп. Рассмотрим, например, ось четвертого порядка (ось z). Тогда группа волнового вектора есть C_{4v} . Эта группа имеет пять представлений — четыре одномерных: A_1 (единичное, по которому преобра-

зуется z -компонента вектора), A_2, B_1, B_2 и одно двумерное, E , по которому преобразуются друг через друга x - и y -компоненты вектора (следовательно, и векторы поляризации двух поперечных колебаний с совпадающими частотами, распространяющихся вдоль оси четвертого порядка). Имеем

$$E \times E = A_1 + A_2 + B_1 + B_2,$$

т. е. прямое произведение представления E самого на себя не содержит этого самого представления. Следовательно, линейный член в расщеплении фононных частот отсутствует.

Свойства группы C_{6v} очень похожи на свойства группы C_{4v} ; она имеет шесть представлений. Из них четыре одномерных: A_1 (по которому преобразуется z -компонента вектора), A_2, B_1, B_2 и два двумерных: E_1 (по которому преобразуются x - и y -компоненты вектора) и E_2 . Мы имеем

$$E_1 \times E_1 = A_1 + A_2 + E_2,$$

т. е. в этом произведении опять-таки отсутствует представление E_1 , и, следовательно, расщепление частот получается квадратичным и в этом случае.

Выясним, как ведут себя матричные элементы $\hat{\Lambda}$ в точке касания изочастотных поверхностей. Рассмотрим для определенности случай оси четвертого порядка. Поперечным колебаниям, вырожденным в направлении этой оси, соответствует двумерное представление E группы симметрии волнового вектора C_{4v} . Составляя симметричное произведение этого представления самого на себя, имеем

$$[E^2] = A_1 + B_1 + B_2.$$

Среди представлений, которые содержит в себе $[E^2]$, есть единичное представление A_1 , по которому преобразуется z -компонента вектора, но нет двумерного, по которому преобразуются друг через друга x - и y -компоненты. Отсюда следует вывод, что на оси четвертого порядка обращаются в нуль как матричные элементы x - и y -компонент оператора $\hat{\Lambda}$, так и интересующий нас недиагональный матричный элемент $\hat{\Lambda}^{(z)}$ для перехода между двумя

взаимно ортогональными поперечными колебательными ветвями. Поэтому возникает вопрос, как ведут себя эти величины при малых отклонениях вектора k от направления k_z . Недиagonalные матричные элементы компонент $\hat{\Lambda}^{(x)}$ и $\hat{\Lambda}^{(y)}$ пропорциональны этому малому отклонению, т. е. углу ϑ . В то же время недиагональный матричный элемент $\hat{\Lambda}^{(z)}$ пропорционален ϑ^2 .

Первое из этих утверждений проверяется немедленно, если заметить, что представление, по которому преобразуются величины $\partial \hat{\Lambda}^{(i)} / \partial k_i$ ($i = 1, 2$), совпадает с тем, по которому преобразуются произведения векторов поляризации двух вырожденных колебаний. Что же касается второго, то величины $\partial \hat{\Lambda}^{(z)} / \partial k_{x,y}$ преобразуются по представлению E . Но этого неприводимого представления нет среди прямого произведения представления E самого на себя, по которому преобразуется произведение векторов поляризации. Следовательно, линейный по ϑ член в данном случае должен отсутствовать.

В случае оси шестого порядка все исследование производится в точности таким же образом с той лишь разницей, что нужно рассмотреть представления группы волнового вектора C_{6v} с теми же самыми выводами относительно свойств матричных элементов.

Оценим вклад от одной точки касания в ϵ'' . Для разности фононных частот при малых отклонениях ϑ от оси z мы можем написать

$$\omega = \Omega_{kj'} - \Omega_{kj} = v_2 k \vartheta^2, \quad (22.15)$$

где v_2 есть положительная величина размерности скорости, которая, вообще говоря, зависит от угла φ , а по порядку величины равна \bar{v} . Находя угол ϑ из (22.15), мы получаем

$$\vartheta = \sqrt{\omega / v_2 k}.$$

Опять-таки при характерных k порядка k_T из неравенства $\hbar \omega \ll T$ следует $\vartheta \ll 1$. Поскольку, с другой стороны, для поперечного по отношению к оси кристалла электрического поля квадрат модуля недиагонального матричного элемента Λ пропорционален ϑ^2 , то величина $\eta^{(n)}$

(22.7) оказывается пропорциональной интегралу

$$\int_0^\pi d\theta \sin \theta \theta^2 \delta(\omega - kv_2 \theta^2) = \frac{\omega}{2(kv_2)^2}.$$

С учетом приведенной оценки недиагональных матричных элементов оператора $\hat{\Lambda}$ мы приходим к выводу, что вклад от точек касания в ϵ''_{\perp} — поперечную часть тензора ϵ'' — имеет тот же порядок величины, что и вклад от точек стыка. Вклад от точек касания в продольную часть этого тензора, ϵ''_{\parallel} оказывается, грубо говоря, в $\hbar\omega/T$ раз меньше.

У изочастотных поверхностей могут быть и такие точки контакта, наличие которых не вытекает с необходимостью из пространственной группы симметрии кристалла, а является следствием определенных соотношений между силовыми константами (в случае длинноволновых акустических фононов — между модулями упругости). В этом случае говорят, что имеет место случайный контакт изочастотных поверхностей.

Чтобы сформулировать результаты, касающиеся случайного контакта, введем сначала понятие *контакта колебательных ветвей*. Областями контакта колебательных ветвей мы будем называть совокупность всех точек в k -пространстве, где происходит контакт изочастотных поверхностей при постоянной ω_1 , пробегаящей все допустимые значения.

Как показало исследование, сделанное Херрингом (С. Hering, 1937), внутри зоны Бриллюэна случайный контакт колебательных ветвей возможен либо вдоль линий, либо в изолированных точках k -пространства. Если же ограничиться приближением теории упругости, в котором все изочастотные поверхности (22.9), соответствующие различным значениям ω_1 , подобны, то случайный контакт колебательных ветвей возможен только вдоль прямых, проходящих через точку $k = 0$. Соответственно, случайный контакт изочастотных поверхностей может иметь место только в точках, лежащих на этих прямых.

При этом оказывается, что в кристаллах, лишенных центра симметрии, линии контакта могут располагаться в плоскостях симметрии, в кристаллах же с центром сим-

метрии они, вообще говоря, могут располагаться произвольным образом¹⁾. При удалении от линий случайного контакта на малую величину δk расхождение колебательных ветвей есть, вообще говоря, линейная функция от δk . Это означает, что изочастотные поверхности имеют на линиях контакта точки контакта типа стыка.

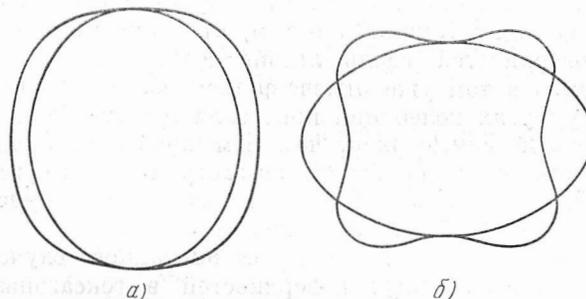


Рис. 6.

Из сказанного следует вывод относительно частотной зависимости ϵ'' для кристаллов низкой симметрии — двухосных. Если в этих кристаллах имеется случайный контакт колебательных ветвей, то оценка ϵ'' имеет вид (22.14). В противном же случае справедлива оценка (22.5), т. е. ϵ'' определяется одними только процессами с участием фононов с частотами порядка ω .

Из утверждения о невозможности контакта изочастотных поверхностей вдоль линий есть одно важное исключение. Это — гексагональные кристаллы.

Форма изочастотных поверхностей, которую дает теория упругости в таких кристаллах, схематически изображена на рис. 6, а и б. Из рисунка видно, что, помимо касания этих поверхностей в точках, лежащих на оси симметрии, они могут иметь также случайное пересечение (рис. 6, б). Поскольку упругий спектр в гексагональных

¹⁾ Выражение для упругой энергии кристалла может, вообще говоря, обладать большей симметрией, чем сам кристалл. В частности, оно инвариантно относительно преобразования инверсии. Поэтому случайные контакты упругих колебательных ветвей всегда обладают качественными особенностями, характерными для кристаллов с центром симметрии.

кристаллах обладает цилиндрической симметрией, если пересечение изочастотных поверхностей имеется, то оно происходит вдоль окружностей. Наличие же или отсутствие пересечения зависит от того, удовлетворяют ли модули упругости кристалла некоторому неравенству, и в этом смысле является случайным.

Возникает вопрос, как этот результат соотносится с общим выводом Херринга о том, что контакт изочастотных поверхностей вдоль линий должен отсутствовать. Дело здесь в том уже отмечавшемся обстоятельстве, что спектр упругих колебаний кристалла может обладать более высокой симметрией, чем сам кристалл. В данном случае это цилиндрическая симметрия вместо гексагональной, чем и объясняется необычное для кристалла вырождение колебательного спектра.

Определим вклад в ϵ'' за счет описанного случайного контакта изочастотных поверхностей в гексагональных кристаллах. Анализ, аналогичный проделанному для случая стыка, показывает, что отличны от нуля матричные элементы $\Lambda_{jj'}^{(\infty)}$ и $\Lambda_{jj'}^{(y)}$ для переходов между пересекающимися ветвями j и j' , в то время как $\Lambda_{jj'}^{(z)} = 0$. Таким образом, в нулевом приближении по ψ вклад имеется только в поперечную часть тензора ϵ'' .

При вычислении вклада нужно учесть, что поверхности (22.9) и (22.10) пересекаются друг с другом по окружности, которая отличается от линии контакта изочастотных поверхностей тем меньше, чем лучше выполняется неравенство $\omega \ll \omega_1$. Характерное значение ω_1 есть T/\hbar ; в наинизшем приближении по малому параметру $\hbar\omega/T$ мы можем считать, что эти линии совпадают. Тогда поверхность сохранения, по которой производится интегрирование в (22.8), есть поверхность кругового конуса с вершиной в начале координат.

В интеграле (22.8) существенны k порядка k_T . Величина $|\partial\Omega_{ka'}/\partial k - \partial\Omega_{ka}/\partial k|$ в знаменателе (22.8) имеет порядок v . С учетом оценки (20.25) мы получаем

$$\epsilon''_{\perp} \simeq \frac{\omega T^3}{\rho v^5 \hbar^2}, \quad (22.16a)$$

$$\epsilon''_{\perp} \simeq \frac{\omega T^5}{\rho v^5 \hbar^2 \Theta^2}. \quad (22.16b)$$

Обратим внимание на сходную структуру выражений (22.5), (22.14) и (22.16). Суммарная степень частоты ω , температуры T и дебаевской температуры Θ во всех выражениях равна 4.

По смыслу вывода оценки (22.16) справедливы при условии $\omega\tau_N \gg 1$. Оно выражает требование, чтобы разность энергий начального и конечного состояний, между которыми происходит переход, была бы велика по сравнению с квантовой неопределенностью энергии фонона. Однако оценки (22.16) должны остаться в силе и при $\omega\tau_N \lesssim 1$.

Действительно, с одной стороны, как показано в § 19, при малых частотах ϵ'' пропорционально ω . С другой стороны, на границе области применимости теории, т. е. при $\omega\tau_N \simeq 1$, оценки (22.16) должны сохранять справедливость. Следовательно, соотношения (22.16) должны сохранять силу при всех значениях ω , удовлетворяющих неравенству (22.1). Разумеется, при переходе от случая $\omega\tau_N \gg 1$ к случаю $\omega\tau_N \ll 1$ коэффициент в линейной зависимости $\epsilon''(\omega)$, не меняясь по порядку величины, может изменить свое численное значение.

Такие соображения позволяют получить и грубые оценки низкочастотного ($\omega\tau_N \ll 1$) вклада в диэлектрическую релаксацию от точек касания и стыка. Нужно учесть, что 1) при $\omega\tau_N \ll 1$ ϵ'' пропорционально ω ; 2) при $\omega\tau_N \simeq 1$ формула, справедливая в пределе высоких частот, должна давать правильный по порядку величины результат. Эти соображения дают следующие оценки для ϵ'' в случае стыка и ϵ''_{\perp} в случае касания:

$$\epsilon'' \simeq \frac{\omega T^2}{\rho v^5 \hbar \tau_N}, \quad (22.17a)$$

$$\epsilon'' \simeq \frac{\omega T^4}{\rho v^5 \hbar \Theta^2 \tau_N}. \quad (22.17b)$$

Всюду в данном разделе мы использовали для описания фононного спектра приближение теории упругости. Возникает вопрос, всегда ли оно достаточно. На первый взгляд на него следует ответить утвердительно, поскольку при $T \ll \Theta$ возбуждены только длинноволновые акустические ветви.

Нужно, однако, помнить, что для нахождения точек контакта мы пользовались соображениями симметрии. Но, как уже отмечалось, в некоторых кристаллах выражение для плотности упругой энергии обладает большей симметрией, чем сам кристалл. Это значит, что в ряде кристаллов низкой симметрии стык или касание могут исчезнуть при учете следующих приближений по $k\bar{a}$ по сравнению с теорией упругости. Чтобы исследовать этот вопрос, нужно рассмотреть представления группы волнового вектора, направленного вдоль соответствующей оси симметрии, и выяснить, есть ли среди них двумерные (или же такие одномерные, которые должны соответствовать одной частоте в силу симметрии относительно обращения времени). Исследование, произведенное Херрингом (1954), показывает, что отсутствие вырождения колебательных ветвей вдоль осей симметрии имеет место в кристаллических классах, перечисленных в следующей табл. 3.

Таблица 3

Система	Классы, где отсутствует вырождение вдоль осей симметрии
Кубическая	O, T_h^*, T
Гексагональная	D_6, C_6, C_{3h}
Ромбоэдрическая	D_3, C_3
Тетрагональная	D_4, C_4

*) В классе T_h имеет место стык вдоль осей третьего порядка, а касание отсутствует.

В отношении кристаллов, принадлежащих к перечисленным классам, теория нуждается в уточнении. Рассмотрим сначала кристаллы, где имеется ось третьего порядка. По теории упругости вдоль этой оси имеет место стык колебательных ветвей. Фактически, однако, стыка нет, а имеется расщепление ветвей, относительную величину которого мы обозначим ka_1 (где a_1 порядка \bar{a}). Соответственно, разность $\Omega_{ka'} - \Omega_{ka}$ запишется теперь в виде следующей интерполяционной формулы:

$$\omega = \Omega_{ka'} - \Omega_{ka} = v_1(k\vartheta + k^2a_1), \quad (22.18)$$

откуда решение уравнения (22.18), ϑ_1 , есть

$$\vartheta_1 = \omega/v_1k - ka_1.$$

Положительное решение существует при условии

$$\omega > k^2a_1v_1. \quad (22.19)$$

Вместо интеграла (22.13) теперь при вычислении выражения (22.7) возникает интеграл

$$\int_0^\pi d\vartheta \sin \vartheta \delta[\omega - v_1(k\vartheta + k^2a_1)],$$

который при $\omega > k^2a_1v_1$ равен $\sin \vartheta_1/kv_1$ и равен нулю при обратном неравенстве. Условие, чтобы для k порядка k_T неравенство (22.19) выполнялось с достаточно большим запасом, имеет вид

$$\hbar\omega \gg T^2/\Theta. \quad (22.20)$$

При этом с достаточной точностью $\vartheta_1 \approx \omega/v_1k_T \ll 1$ и для ϵ'' получается старый результат (22.14а). Если же

$$\hbar\omega \ll T^2/\Theta, \quad (22.21)$$

то ϑ_1 обращается в нуль при

$$k = \sqrt{\omega/a_1v_1} \ll k_T. \quad (22.22)$$

Это значение k и определяет верхний предел в интеграле по k в (22.7). Учитывая это, мы получаем следующую оценку¹⁾ для случая (22.22):

$$\epsilon'' \approx \frac{\omega^{5/2}\Theta^{1/2}T}{\rho v^5 \hbar^{1/2}}. \quad (22.23)$$

Обратим внимание, что суммарная степень ω , T и Θ в этом выражении тоже равна четырем.

Рассмотрим теперь кристаллы классов, перечисленных в табл. 3, где имеются оси четвертого или шестого порядка. По теории упругости в таких кристаллах имеется касание колебательных ветвей. Однако будем считать, что в следующем приближении по $k\bar{a}$ имеет место рас-

¹⁾ Все перечисленные в табл. 3 классы, кроме T_h , не имеют центра симметрии, что учтено при выводе (22.23). В классе же T_h диэлектрическая релаксация определяется стыком вдоль осей третьего порядка.

цепление, относительная величина которого будет обозначаться ka_2 . Разность частот «почти вырожденных» колебаний запишем в виде

$$\omega = \Omega_{ka'} - \Omega_{ka} = v_2(k\vartheta^2 + k^2a_2). \quad (22.24)$$

Решение этого уравнения есть

$$\vartheta_2 = \sqrt{\omega/kv_2 - ka_2}.$$

Оно существует, если $\omega > k^2v_2a_2$.

Условие того, чтобы при k порядка k_T это неравенство выполнялось с большим запасом, опять-таки имеет вид (22.20). При этом для ϵ''_{\perp} справедливо прежнее выражение (22.14). Если же имеет место обратное неравенство (22.21), то в интеграле (22.7) верхний предел при интегрировании по k оказывается порядка величины (22.22). Принимая это во внимание, получаем для ϵ''_{\perp} оценку (22.23).

Обсудим, во что перейдет выражение (22.16), описывающее вклад в диэлектрическую релаксацию за счет случайного пересечения изочастотных поверхностей в гексагональных кристаллах, при учете высшего (по сравнению с теорией упругости) приближения по параметру ka . В высших приближениях фононный спектр понижает свою симметрию с цилиндрической до гексагональной. При этом, в соответствии с результатами Херринга, исчезает контакт изочастотных поверхностей вдоль окружностей и происходит снятие вырождения всюду, кроме, может быть, отдельных точек изочастотной поверхности, т. е. отдельных линий в k -пространстве. Принимая это во внимание, приходим к выводу, что оценка (22.16) вклада от случайного пересечения фононных ветвей в гексагональных кристаллах справедлива, лишь если частота ω ограничена снизу неравенством типа (22.20). В обратном случае достаточно низких частот мы возвращаемся к формуле (22.14) для оценки коэффициента поглощения.

Осталось еще указать, какими будут выражения для ϵ'' для кристаллов низкой симметрии (двухосных). В отсутствие случайного стыка изочастотных поверхностей справедлива оценка (22.5), а в присутствии такового — оценка (22.14).

Мы разобрали основные случаи, которые могут встретиться в теории диэлектрической релаксации при $T \ll \Theta$. При конкретных расчетах мы считали решетку двухатомной, т. е. предполагали, что в элементарной ячейке имеются два различных атома. Это позволило характеризовать собственную реакцию решетки на внешнее электрическое поле одним вектором w , пропорциональным относительному смещению подрешеток. Если бы решетка была многоатомной, то ее собственная реакция на внешнее поле описывалась бы $s-1$ векторами w_m , характеризующими относительное смещение различных подрешеток друг относительно друга. Соответственно увеличилось бы и число предельных фононных частот Ω_i и Ω_i , фигурирующих в теории. Однако все это не должно привести к изменению полученных результатов, коль скоро частота ω остается гораздо меньше всех предельных частот.

Действительно, в выражении (20.10) будет в этом случае фигурировать вместо одного вектора w линейная комбинация из всех векторов w_m . Каждый из них будет пропорционален поляризуемости решетки P , так что взаимодействие электрического поля с фононами будет по-прежнему описываться выражением типа (20.14). Единственное отличие будет заключаться в определении величины $\lambda_{jj'}^{(1)}(k)$, которая теперь будет выражаться через сумму вида

$$\sum_m \beta_m^{-1} \partial A_{\gamma\gamma'}^{nn'} / \partial w_m$$

по всем векторам w_m . Порядковая оценка (20.20) для этой величины сохраняет силу.

Таким образом, результаты данного раздела остаются в силе и применительно к многоатомным решеткам.

§ 23. Диэлектрическая релаксация, обусловленная двухфононными процессами. Высокие температуры

В случае высоких температур

$$T \gg \Theta \quad (23.1)$$

мы можем пользоваться оценочным результатом (22.5) для $\eta^{(p)}$, так как этот результат вообще не зависит от соотношения между Θ и T , лишь бы $\hbar\omega$ было меньше

обеих этих величин. Выражения же для $\eta^{(n)}$ в этом случае должны измениться: во-первых, в (21.14) теперь приходится интегрировать по всем значениям k вплоть до предельных, а во-вторых, суммировать нужно как по акустическим, так и по оптическим колебательным ветвям, которые при этих температурах возбуждены.

Используя для функций N_{kj} приближенное выражение

$$N_{kj} = T/\hbar\Omega_{kj},$$

справедливое в этом температурном интервале, мы можем записать выражение для η_i в виде

$$\eta_i^{(n)} = \frac{1}{4} (\varepsilon_i^{(0)} - \varepsilon_i^{(\infty)}) \omega T \sum_{jj'} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} |\Lambda_{jj'}^{(i)}(k)|^2 \times \\ \times \delta(\omega + \Omega_{kj} - \Omega_{kj'}). \quad (23.2)$$

Отсюда видно, что если аргумент δ -функции в (23.2) может при каких-то значениях k обращаться в нуль, т. е. если двухфононные процессы разрешены законами сохранения, то соответствующий вклад в ε'' растет линейно с температурой (В. С. Виноградов, 1962). Этот вывод допускает наглядное истолкование. Величина (23.2) определяется процессами присоединения, а число фононов, которые могут в них участвовать, при высоких температурах пропорционально T .

Дальнейшие рассуждения вполне аналогичны развитым в § 22 для случая $T \ll \Theta$. Если частота ω удовлетворяет неравенству

$$\hbar\omega \ll \Theta, \quad (23.3)$$

вид функции $\eta^{(n)}(\omega)$ существенным образом зависит от характера контакта фононных изочастотных поверхностей. Рассмотрим основные варианты, которые тут могут встретиться, обращая главное внимание на отличие от случая низких температур.

Стык изочастотных поверхностей, как мы уже знаем, может возникнуть либо в силу симметрии кристалла (вдоль осей третьего порядка), либо при случайном контакте изочастотных поверхностей. Поскольку нас сейчас интересует вклад в $\eta^{(n)}$ от коротковолновой части фононного спектра (которой соответствует большая

часть фазового объема в интеграле (23.2)), мы должны в первом случае рассматривать только стык, обусловленный истинной симметрией кристалла (а не симметрией спектра длинноволновых акустических колебаний, как в § 22). Вычисление вклада от точки стыка производится так же, как и в § 22, с той лишь разницей, что интегрировать по k нужно вплоть до предельных значений порядка $1/a$. Это дает оценку

$$\varepsilon'' \simeq \frac{\omega^2 T \Theta}{\rho v^5 \hbar}. \quad (23.4)$$

Частотная зависимость ε'' остается, таким образом, такой же, как и при $T \ll \Theta$. Однако температурная зависимость теперь иная и, главное, сами потери при высоких температурах получаются гораздо больше, чем при низких. По своей структуре это выражение похоже на формулы § 22. В частности, суммарная степень ω , T и Θ равна четырем.

Переходим к анализу вклада от точек касания. Считаем, что наличие таких точек определяется пространственной группой симметрии кристалла; тогда касание имеет место при всех фононных частотах вплоть до предельной, и интегрировать по k приходится вплоть до предельных волновых векторов. С учетом зависимости матричных элементов электрофононного потенциала от малого угла ϕ , обсуждавшейся в § 22, мы получаем для ε'' ту же самую оценку (23.4), что и для вклада от точек стыка.

В высокотемпературном случае наряду со вкладом в ε'' от линий случайного контакта колебательных ветвей нужно учитывать также и вклад от возможных точек случайного контакта, которые могут присутствовать в коротковолновой части спектра. Херринг установил, что по мере удаления от точки контакта расщепление фононных частот может расти либо линейно по всем направлениям (в кристаллах без центра симметрии), либо квадратично вдоль какого-то избранного направления и линейно по всем остальным (в кристаллах с центром симметрии). Не исследуя подробно вклада от точек случайного контакта колебательных ветвей, укажем только, что он пропорционален ω^3 в первом случае и $\omega^{5/2}$ во втором.

Из сказанного можно сделать выводы относительно частотной зависимости ϵ'' в кристаллах сравнительно низкой симметрии, которая не обуславливает наличие стыка или касания изочастотных поверхностей. При наличии случайного стыка изочастотных поверхностей эта зависимость имеет вид (23.4). Если же случайный стык отсутствует, то $\epsilon'' \propto \omega^3$ в кристаллах без центра симметрии; в кристаллах же с центром симметрии эта зависимость либо имеет такой же вид, либо $\epsilon'' \propto \omega^{5/2}$.

Эти выводы, однако, вообще говоря, не относятся к таким кристаллам, где касание или стык изочастотных поверхностей хотя и отсутствует для коротковолновых фононов, но имеет место в приближении теории упругости. В этом случае, как мы видели в § 22, интеграл по k обрезается на предельном значении порядка $\sqrt{\omega/\bar{a}v}$; как для «квазикасания», так и для «квазистыка» изочастотных поверхностей это приводит к результату (22.23).

Результаты, полученные в данном разделе, относятся только к кристаллическим решеткам, принадлежащим к так называемым симморфным пространственным группам. Это такие пространственные группы, которые не содержат винтовых осей или же плоскостей скольжения. (Для того чтобы кристаллическая решетка содержала эти элементы симметрии, она должна иметь по меньшей мере два одинаковых атома в элементарной ячейке).

В симморфных пространственных группах линии, по которым имеет место касание или стык изочастотных поверхностей в k -пространстве, определяются точечной группой симметрии кристалла. Это означает, в частности, что на поверхности зоны Бриллюэна не возникает никакого дополнительного вырождения колебательных ветвей. Это предположение существенно использовалось нами при расчетах.

В решетках, принадлежащих к несимморфным пространственным группам, это дополнительное вырождение на поверхности зоны Бриллюэна может иметь место и давать определенный вклад в диэлектрическую релаксацию, отличный от того, что был изучен в настоящем разделе. Вопрос о том, какие тут могут встретиться возможности, в настоящее время не исследован.

§ 24. Низкочастотная диэлектрическая релаксация в кристаллах без центра симметрии

Результаты, полученные в §§ 22, 23, описывают диэлектрическую релаксацию в кристаллах без центра симметрии только в области достаточно высоких частот. При более низких частотах обычно преобладает другой механизм диэлектрической релаксации, который мы рассмотрим в настоящем разделе. Чтобы описать этот механизм, посмотрим на сам процесс диэлектрической релаксации с несколько иной, чем выше, точки зрения.

Действие переменного электрического поля E на диэлектрик приводит, как мы видели, к возникновению добавки к фононной частоте, зависящей от времени и, следовательно, изменяющейся с конечной скоростью. В результате функция распределения фононов оказывается отличной от равновесной функции Планка, причем это отличие тем больше, чем выше скорость изменения поля. В диэлектрике все время протекают процессы, стремящиеся восстановить равновесную функцию распределения и благодаря им энергия поля диссипирует в тепло. Мы здесь хотим вычислить скорость диссипации энергии. Но сначала получим некоторые интегральные соотношения, которым должен удовлетворять вектор $\Lambda'(k, j)$.

Начнем с рассмотрения пироэлектрических диэлектриков, в которых вектор D_0 в линейном соотношении (19.1) отличен от нуля. В пироэлектриках в переменном электрическом поле должна изменяться температура. Определим это изменение. Вводя величину

$$\tilde{F} = F - ED/4\pi,$$

где $F(T, D)$ — плотность свободной энергии диэлектрика, мы можем написать

$$d\tilde{F} = -S dT - \frac{1}{4\pi} D dE. \quad (24.1)$$

Отсюда

$$D_0 = -4\pi \left(\frac{\partial \tilde{F}}{\partial E} \right)_T, \quad (24.2)$$

где, вычислив производную, следует положить $E = 0$. В линейном приближении по электрическому полю,

таким образом,

$$\tilde{F}(T, E) = \tilde{F}(T, 0) - \frac{1}{4\pi} E D_0(T). \quad (24.3)$$

С другой стороны, плотность свободной энергии системы фононов следующим образом выражается через их функцию распределения:

$$F(T, D) = F(0, D) - T \int d\xi_k \ln(\tilde{N}_0 + 1). \quad (24.4)$$

Здесь \tilde{N}_0 есть функция Планка от полной частоты фонона $\tilde{\Omega} = \Omega + \Delta\Omega$, которую мы будем считать функцией электрического поля E :

$$\Delta\Omega = \Omega \Lambda' E. \quad (24.5)$$

Температурная зависимость спонтанной индукции $D_0(T)$ находится с помощью соотношения $E = 4\pi \times (\partial F / \partial D)_T$. Дифференцируя (24.4) по D с учетом (19.1) и приравнявая производную нулю, мы получаем, пренебрегая слабой зависимостью диэлектрической проницаемости ϵ_n от температуры T :

$$D_0(T) = D_0(0) - 4\pi \int d\xi_k \hbar \Omega N_0 \Lambda'. \quad (24.6)$$

Дифференцируя (24.3) по температуре, получаем плотность энтропии S :

$$S(T, E) = S(T, 0) + \frac{1}{4\pi} E \frac{\partial D_0}{\partial T}.$$

Чтобы найти изменение температуры при адиабатическом изменении электрического поля, разложим плотность энтропии $S(T, 0)$ вблизи температуры T , которую имел диэлектрик до включения внешнего поля E :

$$S(T + \Delta T) = S(T) + \frac{C}{T} \Delta T, \quad (24.7)$$

где C есть удельная теплоемкость (при постоянном объеме и поле), а ΔT — приращение температуры. Считая это приращение малым, получаем из требования постоянства энтропии при включении поля

$$\Delta T = - \frac{T}{C} \frac{E}{4\pi} \frac{\partial D_0}{\partial T}.$$

Вычисляя производную $\partial D_0 / \partial T$ из (24.6), мы находим

окончательно

$$\Delta T = \frac{\hbar^2}{CT} \int d\xi_k \Omega^2 N_0 (N_0 + 1) \Lambda' E. \quad (24.8)$$

В непироэлектриках $\Delta T = 0$, и величина $\Lambda'(k, j)$ в них должна тождественно удовлетворять соотношению

$$\int d\xi_k N_0 (N_0 + 1) \Lambda'(k, j) \Omega^2 = 0. \quad (24.9)$$

Начнем с рассмотрения медленно меняющегося электрического поля, частота которого ω удовлетворяет неравенству

$$\omega \tau \ll 1, \quad (24.10)$$

где τ есть характерное время установления равновесия по отношению к возмущению вида (24.5). При $T \gg \Theta$ это есть, очевидно, время свободного пробега фононов (10.8). При $T \ll \Theta$, как мы увидим, оно равно времени нормальных процессов, τ_N .

Реакция фононной системы на нестационарное возмущение (24.5) описывается кинетическим уравнением, решение которого ищем в виде $N = \tilde{N}_0 + \Delta N$, где ΔN есть малая неравновесная добавка к функции распределения \tilde{N}_0 . Подставляя N в левую часть кинетического уравнения (6.1) и линеаризуя правую часть по ΔN , получаем следующее уравнение:

$$\frac{\partial \tilde{N}_0}{\partial t} + \frac{\partial \Delta N}{\partial t} = - \hat{I} \Delta N. \quad (24.11)$$

Если частота ω удовлетворяет неравенству (24.10), то членом $\partial \Delta N / \partial t$ можно пренебречь по сравнению с $\hat{I} \Delta N$, равным по порядку величины $\Delta N / \tau$. Тогда кинетическое уравнение переписывается в виде

$$N_0 (N_0 + 1) \frac{\hbar \Omega}{T} \left(\Lambda' \frac{\partial E}{\partial t} - \frac{1}{T} \frac{\partial T}{\partial t} \right) = \hat{I} \Delta N. \quad (24.12)$$

Здесь мы учли, что в силу соотношения (24.8) под действием электрического поля может, вообще говоря, измениться температура диэлектрика. Пользуясь выражением (5.11) для удельной теплоемкости, можно представить величину \dot{T} в виде

$$\Delta \dot{T} / T = \langle \Lambda' \rangle \dot{E}, \quad (24.13)$$

где символ « $\langle \rangle$ », примененный к некоторой функции $\varphi(\mathbf{k}, j)$, обозначает следующую операцию усреднения:

$$\langle \varphi \rangle = \frac{\int d\xi_{\mathbf{k}} (\hbar\Omega)^2 \varphi N_0 (N_0 + 1)}{\int d\xi_{\mathbf{k}} (\hbar\Omega)^2 N_0 (N_0 + 1)}. \quad (24.14)$$

Уравнение (24.12) применимо и к непирозлектрикам, только в этом случае нужно полагать $\partial T / \partial t = 0$.

С учетом (24.13) кинетическое уравнение (24.12) переписывается следующим образом:

$$N_0 (N_0 + 1) \frac{\hbar\Omega}{T} \dot{E} (\Lambda' - \langle \Lambda' \rangle) = \hat{J} y, \quad (24.15)$$

где мы перешли от функции ΔN к функции y , согласно $\Delta N = y N_0 (N_0 + 1)$.

Такая запись левой части (24.15) позволяет убедиться, что она ортогональна функции $\Omega^j(\mathbf{k})$ — собственной функции оператора \hat{J} , соответствующей нулевому собственному значению. Решение уравнения можно символически записать в следующем виде:

$$y(\mathbf{k}) = \frac{\hbar}{T} \hat{J}^{-1} \Omega N_0 (N_0 + 1) (\Lambda' - \langle \Lambda' \rangle) \dot{E}. \quad (24.16)$$

С помощью этого выражения можно определить скорость диссипации плотности энергии электрического поля [см. (11.22)]

$$T \dot{S} = T \int d\xi_{\mathbf{k}} \frac{\Delta N}{N_0 (N_0 + 1)} \hat{J} \Delta N = T \int d\xi_{\mathbf{k}} y \hat{J} y.$$

Подставляя сюда выражение для y (24.16) и выполняя усреднение по периоду, получаем

$$T \dot{S} = \frac{T}{2} \left(\frac{\hbar\omega}{T} \right)^2 \int d\xi_{\mathbf{k}} \Omega (\Lambda'_i - \langle \Lambda'_i \rangle) N_0 (N_0 + 1) \times \\ \times \hat{J}^{-1} \Omega (\Lambda'_i - \langle \Lambda'_i \rangle) N_0 (N_0 + 1) E_i^* E_i. \quad (24.17)$$

Сравнивая это выражение с формулой (19.7), находим тензор диэлектрической релаксации

$$\xi_{ii} = 4\pi \frac{\hbar^2}{T} \int d\xi_{\mathbf{k}} \Omega (\Lambda'_i - \langle \Lambda'_i \rangle) \times \\ \times N_0 (N_0 + 1) \hat{J}^{-1} \Omega (\Lambda'_i - \langle \Lambda'_i \rangle) N_0 (N_0 + 1). \quad (24.18)$$

Симметричность этого тензора есть непосредственное следствие того, что симметричен оператор \hat{J} , а следовательно и \hat{J}^{-1} .

Получим оценки тензора ξ . Будем считать, что разность $\varepsilon^{(0)} - \varepsilon^{(\infty)} \ll 1$, и воспользуемся для вектора Λ' оценкой (20.25а). При высоких температурах ($T \gg \Theta$) оператор $\hat{J}^{-1} N_0 (N_0 + 1)$ можно заменить по порядку величины временем свободного пробега τ (10.8), откуда получается оценка

$$\xi \simeq \tau \frac{T}{Mv^2}. \quad (24.19)$$

Поскольку при высоких температурах время свободного пробега τ обратно пропорционально T , величина ξ при $T \gg \Theta$ от температуры не зависит.

Чтобы получить оценки при низких температурах ($T \ll \Theta$), заметим, что, поскольку вектор Λ' есть четная функция волнового вектора \mathbf{k} , оператор $\hat{J}^{-1} N_0 (N_0 + 1)$ равен по порядку величины характерному времени нормальных процессов τ_N (а не времени процессов перебро-са τ_V). Отсюда

$$\xi \simeq \left(\frac{T}{\Theta} \right)^3 \frac{T}{Mv^2} \tau_N \simeq \frac{T^4}{\rho \hbar^3 v^5} \tau_N. \quad (24.20)$$

Поскольку $\tau_N \sim T^{-5}$, эта оценка дает $\xi \sim 1/T$.

В высокочастотном случае

$$\omega\tau \gg 1 \quad (24.21)$$

удобно строить метод последовательных приближений иначе, чем выше, и взять в качестве функции нулевого приближения равновесную функцию $N_0(\Omega)$, в аргументе которой фигурирует постоянная температура. Это естественно с физической точки зрения: равновесное состояние, а следовательно, и определенная температура устанавливаются в системе фононов за время τ , период же изменения внешнего поля гораздо меньше τ , и говорить об изменении температуры за такой короткий промежуток времени не имеет смысла.

При $\omega\tau \gg 1$ кинетическое уравнение можно решать методом последовательных приближений, разлагая реше-

ние по малому параметру $1/\omega\tau$. В наимизшем приближении можно вообще отбросить оператор столкновений. Это дает

$$\Delta N = N_0(N_0 + 1) \frac{\hbar\Omega}{T} \Lambda' E. \quad (24.22)$$

Отсюда скорость диссипации плотности энергии внешнего поля

$$T\dot{S} = \frac{\hbar^2}{2T} \int d\xi_k \Omega \Lambda'_i \hat{J} \Omega \Lambda'_i E_i^* E_i. \quad (24.23)$$

Сравнивая это выражение с (19.8), находим

$$\varepsilon''_{ii} = \frac{4\pi\hbar^2}{\omega T} \int d\xi_k \Omega \Lambda'_i \hat{J} \Omega \Lambda'_i. \quad (24.24)$$

В качестве оператора \hat{J} сюда следует подставить выражение (9.6). Таким образом, чтобы вычислить диэлектрические потери при $\omega\tau \gg 1$, нет необходимости решать интегральное уравнение. Выражение для потерь получается в квадратурах. Тензор ε''_{ii} обратно пропорционален частоте ω . Его симметричность видна непосредственно.

При высоких температурах $T \gg \Theta$ по порядку величины имеем

$$\varepsilon'' \simeq \frac{T}{Mv^2} \frac{1}{\omega\tau}, \quad (24.25)$$

в то время как при $\omega\tau \ll 1$ $\varepsilon'' = \omega\zeta \simeq \omega\tau T / \overline{Mv^2}$. Таким образом, величина ε'' при низких частотах растет с частотой, при $\omega \simeq 1/\tau$ достигает максимального значения, равного по порядку величины

$$\varepsilon''_{\max} \simeq T / \overline{Mv^2}, \quad (24.26)$$

а затем убывает обратно пропорционально ω .

Аналогичным образом ведет себя величина ε'' и при низких температурах: $T \ll \Theta$. При высоких частотах справедлива оценка

$$\varepsilon'' \simeq \left(\frac{T}{\Theta}\right)^3 \frac{T}{Mv^2} \frac{1}{\omega\tau} \simeq \frac{T^4}{\rho\hbar^3 v^5} \frac{1}{\omega\tau}, \quad (24.27)$$

а максимальное значение, которого достигает ε'' при низ-

ких температурах, оказывается порядка

$$\varepsilon''_{\max} \simeq \left(\frac{T}{\Theta}\right)^3 \frac{T}{Mv^2} \simeq \frac{T^4}{\rho\hbar^3 v^5}. \quad (24.28)$$

Собирая воедино полученные результаты, мы можем описать их следующими интерполяционными формулами. При высоких температурах ($T \gg \Theta$)

$$\varepsilon'' \simeq \frac{T}{Mv^2} \frac{\omega\tau}{1 + (\omega\tau)^2}, \quad (24.29)$$

а при низких ($T \ll \Theta$)

$$\varepsilon'' \simeq \left(\frac{T}{\Theta}\right)^3 \frac{T}{Mv^2} \frac{\omega\tau_N}{1 + (\omega\tau_N)^2}. \quad (24.30)$$

Эти интерполяционные формулы можно было бы получить и иначе — непосредственно путем порядкового анализа решений кинетического уравнения (24.11). Наметим соответствующий вывод; он окажется полезным, в частности, при исследовании вклада рассеяния фононов на дефектах в диэлектрическую релаксацию.

Мы можем написать по порядку величины:

$$\Delta N \simeq \frac{-i\omega}{-i\omega + 1/\tau} N_0(N_0 + 1) \frac{\hbar\Omega}{T} \Lambda' E.$$

Здесь величину $1/\tau(k, j)$ следует считать порядка полной вероятности рассеяния фонона (k, j) за счет всех возможных механизмов.

Подставляя выражение для ΔN в формулу (11.22) для $T\dot{S}$ и сравнивая получившееся выражение с (19.8), мы приходим к оценке

$$\varepsilon'' \simeq 4\pi T \int d\xi_k \frac{\omega\tau^{-1}}{\omega^2 + 1/\tau^2} N_0(N_0 + 1) \left(\frac{\hbar\Omega}{T}\right)^2 \Lambda'^2. \quad (24.31)$$

Во всех рассмотренных случаях эта формула дает правильные по порядку величины выражения.

Нужно сделать одну существенную оговорку по поводу общего выражения (24.18), так же как и полученных с его помощью оценочных формул (24.19) и (24.20). Все они справедливы, если фононное время свободного пробега при убывании k растет медленнее, чем k^{-3} . В противном случае трехфононные процессы, которые мы учиты-

вали при вычислении времени τ , не обеспечивают конечного значения коэффициента ζ , и приходится учитывать другие факторы, приводящие к конечному выражению. Этот вопрос будет проанализирован в § 38. При высоких частотах ($\omega\tau \gg 1$), как видно из формулы (24.24), длинноволновые фононы вклада в ε'' не дают.

Обсудим в заключение одно существенное обстоятельство. Электрофононный потенциал, как мы видели, пропорционален константе ангармонического взаимодействия фононов. В итоге выражение (24.24) оказывается пропорциональным четвертой степени константы фонон-фононного взаимодействия — квадрат константы входит в виде Λ'^2 и другой квадрат фигурирует в определении (9.6) оператора столкновений \hat{J} .

Естественно ожидать, что результат (24.24), справедливый при $\omega\tau \gg 1$, можно получить с помощью прямого квантовомеханического расчета, строя теорию возмущений по малому решеточному ангармонизму. Не останавливаясь на деталях, укажем основные этапы такого расчета и проследим, каким образом он позволяет получить результат (24.24).

В качестве исходного следует взять выражение (21.2), которое уже использовалось выше, только матричные элементы оператора $\Delta\hat{E}$ следует вычислять во втором приближении теории возмущений. Эти сложные матричные элементы описывают четырехквантовые процессы — с участием кванта поля и трех фононов. Вероятность таких трехфононных процессов, хотя и содержит более высокую степень решеточного ангармонизма по сравнению с двухфононными, тем не менее может при определенных условиях оказаться больше последней. Дело здесь в тех жестких ограничениях, которые, как мы видели в §§ 22, 23, налагают законы сохранения на вероятности двухфононных процессов и от которых вероятности трехфононных процессов свободны.

Рассмотрим четырехквантовые процессы типа $2 \rightarrow 2$ (фонон и квант поля сливаются и образуют два фонона). Законы сохранения при этих процессах имеют вид

$$\omega + \Omega(\mathbf{k}) - \Omega(\mathbf{k}') - \Omega(\mathbf{k} - \mathbf{k}') = 0. \quad (24.32)$$

Нас будут интересовать процессы такого типа для случая, когда частота ω достаточно мала — гораздо меньше ха-

рактерных частот фононов $\Omega(\mathbf{k})$, $\Omega(\mathbf{k}')$ и $\Omega(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$, которые мы будем считать порядка тепловых. Процесс (24.32) является разрешенным. Чтобы в этом убедиться, достаточно в первом приближении пренебречь частотой ω в соотношении (24.32). Тогда фононные частоты Ω , оставшиеся в этом соотношении, выражают просто законы сохранения при трехфононных столкновениях, дающих, например, вклад в обычный оператор фонон-фононных столкновений.

Пусть в начальном состоянии, кроме кванта поля, имеется фонон 1, а в конечном — фононы 2 и 3. Рассмотрим в качестве промежуточного такое состояние, когда квант поля поглотился, и имеется один только фонон 1. Разница энергий начального и промежуточного состояний, фигурирующая в знаменателе выражения для сложного матричного элемента, есть, таким образом, $\hbar\omega$, а квадрат матричного элемента, входящий в выражение для вероятности перехода, обратно пропорционален ω^2 .

Далее, в выражение для вероятности перехода должна войти разность фононных чисел заполнения вида

$$N_1(N_2 + 1)(N_3 + 1) - (N_1 + 1)N_2N_3. \quad (24.33)$$

Усредняя по равновесному состоянию кристалла, мы должны каждое из чисел заполнения в этом выражении заменить равновесной функцией Планка от аргумента $\hbar\Omega_i/T$ ($i = 1, 2, 3$). Наконец, в выражении для вероятности перехода фигурирует δ -функция, аргумент которой есть левая часть (24.32); приравнявая этот аргумент нулю, мы получаем закон сохранения энергии

$$\omega + \Omega_1 = \Omega_2 + \Omega_3.$$

С учетом этого соотношения выражение (24.33) оказывается пропорциональным $\exp(\hbar\omega/T) - 1$, что при $\hbar\omega \ll T$ переходит в $\hbar\omega/T$, т. е. дает первую степень ω в числителе. После того, как мы выделили этот множитель, можно в аргументе δ -функции пренебречь малой частотой ω , и мы получаем зависимость $\varepsilon'' \sim \omega^{-1}$, которая была найдена выше путем решения кинетического уравнения.

Приведенные рассуждения относятся только к кристаллам без центра симметрии. В кристаллах же с центром симметрии промежуточное состояние, в котором квант поля поглотился и остается один только фонон 1,

невозможно, так как отличны от нуля только матричные элементы оператора $\hat{\Lambda}$ для переходов с изменением номера фононной ветви. В итоге в соответствующем энергетическом знаменателе оказывается разность энергии фононов двух различных ветвей, характерное значение которой гораздо больше, чем $\hbar\omega$. Соответственно, скорость диэлектрической релаксации для кристаллов с центром симметрии получается гораздо меньше.

Для кристаллов без центра симметрии выражение для ϵ'' , полученное в настоящем разделе, следует сопоставить с выражениями, полученными в §§ 22, 23 для вклада от двухфононных процессов. Этот последний растет с частотой, тогда как выражения (24.25) или (24.27) с частотой убывают. Поэтому для каждого из случаев, рассмотренных в §§ 22, 23, легко указать такую (зависящую от температуры T), частоту, при которой оба вклада должны стать одного порядка; при меньших частотах диэлектрическая релаксация определяется формулами настоящего раздела.

Из всего сказанного следует один важный вывод: скорость диэлектрической релаксации в кристаллах без центра симметрии гораздо выше, чем в кристаллах с центром симметрии.

§ 25. Инфракрасное поглощение в полярных диэлектриках

Частоты инфракрасного диапазона могут по-разному соотноситься с величиной T/\hbar . Случай $\omega \ll T/\hbar$, Θ/\hbar был подробно исследован в §§ 22—24. Здесь же мы рассмотрим обратный предельный случай

$$\omega \gg T/\hbar. \quad (25.1)$$

Начнем с вычисления распадного вклада в η для кубических кристаллов. В силу законов сохранения энергии и квазиимпульса частоты фононов, рождающихся квантом поля, должны быть порядка ω . Будем считать частоту ω не слишком превышающей предельные фононные частоты, чтобы законы сохранения разрешали двухфононный распад кванта $\hbar\omega$.

В силу неравенства (25.1) функции распределения N_{kj} и $N_{kj'}$ экспоненциально малы, и ими можно прене-

бречь по сравнению с единицей. Это дает выражение, не зависящее от температуры:

$$\eta^{(p)} = \frac{1}{8} (\epsilon^{(0)} - \epsilon^{(\infty)}) \hbar \sum_{jj'} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} |\Lambda_{jj'}^{(p)}(\mathbf{k})|^2 \times \\ \times \Omega_j(\mathbf{k}) \Omega_{j'}(\mathbf{k}) \delta(\omega - \Omega_{kj} - \Omega_{kj'}), \quad (25.2)$$

так как оно определяется одними только спонтанными процессами.

Зависимость (25.2) от частоты ω при частотах порядка предельной определяется деталями фононного спектра и не может быть вычислена в общем виде. Однако частотную зависимость можно найти для достаточно малых по сравнению с предельной частот ω . При

$$\omega \ll \Omega, \quad (25.3)$$

в (25.2) дают вклад одни только акустические фононы. Подставляя в (25.2) закон дисперсии акустических фононов $\Omega_a(\mathbf{k}) = v_a k$, суммируя по акустическим ветвям a и a' и переходя к безразмерной переменной интегрирования $\bar{k}v/\omega$, мы получаем следующую оценку:

$$\epsilon'' \simeq \frac{\hbar\omega^4}{\rho v^5}, \quad (25.4a)$$

$$\epsilon'' \simeq \frac{\hbar^3\omega^6}{\rho v^5\Theta^2}. \quad (25.4b)$$

Таким образом, при $\hbar\omega \ll \Theta$ величина $\eta^{(p)}$ (25.2) растет как функция частоты ω . При дальнейшем росте ω эта величина достигает максимума, а затем сравнительно резко спадает, обращаясь в нуль, когда ω становится больше суммы двух любых фононных частот, соответствующих любому (но одному и тому же для обеих частот) значению \mathbf{k} . При таких частотах, когда двухфононный вклад в $\eta^{(p)}$ тождественно равен нулю, эта величина может быть отличной от нуля только за счет многофононных процессов, которые могут иметь место в высших приближениях по фононному ангармонизму или же при ангармонизме третьего порядка в высших приближениях теории возмущений.

Перейдем к анализу процессов присоединения. Для них должен выполняться закон сохранения

$$\omega + \Omega_{kj} = \Omega_{kj'}. \quad (25.5)$$

Ему можно удовлетворить, только если частота ω меньше хотя бы некоторых фононных частот. А поскольку, с другой стороны, рассматривается случай $\hbar\omega \gg T$, то нас здесь может интересовать только температурный интервал $T \ll \Theta$.

Рассмотрим выражение (21.10), описывающее вклад от процессов присоединения. Выясним, когда это выражение не содержит экспоненциальной малости (иначе бы им можно было заведомо пренебречь по сравнению с $\eta^{(p)}$ (21.9)). Для этого частота Ω_{kj} , фигурирующая в законе сохранения (25.5), должна быть гораздо меньше двух других частот. Это означает, что колебательная ветвь j — акустическая и дальше мы будем обозначать ее a .

Функция N_{ka} не будет экспоненциально малой, если

$$k \lesssim T/\hbar v_a, \quad (25.6)$$

где v_a — фазовая скорость фононов ветви a . Определим k из закона сохранения (25.5) и посмотрим, при каких ω можно удовлетворить условию (25.6). Поскольку волновые векторы k , удовлетворяющие условию (25.6), малы по сравнению с предельным значением, то ветвь j' должна быть оптической, и зависимость $\Omega_{j'}(k)$ можно представить в виде

$$\Omega_{kj'} = \Omega_{0j'} + \Omega_{j'}^{(1)}(k),$$

где $\Omega_{0j'}$ — соответствующая предельная фононная частота, а $\Omega_{j'}^{(1)}(k)$, в зависимости от симметрии кристалла, есть либо линейная, либо квадратичная функция k . Если это квадратичная функция, то она равна по порядку величины $\Omega_{j'}^{(1)}(k) \simeq \bar{v} \bar{a} k^2$. Поскольку закон дисперсии акустических фононов линеен, то в уравнении (25.5) относительно k можно пренебречь малой квадратичной добавкой, и мы получаем

$$k = (\Omega_{0j'} - \omega)/v_a.$$

Если же добавка $\Omega_{j'}^{(1)}$ линейна по k , то она равна по порядку величины $v k$. В уравнении (25.5) она, в зависи-

мости от своего знака, либо суммируется со слагаемым $v_a k$, либо вычитается из него. В итоге получается

$$k = |\Omega_{0j'} - \omega|/v_3,$$

где v_3 есть величина порядка \bar{v} .

Таким образом, условие (25.6) того, чтобы вклад от процессов присоединения не был экспоненциально мал, переписывается в виде $|\Omega_{0j'} - \omega| \lesssim T/\hbar$. Но если в интеграле (21.10) перейти от интегрирования по d^3k к интегрированию по поверхности сохранения $dS_{aj'}$, то площадь этой поверхности равна по порядку величины

$$k^2 \simeq (\Omega_{0j'} - \omega)^2/\bar{v}^2.$$

Это дает следующую оценку сверху вклада от оптической ветви j' в величину $\eta^{(n)}$:

$$\eta^{(n)} \lesssim \frac{(\Omega_{0j'} - \omega)^2}{\Omega_{0j'}^2} \frac{T}{Mv^2}. \quad (25.7)$$

Выражение это справедливо, пока частота ω достаточно близка к одной из предельных частот оптических фононов $\Omega_{0j'}$, так что $|\Omega_{0j'} - \omega| \lesssim T/\hbar$, иначе величина $\eta^{(n)}$ экспоненциально мала. Однако даже если это неравенство выполнено, величина (25.7) пренебрежимо мала по сравнению со вкладом от распадных процессов (25.4). Общий вывод, таким образом, состоит в том, что в данном частотном и температурном интервале вклад от процессов распада всегда больше вклада от процессов присоединения.

Переходим к вычислению коэффициента инфракрасного поглощения в полярном диэлектрике. Представим себе, что от границы кристалла распространяется инфракрасное электромагнитное излучение частоты ω . Оно должно поглощаться, т. е. плотность потока электромагнитной энергии $G^{(e)}$, равная среднему (по времени) значению вектора Пойнтинга, должна затухать в пространстве. Если x есть направление распространения электромагнитной волны, то закон затухания можно записать в виде

$$G_x^{(e)}(x) = G_x^{(e)}(0) \exp(-\Gamma_e x).$$

Величина Γ_e называется коэффициентом поглощения электромагнитного излучения.

Коэффициент поглощения в оптически изотропном (кубическом) кристалле следующим образом выражается

через его диэлектрическую проницаемость $\varepsilon(\omega)$ ¹⁾:

$$\Gamma_e = 2 \frac{\omega}{c} \operatorname{Im} \sqrt{\varepsilon(\omega)}, \quad (25.8)$$

где следует взять значение корня, при котором его мнимая часть получается положительной.

Чтобы исследовать инфракрасное поглощение в диэлектриках, нужно подставить сюда выражение (21.4) для $\varepsilon(\omega)$ ²⁾. Рассмотрим, что это дает в различных случаях.

Если $\omega^2 \ll \Omega_i^2$, то можно отбросить слагаемые ω^2 как в числителе, так и в знаменателе (21.4). Анализируя выражения, полученные в различных случаях в § 22 для величины η , мы видим, что она мала по меньшей мере как $T/\bar{M}v^2$, т. е. обычно не превышает одной сотой, а во многих случаях оказывается гораздо меньше этой верхней оценки. В наинизшем приближении по малому параметру η

$$\Gamma_e = \frac{\varepsilon^{(0)} - \varepsilon^{(\infty)}}{\sqrt{\varepsilon^{(0)}}} \eta \frac{\omega}{c}. \quad (25.9)$$

Величина эта фактически является весьма малой. Если, например, взять частоту $\omega = 3 \cdot 10^{12} \text{ с}^{-1}$ и воспользоваться для η оценкой (22.5), то Γ_e окажется порядка нескольких десятых см^{-1} .

Однако поглощение заметно усиливается при приближении к резонансной частоте Ω_i . К анализу этого усиления мы сейчас и перейдем. Будем считать частоту ω сравнимой с Ω_i . Однако при этом разность $\Omega_i^2 - \omega^2$ мы будем считать положительной (т. е. рассматривать область прозрачности кристалла) и большой по сравнению с $\eta\Omega_i^2$:

$$\eta\Omega_i^2/(\Omega_i^2 - \omega^2) \ll 1. \quad (25.10)$$

Выше мы отмечали, что определить детали зависимости $\eta(\omega)$ в этом частотном интервале в общем виде нель-

¹⁾ См. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Электродинамика сплошных сред. — М.: Гостехиздат, 1957, с. 335.

²⁾ Низкочастотный вклад в $\operatorname{Im} \varepsilon(\omega)$, рассчитанный в § 24 для диэлектриков без центра симметрии, обычно оказывается малым для частот инфракрасного диапазона, и мы его учитывать не будем.

зя. Легко, однако, дать порядковую оценку коэффициента η в этой области частот. При $T \ll \Theta$ она получается, если в (25.4) положить $\hbar\omega$ порядка Θ , и имеет вид

$$\eta \simeq \Theta/\bar{M}v^2. \quad (25.11)$$

При $T \gg \Theta$ преобладает вклад от индуцированных переходов, и

$$\eta \simeq T/\bar{M}v^2. \quad (25.12)$$

Разлагая $\varepsilon(\omega)$ по малому параметру $\eta/(\Omega_i^2 - \omega^2)$, имеем

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon^{(\infty)} \frac{\Omega_i^2 - \omega^2}{\Omega_i^2 - \omega^2} + i\eta\Omega_i^4 \frac{\varepsilon^{(0)} - \varepsilon^{(\infty)}}{(\Omega_i^2 - \omega^2)^2}.$$

Подставляя это выражение в (25.8) и ограничиваясь наинизшим приближением по малому параметру $\operatorname{Im} \varepsilon/\operatorname{Re} \varepsilon$, мы получаем окончательно

$$\Gamma_e = \frac{\omega}{c} \frac{\varepsilon^{(0)} - \varepsilon^{(\infty)}}{\sqrt{\varepsilon^{(\infty)}}} \frac{\eta\Omega_i^4}{(\Omega_i^2 - \omega^2)^{3/2} (\Omega_i^2 - \omega^2)^{1/2}}. \quad (25.13)$$

Таким образом, при приближении к частоте Ω_i со стороны меньших частот коэффициент инфракрасного поглощения растет как $(\Omega_i - \omega)^{-3/2}$.

Рассмотрим, наконец, выражение для диэлектрической проницаемости $\varepsilon(\omega)$ полярного диэлектрика в самой области резонанса, где

$$|\Omega_i - \omega|/\eta\Omega_i \lesssim 1.$$

В этой частотной области можно отбросить в числителе выражения (21.4) малое мнимое слагаемое $i\eta\Omega_i^2$. Как вещественное выражение, оставшееся в числителе, так и функция $\eta(\omega)$ в знаменателе представляют собой в резонансной области частот достаточно плавные функции ω , которые мы можем заменить их значениями при $\omega = \Omega_i$. Это дает следующее выражение для диэлектрической проницаемости:

$$\varepsilon(\omega) = \frac{\varepsilon^{(0)} - \varepsilon^{(\infty)}}{1 - \omega^2/\Omega_i^2 - i\eta_0} = (\varepsilon^{(0)} - \varepsilon^{(\infty)}) \frac{1 - \omega^2/\Omega_i^2 + i\eta_0}{(1 - \omega^2/\Omega_i^2)^2 + \eta_0^2}, \quad (25.14)$$

где $\eta_0 \equiv \eta(\Omega_i)$.

Как при высоких, так и при низких температурах величина η_0 определяется в основном распадными процессами и для нее имеет место оценка (25.11) или (25.12). Эти процессы в резонансном случае можно представлять себе наглядно как распад поперечного оптического фонона на два акустических.

§ 26. Влияние дефектов кристаллической решетки на диэлектрическую релаксацию

Если в кристаллической решетке имеется значительная концентрация дефектов, то они могут играть существенную роль в диэлектрической релаксации. В настоящем разделе мы хотим рассмотреть вклад дефектов в диэлектрическую релаксацию, связанный с тем, что они представляют собой дополнительный источник рассеяния фононов.

При самых низких частотах ($\omega\tau \ll 1$) в кристаллах без центра симметрии добавление дефектов должно уменьшать скорость релаксации. Действительно, как явствует из формул (24.19) и (24.20), скорость релаксации пропорциональна фоновому времени свободного пробега, которое убывает при повышении концентрации дефектов. Однако оценить влияние дефектов мы сможем только в следующей главе, где будет подробно изучен вклад длинноволновых фононов в кинетические коэффициенты.

При $\omega\tau \gg 1$ диссипативная часть диэлектрической проницаемости ϵ'' определяется выражением (24.24), где в качестве оператора столкновения \hat{J} нужно подставить сумму операторов, описывающих рассеяние на фононах и на дефектах. В этом случае вклады от разных механизмов рассеяния в ϵ'' аддитивны. Вклад от рассеяния на дефектах мы получим, подставив в качестве оператора столкновений выражение (9.9) или (9.10). Порядковую оценку оператора \hat{J} можно получить, полагая $\hat{J}/N_0(N_0 + 1) \approx \hat{I} \approx 1/\tau$, где τ — время свободного пробега тепловых фононов, обусловленное их рассеянием дефектами. При $T \gg \Theta$ основной вклад в ϵ'' дают фононы с частотами порядка предельной. Соответственно, из (24.24) получается оценка

$$\epsilon'' \approx \frac{T}{Mv^2} \frac{1}{\omega\tau} \approx \frac{T\Theta^3}{\rho v^5 \hbar^3} \frac{1}{\omega\tau}, \quad (26.1)$$

или, с учетом (10.3),

$$\epsilon'' \approx \frac{T}{Mv^2} \frac{\Theta}{\hbar\omega} \frac{n_d}{n}. \quad (26.2)$$

При $T \ll \Theta$ ϵ'' очень быстро убывает при уменьшении температуры T . Во-первых, уменьшается пропорционально $(T/\Theta)^3$ фазовый объем, эффективно дающий вклад в интеграл (24.24), во-вторых, убывает вероятность рассеяния $1/\tau$; для акустических фононов, которые только и существенны при $T \ll \Theta$, она пропорциональна Ω^4 . Поскольку основной вклад дают Ω порядка T/\hbar , это дает окончательно:

$$\epsilon'' \approx \frac{T^8}{Mv^2 \Theta^6 \hbar \omega} \frac{n_d}{n}. \quad (26.3)$$

Если преобладает изотопическое рассеяние фононов, отношение n_d/n в (26.2) и (26.3) следует заменить на $\Delta M^2/\bar{M}^2$.

Поскольку величина ϵ'' , независимо от механизма рассеяния фононов, должна при $\omega\tau \ll 1$ убывать с уменьшением частоты, она как функция частоты должна достигать максимального значения при $\omega \approx 1/\tau$. Порядок величины максимума не зависит от того, каким механизмом определяется время свободного пробега тепловых фононов τ . Однако частота, при которой достигается максимум, с ростом концентрации дефектов увеличивается.

При достаточно высоких частотах ω в кристаллах как без центра, так и с центром симметрии может играть заметную роль еще один механизм диэлектрической релаксации, связанный с дефектами решетки. Это — однофононные переходы (запрещенные в идеальной решетке законами сохранения), т. е. процессы рождения внешним полем акустических фононов в присутствии дефектов.

Мы не будем подробно обсуждать этот механизм, а ограничимся указанием, что соответствующий вклад быстро растет с ω , причем характер роста определяется характером корреляции в расположении заряженных дефектов и наличием или отсутствием у дефектов центра симметрии.

Поглощение звука

§ 27. Диссипация энергии упругих колебаний
и поглощение звука
в непьезоэлектрических диэлектриках

В данном разделе будет изложена феноменологическая теория поглощения звука в непьезоэлектрических диэлектриках¹⁾. Коэффициент поглощения мы выразим через кинетические коэффициенты, характеризующие процессы внутреннего трения и теплопроводности в диэлектрике — коэффициенты вязкости и теплопроводности.

Начнем мы, однако, с анализа условий распространения звука в пренебрежении диссипативными процессами и вывода закона сохранения механической энергии упругой сплошной среды.

Деформация сплошной среды при распространении в ней упругих колебаний является адиабатической²⁾. Соответственно, мы будем считать, что как в выражении для квадратичного по деформации вклада в плотность упругой внутренней энергии сплошной среды

$$U^{(s)} = \frac{1}{2} \lambda_{ilmn} u_{il} u_{mn}, \quad (27.1)$$

так и в уравнениях движения

$$\rho \ddot{u}_i = \lambda_{ilmn} \frac{\partial u_{mn}}{\partial r_l} \quad (27.2)$$

фигурируют адиабатические модули упругости λ_{ilmn} . На микроскопическом языке это означает следующее. Благодаря решеточному ангармонизму энергия фононов зависит от деформации упругой среды³⁾. При распростране-

¹⁾ Теория поглощения звука в пьезоэлектриках излагается в § 39.

²⁾ В справедливости этого утверждения мы удостоверимся в §§ 30, 32.

³⁾ Эта зависимость проанализирована в § 29.

нии звука деформация в каждой точке зависит от времени. Соответственно, зависит от времени и энергия фонона. Если частота звука ω гораздо меньше обратного времени свободного пробега фононов τ^{-1} , то распределение фононов в каждый момент почти успевает «подстроиться» к новому значению фононной энергии, т. е. с достаточной точностью является равновесным.

Это равновесие, однако, является локальным, так как вследствие адиабатичности деформации температура, его характеризующая, меняется от точки к точке вместе с деформацией. Вообще говоря, в сплошной среде происходят процессы теплопроводности, стремящиеся выровнять значение температуры в разных ее точках. Утверждение, что деформация адиабатическая, означает, что она производится хотя и медленно по сравнению со временем τ , но все же настолько быстро, что теплообмен между разными участками кристалла в первом приближении не успевает произойти.

Введем специальное обозначение $\mathcal{E}^{(s)}$ для энергии упругих колебаний, т. е. для механической энергии колеблющейся сплошной среды. Положим

$$\mathcal{E}^{(s)} = \int d^3r E^{(s)}(r). \quad (27.3)$$

$E^{(s)}$ есть полная энергия упругих колебаний в единичном объеме, равная сумме кинетической энергии $\rho \dot{u}^2/2$ и упругой части внутренней энергии, $U^{(s)}$:

$$E^{(s)} = \frac{1}{2} \rho \dot{u}^2 + U^{(s)}. \quad (27.4)$$

Вычислим производную по времени от плотности механической энергии

$$\dot{E}^{(s)} = \rho \dot{u} \ddot{u} + \dot{U}^{(s)}.$$

Производная $\partial U^{(s)}/\partial t$ в нашем приближении равна $\partial \dot{U}/\partial t$: функция U (2.4) отличается от $U^{(s)}$ слагаемым $U_0(S)$, которое остается постоянным в отсутствие диссипации и теплообмена между различными участками сплошной среды. Далее,

$$dU = T dS + \sigma_{ii}^{(0)} du_{ii}, \quad (27.5)$$

где $\sigma_{ii}^{(0)}$ есть термодинамически равновесное значение

тензора упругих напряжений. Вычисляя с помощью этого соотношения производную по времени при $S = \text{const}$, мы получаем

$$\frac{\partial E^{(s)}}{\partial t} = \rho \dot{u}_i \ddot{u}_i + \sigma_{il}^{(0)} \dot{u}_{il}. \quad (27.6)$$

Тензор деформации u_{il} должен здесь определяться симметричным относительно перестановки значков i, l выражением (2.3). Нам, однако, будет удобно подставить в (27.6) в качестве \dot{u}_{il} несимметричную величину $\partial u_i / \partial r_l$; поскольку тензор $\sigma_{il}^{(0)}$ симметричен, в (27.6) автоматически войдет только симметричная часть тензора $\partial u_i / \partial r_l$. Производя эту подстановку и группируя члены в правой части, мы получаем

$$\frac{\partial E^{(s)}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial r_l} (\sigma_{il}^{(0)} \dot{u}_i) + \dot{u}_i \left(\rho \ddot{u}_i - \frac{\partial \sigma_{il}^{(0)}}{\partial r_l} \right).$$

Здесь второе слагаемое тождественно равно нулю в силу уравнений движения теории упругости, которые в отсутствие диссипации имеют вид

$$\rho \ddot{u}_i = \partial \sigma_{il}^{(0)} / \partial r_l.$$

Окончательно мы получаем закон сохранения энергии упругих колебаний в дифференциальной форме

$$\frac{\partial E^{(s)}}{\partial t} + \text{div } \mathbf{G}^{(s)} = 0, \quad (27.7)$$

где $\mathbf{G}^{(s)}$ — вектор плотности потока энергии упругих колебаний с компонентами

$$G_l^{(s)} = -\sigma_{il}^{(0)} \dot{u}_i. \quad (27.8)$$

До сих пор мы пренебрегали диссипативными процессами. Однако деформация сплошной среды, зависящая от времени, должна обязательно сопровождаться процессами диссипации, благодаря которым энергия упругих колебаний необратимым образом переходит в тепло.

Об одном из возможных источников диссипации уже упоминалось. Это теплообмен между различными участками тела, которые приобретают разную температуру в

результате адиабатической деформации. Другой источник — это процессы вязкости, или внутреннего трения. Они обусловлены тем, что фононные частоты зависят от деформации, а значит и от времени, если деформация меняется со временем. А поскольку равновесие может установиться только за конечное время (порядка времени свободного пробега фононов), функция распределения фононов только приближенно может считаться равновесной. Фактически она отличается от равновесной, причем (при прочих равных условиях) тем сильнее, чем больше скорость изменения деформации. Соответственно в системе все время протекают процессы, стремящиеся восстановить равновесие. Они называются *процессами вязкости*, или *внутреннего трения*.

С неравновесной добавкой к фононной функции распределения связана возникающая в диэлектрике добавка к тензору упругих напряжений. Эта добавка должна быть пропорциональна скорости изменения деформации:

$$\sigma'_{il} = \eta_{ilmn} \dot{u}_{mn}. \quad (27.9)$$

Тензор η_{ilmn} называется *тензором коэффициентов вязкости* или *внутреннего трения*.

Полный тензор упругих напряжений σ_{il} есть

$$\sigma_{il} = \sigma_{il}^{(0)} + \sigma'_{il}. \quad (27.10)$$

Чтобы учесть вязкие потери, нужно это значение тензора упругих напряжений подставить в уравнения теории упругости:

$$\rho \ddot{u}_i = \frac{\partial \sigma_{il}}{\partial r_l}. \quad (27.11)$$

Скорость диссипации энергии упругих колебаний за счет процессов внутреннего трения получается непосредственно из уравнений движения (27.11). Запишем их в явном виде

$$\rho \ddot{u}_i = \lambda_{ilmn} \frac{\partial u_{mn}}{\partial r_l} + \eta_{ilmn} \frac{\partial^2 u_{mn}}{\partial r_l \partial t},$$

умножим на u_i и просуммируем по i . В результате в левой части мы получаем

$$\rho \dot{u}_i \ddot{u}_i = \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{2} \rho \dot{u}_i^2 \right),$$

т. е. производную по времени от плотности кинетической энергии, а справа

$$-\lambda_{ilmn}\dot{u}_{il}u_{mn} - \eta_{ilmn}\dot{u}_{il}\dot{u}_{mn} + \frac{\partial}{\partial r_l}(\dot{u}_i\sigma_{il}).$$

Здесь первое слагаемое есть взятая с обратным знаком производная по времени от плотности упругой энергии (27.1). Переносим первое и третье слагаемые в левую часть, мы получаем

$$\frac{\partial E^{(s)}}{\partial t} + \operatorname{div} G^{(s)} = -\eta_{ilmn}\dot{u}_{il}\dot{u}_{mn}, \quad (27.12)$$

где плотность потока энергии $G^{(s)}$ теперь обозначает величину

$$G_l^{(s)} = -\dot{u}_i\sigma_{il}, \quad (27.13)$$

равную в нашем случае

$$G_l^{(s)} = -\lambda_{ilmn}\dot{u}_{il}u_{mn} - \eta_{ilmn}\dot{u}_{il}\dot{u}_{mn}. \quad (27.14)$$

Первое слагаемое в левой части (27.12) описывает скорость изменения плотности энергии упругих колебаний. Второе представляет собой дивергенцию плотности потока энергии упругих колебаний, $G^{(s)}$. Кроме слагаемого (27.8) в выражение для $G^{(s)}$ теперь входит и вязкий член.

Полную скорость диссипации упругой энергии получаем, интегрируя (27.12) по d^3r . Интеграл от $\operatorname{div} G^{(s)}$ преобразуется в поверхностный интеграл от потока упругой энергии. Считая, что поток энергии через поверхность равен нулю, мы получаем

$$\frac{\partial \mathcal{E}^{(s)}}{\partial t} = - \int d^3r \eta_{ilmn}\dot{u}_{il}\dot{u}_{mn}. \quad (27.15)$$

Взятое с обратным знаком, это выражение должно быть равно $T\dot{\mathcal{S}}$, т. е. оно описывает возрастание энтропии за счет процессов внутреннего трения.

Получим теперь выражение, описывающее скорость возрастания энтропии упругой сплошной среды в общем случае, когда оно обусловлено не только вязкостью, а и теплопроводностью.

Вычислим скорость возрастания плотности энтропии с помощью (27.5):

$$\dot{S} = \frac{1}{T} \frac{\partial}{\partial t} \left(E - \frac{1}{2} \rho \dot{u}^2 \right) - \frac{1}{T} \sigma_{il}^{(0)} \dot{u}_{il}. \quad (27.16)$$

Здесь мы воспользовались соотношением (27.5), причем вместо U подставили разность $E - \rho \dot{u}^2/2$, где E есть полная энергия единицы объема сплошной среды. Примем во внимание закон сохранения полной энергии диэлектрика, который в дифференциальной форме гласит

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \operatorname{div} G = 0. \quad (27.17)$$

Здесь G есть полная плотность потока энергии, равная

$$G = G^{(s)} + Q, \quad (27.18)$$

где Q — плотность потока тепла.

Подставляя в (27.16) соотношения (27.17) и (27.18) и преобразуя правую часть таким же образом, как и при выводе (27.12), мы получаем

$$\dot{S} = -\frac{1}{T} \dot{u}_i \left(\rho \ddot{u}_i - \frac{\partial \sigma_{il}}{\partial r_l} \right) - \frac{1}{T} \frac{\partial}{\partial r_l} (G_l + \sigma_{il} \dot{u}_i) + \frac{1}{T} \sigma'_{il} \dot{u}_{il}.$$

Первое слагаемое в правой части обращается в нуль в силу уравнений движения (27.11). Второе слагаемое с учетом (27.18) и (27.13) приводится к виду

$$-\frac{1}{T} \frac{\partial}{\partial r_l} (G_l + \sigma_{il} \dot{u}_i) = -\frac{1}{T} \operatorname{div} Q = -\operatorname{div} \frac{Q}{T} - \frac{1}{T^2} Q \nabla T.$$

С учетом соотношений (12.1) и (27.9) мы имеем

$$\dot{S} + \operatorname{div} \frac{Q}{T} = \frac{1}{T} \eta_{ilmn}\dot{u}_{il}\dot{u}_{mn} + \frac{1}{T^2} \kappa_{il} \frac{\partial T}{\partial r_i} \frac{\partial T}{\partial r_l}. \quad (27.19)$$

Интеграл по объему от второго слагаемого в левой части преобразуется в поверхностный, который дает нуль, если поток тепла через поверхность равен нулю. В результате скорость возрастания энтропии системы

$$\dot{\mathcal{S}} = \int d^3r \dot{S} = \int d^3r \left(\frac{1}{T} \eta_{ilmn}\dot{u}_{il}\dot{u}_{mn} + \frac{1}{T^2} \kappa_{il} \frac{\partial T}{\partial r_i} \frac{\partial T}{\partial r_l} \right). \quad (27.20)$$

Мы видим, что процессы вязкости и теплопроводности дают независимые вклады в скорость возрастания энтропии.

Сравнивая (27.20) с общим выражением (11.28), мы делаем вывод, что следствием соотношений Онсагера в данном случае является симметрия тензора коэффициентов вязкости относительно перестановки первой и второй пары значков:

$$\eta_{ilmn} = \eta_{mnil}. \quad (27.21)$$

Скорость диссипации механической энергии связана со скоростью возрастания энтропии соотношением (11.18), которое в нашем случае дает

$$\frac{d\mathcal{E}^{(s)}}{dt} = - \int d^3r \left(\eta_{ilmn} \dot{u}_{il} \dot{u}_{mn} + \frac{1}{T} \kappa_{il} \frac{\partial T}{\partial r_i} \frac{\partial T}{\partial r_l} \right). \quad (27.22)$$

Переходим к вычислению коэффициентов поглощения монохроматической бегущей звуковой волны. Определим коэффициент поглощения γ как отношение механической энергии звука, диссипирующей в единицу времени, к полной механической энергии, запасенной звуковой волной

$$\gamma = - \dot{\mathcal{E}}^{(s)} / \mathcal{E}^{(s)}. \quad (27.23)$$

Ниже (см. § 30) мы сможем с помощью прямых оценок убедиться, что поглощение звука всегда столь мало, что при любых частотах выполняется неравенство

$$\gamma / \omega \ll 1. \quad (27.24)$$

При таком условии можно использовать для расчета поглощения метод последовательных приближений. В нулевом приближении волна считается незатухающей; вектор упругого смещения изменяется в пространстве и во времени как

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}_0 \cos(\omega t - \mathbf{q}r). \quad (27.25)$$

Коэффициент поглощения мы получаем, подставляя это выражение в (27.22) и выполняя усреднение по периоду. В соответствии с (27.22), коэффициент поглощения есть сумма двух слагаемых

$$\gamma = \gamma_\eta + \gamma_\kappa, \quad (27.26)$$

причем первое описывает вклад в поглощение за счет вязкости, а второе — за счет теплопроводности.

Начнем с вычисления знаменателя в (27.23). Поскольку средние значения потенциальной и кинетической энергий в любом гармоническом колебании, в том числе и в звуковой волне, равны друг другу, мы можем вычислить энергию $\mathcal{E}^{(s)}$ как удвоенное среднее по времени значение кинетической энергии:

$$\mathcal{E}^{(s)} = \overline{\mathcal{V} \rho \dot{\mathbf{u}}^2} = \frac{1}{2} \mathcal{V} \rho \omega^2 \mathbf{u}_0^2 \quad (27.27)$$

(черта обозначает усреднение по периоду звука).

Подставляя (27.25) в первый член (27.22) и усредняя по периоду, мы находим

$$\gamma_\eta = \frac{\overline{\eta_{ilmn} \dot{u}_{il} \dot{u}_{mn}}}{\frac{1}{2} \rho \omega^2 \mathbf{u}_0^2} = \frac{\omega^2}{\rho v^2} \eta_{qkqm} e_k e_m. \quad (27.28)$$

Здесь $v = \omega / q$ — фазовая скорость звука, $\mathbf{e} = \mathbf{u}_0 / u_0$ — вектор поляризации звука, индекс q у тензора означает проекцию его по соответствующему индексу на направление \mathbf{q} . Таким образом, коэффициент γ_η пропорционален квадрату частоты звука.

Чтобы рассчитать коэффициент γ_κ , определим изменение температуры ΔT под влиянием адиабатической деформации, создаваемой звуком. Для этого, воспользовавшись выражением (2.7) для плотности свободной энергии, вычислим плотность энтропии деформированного диэлектрика. Имеем

$$S = - \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_{u_{il}} = S_0 + \lambda_{ilmn}^{(T)} \alpha_{il} u_{mn}. \quad (27.29)$$

Чтобы найти ΔT , нужно правую часть (27.29) как функцию $T + \Delta T$ приравнять $S_0(T)$ — плотности энтропии в отсутствие деформации. Разлагая по малой величине ΔT , имеем

$$S_0(T + \Delta T) = S_0(T) + \frac{C}{T} \Delta T,$$

где C — удельная теплоемкость. Отсюда

$$\Delta T = - \frac{T}{C} \lambda_{ilmn}^{(T)} \alpha_{il} u_{mn}. \quad (27.30)$$

В выражениях такого типа мы иногда будем отбрасывать

индекс T у тензора λ_{ilmn} и тем самым пренебрегать различием между адиабатическими и изотермическими модулями упругости, которое обычно мало.

Скорость возрастания энтропии вследствие процессов теплопроводности есть, согласно (12. 4),

$$\dot{\mathcal{P}} = \frac{1}{T^2} \int d^3r \frac{\partial \Delta T}{\partial r_i} \frac{\partial \Delta T}{\partial r_l} \kappa_{il}. \quad (27.31)$$

Подставляя сюда ΔT из (27.30) и выполняя усреднение по периоду звука, получаем выражение для теплопроводного вклада в коэффициент поглощения

$$\gamma_{\kappa} = \frac{T \kappa (\lambda_{ilmn} \alpha_{il} \epsilon_m)^2}{C^2 \rho v^4} \omega^2, \quad (27.32)$$

где введено обозначение

$$\kappa = \kappa_{il} q_i q_l / q^2.$$

Коэффициент γ_{κ} (так же как и γ_{η}) пропорционален ω^2 . Он сложным образом зависит от углов. Для некоторых направлений распространения и поляризации звука он обращается в нуль. Так, он равен нулю для поперечного звука, распространяющегося вдоль оси симметрии кристалла. В общем же случае затухания звука характеризуется суммарным коэффициентом поглощения (27.26).

Чтобы определить закон убывания механической энергии, запасенной в звуковой волне, мы должны учесть, что в следующем приближении по малому параметру γ/ω амплитуда u_0 в (27.25) является величиной, медленно изменяющейся со временем. Медленность означает, что мало относительное изменение амплитуды за период колебания. Соответственно, мы должны считать зависящей от времени также и механическую энергию $\mathcal{E}^{(s)}$. Согласно (27.23), эта величина изменяется со временем следующим образом:

$$\frac{d\mathcal{E}^{(s)}}{dt} = -\gamma \mathcal{E}^{(s)}, \quad (27.33)$$

откуда получается закон затухания

$$\mathcal{E}^{(s)}(t) = \mathcal{E}^{(s)}(0) e^{-\gamma t}. \quad (27.34)$$

Фактически, однако, на эксперименте обычно наблюдается не временное, а пространственное затухание зву-

ковой интенсивности, поэтому задачу о поглощении звука приходится ставить иначе. Будем характеризовать локальную интенсивность звука плотностью энергии $E^{(s)}$. Мы хотим определить закон затухания этой величины в пространстве при заданном ее значении «на входе в кристалл», т. е. на какой-то определенной поверхности кристалла. Для этого рассмотрим более общую задачу — получим дифференциальное уравнение, описывающее закон изменения плотности энергии в пространстве и во времени с учетом диссипации, и найдем его стационарное решение.

Будем считать, что амплитуда u_0 в (27.25) есть медленная функция как времени, так и координат. Последнее означает, что мало ее относительное изменение на расстоянии порядка $2\pi/q$. Соответственно, мы должны считать медленными функциями r и t как плотность энергии упругих колебаний $E^{(s)}$, так и плотность потока энергии $G^{(s)}$. Эти две величины связаны уравнением, которое проще всего получить, усредняя (27.12) по периоду звука. Сохраняя для среднего значения $G^{(s)}$ прежнее обозначение, мы можем записать результат усреднения в виде ¹⁾

$$\frac{\partial E^{(s)}}{\partial t} + \text{div } G^{(s)} = -\gamma E^{(s)}. \quad (27.35)$$

В выражении (27.14) для $G^{(s)}$ достаточно удержать первое слагаемое (27.8); вторым можно пренебречь в силу неравенства $\gamma/\omega \ll 1$.

Выразим $G^{(s)}$ через плотность энергии $E^{(s)}$. Подставляя (27.25) в (27.8) (причем производными от медленно меняющейся функции $u_0(r, t)$ пренебрегаем) и усредняя, получаем

$$G_l^{(s)} = \frac{\omega}{2} \lambda_{ilmn} u_{0i} u_{0m} q_n.$$

Компоненты вектора u_0 связаны соотношением, вытекающим из уравнений движения (27.2):

$$\rho \omega^2 u_{0i} = \lambda_{ilmn} q_l q_n u_{0m}.$$

¹⁾ Буквальное усреднение (27.12) даст соотношение (27.35) с правой частью $-\gamma_{\eta} E^{(s)}$. Полный коэффициент затухания (27.26) получится, если добавить в правой части (27.12) член, описывающий диссипацию за счет теплопроводности.

Дифференцируя это соотношение по q_i и умножая обе его части на $\omega u_{0i}/4$, мы находим

$$\frac{1}{2} \frac{\partial \omega}{\partial q_i} \rho \omega^2 u_0^2 = \frac{1}{2} \lambda_{ilmn} q_n u_{0i} u_{0m}.$$

Здесь справа стоит величина $G_i^{(s)}$, а слева $g_i E^{(s)}$, где $g = \partial \omega / \partial q$ — групповая скорость звука. Мы получаем, таким образом, соотношение

$$G^{(s)} = g E^{(s)}, \quad (27.36)$$

с учетом которого уравнение (27.35) переписывается в виде

$$\frac{\partial E^{(s)}}{\partial t} + \operatorname{div} g E^{(s)} = -\gamma E^{(s)}. \quad (27.37)$$

Левая часть этого уравнения представляет собой полное изменение плотности энергии упругих колебаний (интенсивности звука) в данной точке. С одной стороны, оно складывается из изменения $E^{(s)}$ вследствие нестационарности и изменения, обусловленного притоком энергии из соседних точек сплошной среды. С другой стороны, оно равно плотности энергии, поглощаемой в единицу времени, которая дается правой частью уравнения.

Подчеркнем, что в такой форме это уравнение имеет гораздо более широкие пределы применимости, чем исходные уравнения теории упругости с диссипативными членами в форме (27.9), из которых оно было выведено. Дело в том, что (как мы увидим ниже) выражение (27.9) для диссипативной части тензора упругих напряжений справедливо только при $\omega t \ll 1$. При $\omega t \geq 1$ это выражение уже не имеет места, и для коэффициента поглощения уже не имеет места формула (27.28), а он определяется одним из выражений, которые будут выведены в §§ 33—35. Однако если соответствующее выражение для коэффициента поглощения высокочастотного звука подставить в правую часть уравнения (27.37), то в остальном данное уравнение сохраняет свою форму и для этого случая.

Рассмотрим с помощью уравнения (27.37) стационарную ($\partial E^{(s)} / \partial t = 0$) задачу о пространственном затухании звуковой волны, которая возбуждается на границе упругой сплошной среды (плоскость $x = 0$) и распространяется вглубь. Если размеры образца в направлении осей y

и z достаточно велики, то вдали от боковых границ крайними эффектами можно пренебречь и считать, что интенсивность звука $E^{(s)}$ меняется только вдоль оси x . В этом случае уравнение (27.37) приобретает вид

$$g_x \frac{dE^{(s)}}{dx} + \gamma E^{(s)} = 0. \quad (27.38)$$

Его решение есть

$$E^{(s)}(x) = E^{(s)}(0) e^{-\Gamma x}, \quad (27.39)$$

где

$$\Gamma = \gamma / g_x. \quad (27.40)$$

Величина Γ называется *пространственным коэффициентом поглощения звука*; $1/\Gamma$ есть та длина, на которой интенсивность звука $E^{(s)}(x)$ убывает в e раз.

§ 28. Вывод общего выражения для диссипативной части тензора упругих напряжений

Рассмотрим кристалл, подвергнутый однородной статической упругой деформации. Однородная деформация не нарушает симметрии кристаллической решетки относительно трансляций. Соответственно, она не меняет классификации колебательных состояний, которые по-прежнему характеризуются волновым вектором k и номером колебательной ветви j . Однако благодаря ангармонизму межатомных сил частоты колебаний меняются вследствие деформации.

Если деформация мала, т. е.

$$|u_{ii}| \ll 1, \quad (28.1)$$

то изменение фононных частот $\Delta \Omega_j(k)$ в первом приближении пропорционально тензору деформации u_{ii} . Это изменение записывают в виде (А. И. Ахизер, 1938)

$$\Delta \Omega_j(k) = \Omega_j(k) m_{ij} u_{ii}, \quad (28.2)$$

где безразмерный симметричный тензор m_{ij} зависит как от номера колебательной ветви j , так и от волнового вектора k . Его мы будем называть *тензором деформационного потенциала* колебаний решетки, а метод, основанный на применении соотношения (28.2) для описания взаимодействия фононов с деформацией, — *методом деформационного потенциала*.

Этот метод остается применимым, если деформация нестационарна, однако изменяется со временем достаточно медленно, так что выполняется условие

$$|\dot{u}_i/u_i| \ll \Omega. \quad (28.3)$$

Метод можно использовать и для пространственно-неоднородных деформаций, если только масштаб неоднородности гораздо больше длины волны колебания решетки:

$$\left| \frac{\partial u_{il}}{\partial r_m} u_{il}^{-1} \right| \ll k. \quad (28.4)$$

В этих случаях добавка $\Delta\Omega_j(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t)$ к частоте колебания решетки зависит от пространственных координат \mathbf{r} и времени t .

По поводу зависимости величины $\Delta\Omega_j(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t)$ от \mathbf{r} необходимо сделать одно существенное замечание. Выражение типа (28.2), пропорциональное симметричному тензору деформации u_{il} , вообще говоря, имеет место только в сопутствующей системе координат. В этой системе частота фонона не должна меняться при повороте участка кристалла как целого (если, разумеется, размеры участка намного превышают длину волны фонона). Смещение сплошной среды \mathbf{u} при повороте ее как целого на малый угол есть

$$\mathbf{u} = [\delta\varphi \mathbf{r}], \quad (28.5)$$

где $\delta\varphi$ — псевдовектор, направленный вдоль оси поворота и по абсолютной величине равный углу поворота. Это значит, что поправка к частоте в сопутствующей системе координат должна зависеть только от такой комбинации производных $\partial u_i/\partial r_i$, которая обращается в нуль при подстановке выражения (28.5). Такая комбинация есть симметричный тензор

$$\frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial r_l} + \frac{\partial u_l}{\partial r_i} \right).$$

В линейном приближении, которым мы здесь ограничиваемся, он равен тензору деформации u_{il} .

В лабораторной же системе координат при наличии анизотропии фононный спектр (т. е. явный вид зависимости частоты фонона от \mathbf{k}) изменяется при повороте

кристалла как целого по той простой причине, что при этом должны преобразовываться друг через друга компоненты вектора \mathbf{k} . Поэтому поправка к частоте фонона в лабораторной системе координат определялась бы также и антисимметричной частью тензора $\partial u_i/\partial r_j$.

Порядок величины компонент тензора m_i легко находится из условия, что относительное изменение энергии фонона под влиянием деформации должно быть порядка u_{il} . Отсюда следует, что они, вообще говоря, порядка единицы (фактически они обычно оказываются несколько больше единицы). При $\bar{k}a \ll 1$ компоненты тензора деформационного потенциала не зависят от абсолютной величины волнового вектора \mathbf{k} , а зависят только от его ориентации относительно кристаллографических осей.

Если выполнены условия (28.3) и (28.4), то движение волновых пакетов (4.8) можно (в соответствии со сказанным в § 4) рассматривать как движение классических частиц с функцией Гамильтона

$$\tilde{\Omega}(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t) = \Omega(\mathbf{k}) + \Delta\Omega(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t), \quad (28.6)$$

причем производные по времени от \mathbf{k} и \mathbf{r} подчиняются уравнениям Гамильтона:

$$\dot{\mathbf{k}} = -\frac{\partial \tilde{\Omega}}{\partial \mathbf{r}}, \quad \dot{\mathbf{r}} = \frac{\partial \tilde{\Omega}}{\partial \mathbf{k}}.$$

Можно считать, таким образом, что добавка к фононному спектру, обусловленная деформацией, играет роль нестационарного и неоднородного внешнего поля, влияющего на движение фононных волновых пакетов.

В случае статической деформации измененной частоте фонона

$$\tilde{\Omega} = \Omega(1 + m_{il}u_{il}) \quad (28.7)$$

соответствует измененное значение равновесной функции распределения

$$N_0 = n_0(\hbar\tilde{\Omega}/T). \quad (28.8)$$

Деформация, возникающая при распределении звука, нестационарна. Это значит, что функция распределения фононов в поле звуковой волны неравновесна и должна определяться путем решения кинетического уравнения (6.1). Для случая звукового возмущения оно запишется

в виде

$$\frac{\partial N}{\partial t} + \frac{\partial \tilde{\Omega}}{\partial \mathbf{k}} \frac{\partial N}{\partial \mathbf{r}} - \frac{\partial \tilde{\Omega}}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial N}{\partial \mathbf{k}} = \left[\frac{\partial N}{\partial t} \right]_{\text{ст}}. \quad (28.9)$$

Условия его применимости (6.25) и (6.26) оказываются в данном случае совпадающими с критериями (28.4) и (28.3) применимости метода деформационного потенциала.

Неравновесность фононов приводит к изменению тензора упругих напряжений в диэлектрике. Выясним, какой вклад в тензор упругих напряжений дает изменение фононной функции распределения N по сравнению с равновесным значением.

Для расчета этого вклада воспользуемся следующим приемом. Предположим, что диэлектрик, кроме реальной деформации $u_{il}(\mathbf{r}, t)$, подвергнут также и виртуальной деформации $\delta u_{il}(\mathbf{r}, t)$. Последняя пусть изменяется от нуля до своего конечного значения δu_{il} за малый промежуток времени δt , за который реальная деформация не успевает измениться заметным образом. Иными словами, мы рассматриваем виртуальную деформацию при постоянной реальной деформации. Пусть далее виртуальная деформация удовлетворяет неравенствам (28.1), (28.3) и (28.4), а в остальных отношениях произвольна.

Изменение энергии системы фононов в линейном по δu_{il} приближении запишется в виде

$$\delta \mathcal{U}^{(\Phi)} = \int d^3r \sigma_{il}^{(\Phi)} \delta u_{il}. \quad (28.10)$$

Фигурирующая в этом выражении величина $\sigma_{il}^{(\Phi)}$ и есть вклад в тензор упругих напряжений, обусловленный фононами. Мы выразим $\sigma_{il}^{(\Phi)}$ через функцию распределения фононов, после чего уже будет легко выделить ту часть тензора напряжений, которая связана с неравновесностью фононной системы.

Энергия фононной системы есть

$$\mathcal{U}^{(\Phi)} = \int d^3r \int d\xi_k \hbar \tilde{\Omega} \mathfrak{N}, \quad (28.11)$$

где \mathfrak{N} есть то значение фононной функции распределения, которое она принимает после того, как произведена виртуальная деформация, а $\hbar \tilde{\Omega}$ определяется выражением

вида (28.7), куда входит в виде слагаемого и член с виртуальной деформацией.

Изменение фононной энергии $\delta \mathcal{U}^{(\Phi)}$, происходящее в результате виртуальной деформации за время δt , есть

$$\delta \mathcal{U}^{(\Phi)} = \int_0^{\delta t} dt \dot{\mathcal{U}}^{(\Phi)} = \int_0^{\delta t} dt \int d^3r \int d\xi_k \hbar (\dot{\tilde{\Omega}} \mathfrak{N} + \tilde{\Omega} \dot{\mathfrak{N}}). \quad (28.12)$$

Поскольку предполагается, что виртуальная деформация удовлетворяет условию медленности (28.3), она непосредственно не вызывает изменения числа фононов в данном колебательном состоянии (\mathbf{k}, j) : фононные числа заполнения суть адиабатические инварианты, которые, как известно¹⁾, остаются неизменными под действием адиабатических, т. е. достаточно медленных с точки зрения неравенства (28.3), возмущений.

Таким образом, изменение фононной функции распределения $d\mathfrak{N}/dt$ можно найти из кинетического уравнения

$$\frac{\partial \mathfrak{N}}{\partial t} + \frac{\partial \tilde{\Omega}}{\partial \mathbf{k}} \frac{\partial \mathfrak{N}}{\partial \mathbf{r}} - \frac{\partial \tilde{\Omega}}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial \mathfrak{N}}{\partial \mathbf{k}} = \left[\frac{\partial \mathfrak{N}}{\partial t} \right]_{\text{ст}}.$$

Слагаемое

$$\int_0^{\delta t} dt \int d^3r \int d\xi_k \frac{\partial \mathfrak{N}}{\partial t} \hbar \tilde{\Omega} \quad (28.13)$$

в правой части (28.12) равно нулю. Чтобы убедиться в этом, найдем $\partial \mathfrak{N}/\partial t$ из написанного кинетического уравнения и подставим в (28.13). Член

$$\int d\xi_k \hbar \tilde{\Omega} \left[\frac{\partial \mathfrak{N}}{\partial t} \right]_{\text{ст}},$$

как мы уже убедились в § 11, равен нулю, поскольку в процессах фононных столкновений полная энергия фононной системы не меняется. Разность

$$-\hbar \tilde{\Omega} \frac{\partial \tilde{\Omega}}{\partial \mathbf{k}} \frac{\partial \mathfrak{N}}{\partial \mathbf{r}} + \hbar \tilde{\Omega} \frac{\partial \tilde{\Omega}}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial \mathfrak{N}}{\partial \mathbf{k}}$$

¹⁾ См., например, Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Механика.— М.: Наука, 1973, с. 193.

можно переписать в виде

$$-\frac{\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\partial \tilde{\Omega}^2}{\partial k} \mathfrak{N} \right) + \frac{\hbar \partial}{2 \partial k} \left(\frac{\partial \tilde{\Omega}^2}{\partial r} \mathfrak{N} \right).$$

Интеграл по d^3r от первого члена преобразуется в интеграл по поверхности от нормальной компоненты плотности потока энергии, переносимого фононами. Мы будем полагать его равным нулю. При преобразовании второго члена надо перейти от интегрирования по d^3k в объеме основной ячейки обратной решетки

$$\int d^3k \frac{\partial}{\partial k} \left(\frac{\partial \tilde{\Omega}^2}{\partial r} \mathfrak{N} \right)$$

к интегралу по поверхности, ограничивающей основную ячейку. Повторяя рассуждения § 11, убеждаемся, что и этот интеграл равен нулю.

При вычислении вклада от первого слагаемого в (28.12) мы должны заменить \mathfrak{N} истинной функцией распределения фононов N , поскольку нас интересует изменение фононной энергии в первом приближении по δu_{il} . Интегрируя по времени, получаем

$$\delta \mathcal{U}^{(\Phi)} = \int d^3r \int d\xi_k \hbar \Omega N m_{il} \delta u_{il}.$$

Отсюда для фононного вклада в тензор упругих напряжений получается

$$\sigma_{il}^{(\Phi)} = \int d\xi_k \hbar \Omega m_{il} N, \quad (28.14)$$

где N есть решение кинетического уравнения (28.9).

С учетом (28.14) уравнение теории упругости можно записать в виде

$$\rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} = \lambda_{ilmn}^{(0)} \frac{\partial u_{mn}}{\partial r_l} + \frac{\partial}{\partial r_l} \int d\xi_k \hbar \Omega m_{il} N, \quad (28.15)$$

где $\lambda_{ilmn}^{(0)}$ обозначает «нефононный» вклад в тензор модулей упругости, т. е. ту его часть, которая определяется упругими свойствами диэлектрика при абсолютном нуле температур.

Убедимся в сохранении суммарной энергии фононной системы и упругой сплошной среды. Для этого умножим кинетическое уравнение (28.9) на $\hbar \tilde{\Omega}$ и проинтегрируем

по $d\xi_k$. Интеграл от первого слагаемого запишется в виде

$$\frac{\partial}{\partial t} \int \hbar \tilde{\Omega} N d\xi_k - \int \hbar \frac{\partial \tilde{\Omega}}{\partial t} N d\xi_k.$$

Сумму второго и третьего слагаемых можно представить в виде

$$-\frac{\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial k} \left(\frac{\partial \tilde{\Omega}^2}{\partial r} N \right) + \frac{\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\partial \tilde{\Omega}^2}{\partial k} N \right).$$

В этом выражении интеграл от первого члена преобразуется в поверхностный по границе основной ячейки обратной решетки и оказывается равным нулю. Интеграл от второго слагаемого есть $\text{div } \mathbf{G}^{(\Phi)}$, где

$$\mathbf{G}^{(\Phi)} = \int d\xi_k \frac{\partial \tilde{\Omega}}{\partial k} \hbar \tilde{\Omega} N.$$

Интеграл от члена с оператором столкновений дает нуль. Таким образом, мы получаем

$$\frac{\partial U^{(\Phi)}}{\partial t} + \text{div } \mathbf{G}^{(\Phi)} = \int d\xi_k \hbar \frac{\partial \tilde{\Omega}}{\partial t} N, \quad (28.16)$$

где

$$U^{(\Phi)} = \int d\xi_k \hbar \tilde{\Omega} N$$

отличается от выражения (11.1) заменой частоты Ω на $\tilde{\Omega}$.

Умножая (28.15) на \dot{u}_i и суммируя по i , получаем

$$\frac{\partial E^{(s0)}}{\partial t} + \text{div } \mathbf{G}^{(s0)} = - \int d\xi_k \hbar \frac{\partial \tilde{\Omega}}{\partial t} N, \quad (28.17)$$

где

$$E^{(s0)} = \frac{1}{2} \rho \dot{u}^2 + \frac{1}{2} \lambda_{ilmn}^{(0)} u_{il} u_{mn} \quad (28.18)$$

есть плотность энергии сплошной среды с тензором модулей упругости $\lambda_{ilmn}^{(0)}$, а

$$\mathbf{G}_i^{(s0)} = - \lambda_{ilmn}^{(0)} \dot{u}_l u_{mn} - \dot{u}_l \int d\xi_k \hbar \Omega m_{il} N. \quad (28.19)$$

Складывая (28.16) и (28.17), получаем закон сохранения энергии в дифференциальной форме

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \text{div } \mathbf{G} = 0. \quad (28.20)$$

Для фигурирующих в этом уравнении плотности энергии

Е и плотности потока энергии G имеют место следующие выражения:

$$E = \frac{1}{2} \rho \dot{u}^2 + \frac{1}{2} \lambda_{ilmn}^{(0)} u_i u_{mn} + \int d\xi_k \hbar \tilde{\Omega} N, \quad (28.21)$$

$$G_i = -\lambda_{ilmn}^{(0)} \dot{u}_i u_{mn} - \dot{u}_i \int d\xi_k \hbar \Omega m_{il} N + \int d\xi_k \hbar \tilde{\Omega} \frac{\partial \tilde{\Omega}}{\partial k_i} N. \quad (28.22)$$

Таким образом, суммарная энергия упругих колебаний и фононной системы сохраняется, в отличие от механической энергии упругих колебаний, диссипирующей при распространении звука.

Если частота звука ω достаточно мала, то за период звукового колебания успевает установиться равновесная функция распределения

$$\tilde{N}_0 = n_0(\hbar \tilde{\Omega} / \tilde{T}), \quad (28.23)$$

где $\tilde{T} = T + \Delta T$ есть изменившееся под действием адиабатической деформации значение температуры, так что ΔT дается выражением (27.30). Соответствующее условие на частоту ω просто указать для высоких температур ($T \gg \Theta$). В этом случае функция распределения \tilde{N} формируется за время релаксации фононов τ , и оно, очевидно, должно иметь вид

$$\omega \tau \ll 1. \quad (28.24)$$

При низких температурах ($T \ll \Theta$) дело обстоит сложнее: скорость релаксации в системе фононов определяется двумя различными временами, τ_N и τ_V , так что соответствующий критерий зависит от симметрии возмущения, выводящего систему фононов из равновесия. Если возмущение таково, что оно не создает отличной от нуля дрейфовой скорости, то равновесное распределение (28.23) устанавливается за время τ_N , а соответствующее ограничительное условие на частоту должно, очевидно, иметь вид

$$\omega \tau_N \ll 1. \quad (28.25)$$

Если же возмущение создает отличную от нуля дрейфовую скорость, то за время τ_N может установиться только равновесная функция вида (15.5), соответствующая

появляющаяся в состоянии неполного равновесия. Полное же равновесие с $V = 0$ устанавливается за время τ_V , так что в этом случае в качестве условия того, что в нулевом приближении функции распределения имеет вид (28.23), получается неравенство

$$\omega \tau_V \ll 1. \quad (28.26)$$

Поскольку акустическое возмущение нестационарно, фононная функция распределения должна отличаться от равновесной функции (28.23) на неравновесную добавку, ΔN , пропорциональную одному из малых параметров: (28.24), (28.25) или (28.26), так что $N = \tilde{N}_0 + \Delta N$. Добавка ΔN и определяет диссипативную часть тензора напряжений

$$\sigma'_{ii} = \int d\xi_k \hbar \Omega m_{il} \Delta N. \quad (28.27)$$

Что же касается равновесной части \tilde{N}_0 фононной функции распределения, то ее мы определили таким образом, что она содержит часть, зависящую от деформации. В первом приближении по малым величинам $\hbar \Delta \Omega / T$ и $\Delta T / T$ эту часть можно рассматривать как аддитивную добавку, равную

$$-N_0(N_0 + 1) \frac{\hbar \Delta \Omega}{T} + N_0(N_0 + 1) \frac{\hbar \Omega}{T} \frac{\Delta T}{T}. \quad (28.28)$$

Она дает недиссипативный вклад в тензор упругих напряжений. Первое слагаемое приводит к появлению у модулей упругости добавки, зависящей от температуры. При учете ее модули $\lambda_{ilmn}^{(0)}$ заменяются изотермическими модулями

$$\lambda_{ilmn}^{(T)} = \lambda_{ilmn}^{(0)} - \frac{1}{T} \int d\xi_k (\hbar \Omega)^2 N_0(N_0 + 1) m_{il} m_{mn}. \quad (28.29)$$

С помощью прямых оценок можно убедиться, что относительная величина температурной поправки к модулям упругости — второго слагаемого в (28.29) — всегда есть малая величина. При высоких температурах ($T \gg \Theta$) она имеет порядок

$$T / \bar{M} \bar{v}^2, \quad (28.30)$$

а при низких ($T \ll \Theta$) — порядок

$$(T/\overline{Mv^2})(T/\Theta)^3. \quad (28.31)$$

Если подставить в (28.14) вместо N второе слагаемое в (28.28), пропорциональное ΔT , мы получим вклад в тензор упругих напряжений за счет изменения температуры, описывающий тепловое расширение тела. Сравнивая его с (2.8), получаем выражение для коэффициента теплового расширения

$$\lambda_{lnp}\alpha_{np} = -\frac{1}{T^2} \int d\xi_k (\hbar\Omega)^2 m_{il} N_0 (N_0 + 1). \quad (28.32)$$

Если неравенство (28.24) или (28.25) заменяется на обратное, т. е. если $\omega\tau \gg 1$ при высоких температурах или же $\omega\tau_N \gg 1$ при низких, то за период звукового колебания состояние с определенной температурой, соответствующей мгновенному значению деформации, сформироваться не успевает. При этих условиях фононную функцию распределения естественно представлять в виде $N = N_0(\tilde{\Omega}) + \Delta N$, где $N_0(\tilde{\Omega})$ — равновесная функция распределения, зависящая от невозмущенного значения температуры и от возмущенной фононной частоты (и, следовательно, обращающая оператор столкновений в нуль), а ΔN — малая добавка, характеризующая неравновесность.

§ 29. Связь между ангармоническими коэффициентами и деформационным потенциалом фононов

Введение деформационного потенциала есть, в частности, способ описать трехфононные взаимодействия, когда один из взаимодействующих фононов есть длинноволновый, акустический, а два других принадлежат к одной и той же колебательной ветви j . Соответственно, тензор деформационного потенциала должен быть определенным образом связан с ангармоническими коэффициентами b_{ajj} , описывающими взаимодействие фононов. Найдем связь этих величин.

Для начала заметим, что ангармонические силовые константы должны удовлетворять тождеству

$$\sum_{np} B_{\gamma\gamma'\gamma''}^{nn'n''} = 0. \quad (29.1)$$

Так же как и соотношение (1.5) для гармонических силовых констант, оно является следствием трансляционной симметрии кристаллической решетки. Чтобы вывести это тождество, рассмотрим смещение атомов решетки

$$\Delta R_{np} = R_{np} + \Delta_1 R, \quad (29.2)$$

где R_{np} есть смещение за счет колебаний решетки (3.22), а $\Delta_1 R$ есть слагаемое, не зависящее от номеров n и p , т. е. описывающее чистую трансляцию. Подставим сумму (29.2) вместо величины R_{np} в выражение (6.3) для ангармонической энергии решетки. Поскольку ангармоническая энергия \mathcal{U}_3 от $\Delta_1 R$ зависеть не должна, то производная $\partial\mathcal{U}_3/\partial\Delta_1 R$ должна быть тождественно равна нулю при любых функциях $R_{n\gamma}$. Это требование вместе с условием симметрии матрицы $B_{\gamma\gamma'\gamma''}^{nn'n''}$ относительно перестановки пар аргументов $(n, \gamma), (n', \gamma')$ и (n'', γ'') и дает тождество (29.1).

Определим изменение частот колебаний в решетке, подвергнутой однородной деформации u_{il} . Будем теперь считать, что смещение атомов решетки есть сумма двух следующих слагаемых:

$$\Delta R_{np} = R_{np} + \Delta_2 R_{np}. \quad (29.3)$$

Здесь

$$\Delta_2 R_{npi} = u_{il}(a_n)_l$$

есть величина, описывающая смещение атомов решетки при однородной деформации, $(a_n)_l$ есть l -я компонента вектора a_n . Подставим сумму (29.3) в выражение для ангармонической энергии решетки и возьмем слагаемое, линейное по $\Delta_2 R_{np}$, т. е. по деформации. Оно равно

$$\frac{1}{2} u_{il} \sum_{n_1 n_2 n_3} (a_{n_1})_l \sum_{p_1 \gamma_2 \gamma_3} B_{ip_1 \gamma_2 \gamma_3}^{n_1 n_2 n_3} R_{n_2 \gamma_2} R_{n_3 \gamma_3}.$$

При записи этого выражения учтено, что γ_1 представляет собой совокупность двух значков — векторного индекса i и номера атома в элементарной ячейке, p_1 .

Выражением, записанным таким образом, пользоваться, однако, неудобно, так как величина под знаком первой суммы неограниченно растет по мере удаления от начала координат. Поэтому мы, воспользовавшись тождеством

деством (29.4), перепишем это выражение в виде

$$\frac{1}{2} u_{il} \sum_{n_1 n_2 n_3} (a_{n_1} - a_{n_3})_l \sum_{p_1} \sum_{\gamma_2 \gamma_3} B_{ip_1 \gamma_2 \gamma_3}^{n_1 n_2 n_3} R_{n_2 \gamma_2} R_{n_3 \gamma_3}.$$

Поскольку коэффициенты $B_{\gamma_1 \gamma_2 \gamma_3}^{n_1 n_2 n_3}$ достаточно быстро спадают с увеличением разности $|n_1 - n_3|$, ограниченность выражения под знаком суммы видна непосредственно.

Подставим в качестве $R_{n_2 \gamma_2}$ и $R_{n_3 \gamma_3}$ выражение (3.22). Для того чтобы вычислить поправки к фононному спектру за счет деформации решетки, достаточно сохранить в получившейся сумме только слагаемые, содержащие произведения операторов \hat{c} и \hat{c}^\dagger с одинаковыми индексами. Оно имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} u_{il} \frac{\hbar}{\rho \mathcal{V}} \sum_{n_1 n_2 n_3} (a_{n_1} - a_{n_3})_l \sum_{p_1} \sum_{\gamma_2 \gamma_3} \sum_{k_j} \frac{1}{\Omega_{k_j}} \left(N_{k_j} + \frac{1}{2} \right) \times \\ \times \exp [ik(a_{n_2} - a_{n_3})] B_{ip_1 \gamma_2 \gamma_3}^{n_1 n_2 n_3} e_{\gamma_2}(k, j) e_{\gamma_3}^*(k, j). \end{aligned} \quad (29.4)$$

Рассмотрим поведение ангармонических коэффициентов $b_{ajj}(q, k, -k - q)$ при малых q с тем, чтобы связать их с фононным деформационным потенциалом. Воспользовавшись общей формулой (6.5), имеем

$$\begin{aligned} b_{ajj}(q, k, -k - q) = \frac{1}{\rho \mathcal{V}} \sum_{n_1 n_2 n_3} \sum_{\gamma_1 \gamma_2 \gamma_3} B_{\gamma_1 \gamma_2 \gamma_3}^{n_1 n_2 n_3} \times \\ \times e_{\gamma_1}(q, a) e_{\gamma_2}(k, j) e_{\gamma_3}^*(k + q, j) \times \\ \times \exp [iq(a_{n_1} - a_{n_3}) + ik(a_{n_2} - a_{n_3})]. \end{aligned} \quad (29.5)$$

Ограничиваясь наименьшим приближением по параметру $q/k \ll 1$, будем всюду, где это позволяет получить отличный от нуля результат, полагать $q = 0$. Однако, если в (29.5) просто положить $q = 0$, то, поскольку у длинноволновых акустических фононов вектор поляризации не зависит от p , мы в силу тождества (29.1) получим нуль (как и должно быть на основании физических соображений, приведенных в § 6). Поэтому разложим экспонен-

ту в (29.5), ограничившись первым членом. Это дает

$$\begin{aligned} b_{ajj}(q, k, -k - q) = \frac{i}{\rho \mathcal{V}} q_l e_i(q, a) \sum_{n_1 n_2 n_3} (a_{n_1} - a_{n_3})_l \times \\ \times \sum_{p_1} \sum_{\gamma_2 \gamma_3} B_{ip_1 \gamma_2 \gamma_3}^{n_1 n_2 n_3} e_{\gamma_2}(k, j) e_{\gamma_3}^*(k, j) \exp [ik(a_{n_2} - a_{n_3})]. \end{aligned} \quad (29.6)$$

Выражение (29.6) пропорционально первой степени q (напоминаем, что вектор $e(q, a)$ зависит только от направления q).

Введем величину

$$\begin{aligned} \mathfrak{B}_{il} = \frac{1}{\rho \mathcal{V}} \sum_{n_1 n_2 n_3} (a_{n_1} - a_{n_3})_l \sum_{p_1} \sum_{\gamma_2 \gamma_3} B_{ip_1 \gamma_2 \gamma_3}^{n_1 n_2 n_3} e_{\gamma_2}(k, j) \times \\ \times e_{\gamma_3}^*(k, j) \exp [ik(a_{n_2} - a_{n_3})], \end{aligned}$$

не зависящую от q ¹⁾. Через нее мы можем переписать (29.6) следующим образом:

$$b_{ajj}(q, k, -k - q) = i e_i q_l \mathfrak{B}_{il}. \quad (29.7)$$

Чтобы сравнить выражения (29.4) и (29.6), мы должны считать деформацию u_i в (29.4) слабонеоднородной, соответствующей акустической колебанию с малым волновым вектором q и частотой Ω_{qa} . Считая, что вектор смещения в таком приближении дается соответствующими слагаемым в сумме (3.25), мы имеем для тензора деформации

$$\begin{aligned} u_{im} = \frac{i}{2} (e_l q_m + e_m q_l) \left(\frac{\hbar}{2\rho \mathcal{V} \Omega_{qa}} \right)^{1/2} (c_{qa} - c_{qa}^*) e^{iqr} = \\ = \frac{i}{4} (e_l q_m + e_m q_l) (\mu_{qa} - \mu_{qa}^*) e^{iqr}. \end{aligned} \quad (29.8)$$

Здесь амплитуды μ_{qa} и μ_{qa}^* считаются не операторами, а классическими величинами; соответственно, выражение (29.8) описывает зависимость от времени тензора деформации в некоторой точке кристалла. С учетом

¹⁾ В силу соображений, аналогичных высказанным в § 28, этот тензор, так же как и тензор m_{ij} , следует считать симметричным.

(29.8) выражение (29.4) переписывается следующим образом:

$$\begin{aligned} \frac{\hbar}{4} (\mu_{qa} - \mu_{qa}^*) \sum_{kj} b_{ajj}(\mathbf{q}, \mathbf{k}, -\mathbf{k} - \mathbf{q}) \frac{1}{\Omega_{kj}} \left(N_{kj} + \frac{1}{2} \right) = \\ = \frac{i\hbar}{4} (\mu_{qa} - \mu_{qa}^*) q_m e_l \sum_{kj} \mathfrak{B}_{lm}(\mathbf{k}, j) \frac{1}{\Omega_{kj}} \left(N_{kj} + \frac{1}{2} \right) = \\ = \frac{\hbar}{2} u_{lm} \sum_{kj} \mathfrak{B}_{lm} \frac{1}{\Omega_{kj}} \left(N_{kj} + \frac{1}{2} \right). \end{aligned} \quad (29.9)$$

Обозначая коэффициент при $N_{kj} + 1/2$ в (29.9) через $\hbar \Delta\Omega$, мы находим, что $\Delta\Omega = u_{lm} \mathfrak{B}_{lm} / 2\Omega$, откуда

$$m_{il} = \frac{1}{2\Omega^2} \mathfrak{B}_{il}. \quad (29.10)$$

Принимая, наконец, во внимание (29.7), мы получаем

$$b_{ajj}(\mathbf{q}, \mathbf{k}, -\mathbf{k} - \mathbf{q}) = 2iq_i e_l \Omega^2 m_{li}. \quad (29.11)$$

Это и есть искомая связь между ангармоническими коэффициентами при малых q и деформационным потенциалом.

Мы рассмотрели только диагональные по номеру колебательной ветви j компоненты тензора деформационного потенциала; наряду с ними можно ввести также и недиагональные компоненты¹⁾. Они описывают переходы между двумя колебательными ветвями, j и j' , под влиянием возмущения, созданного длинноволновым акустическим фононом, и могут быть выражены через ангармонические коэффициенты $b_{ajj'}(\mathbf{q}, \mathbf{k}, -\mathbf{k} - \mathbf{q})$ с помощью формул, аналогичных (29.11).

§ 30. Вычисление тензора коэффициентов вязкости и коэффициента поглощения звука в кристаллических диэлектриках

Получим общее выражение для тензора коэффициентов вязкости кристаллического диэлектрика и произведем его порядковые оценки в предельных случаях высоких и низких температур. Это позволит нам оценить

¹⁾ В полной аналогии с недиагональными компонентами электрофонового потенциала, введенными в главе III.

вязкостный и теплопроводностный вклады в коэффициент поглощения звука и сравнить эти вклады.

Будем считать, что в случае высоких температур выполняется условие (28.24), а в случае низких температур — условие (28.25) или же (28.26) (когда какое, мы уточним ниже). Соответственно решение кинетического уравнения ищем в виде

$$N = \tilde{N}_0 + \Delta N, \quad (30.1)$$

где \tilde{N}_0 определяется выражением (28.23).

В левую часть уравнения (28.9) подставим главную часть \tilde{N}_0 фононной функции распределения. Тогда в наименьшем порядке по $\hbar \Delta\Omega / T$ мы получаем

$$\frac{\partial \tilde{N}_0}{\partial \Omega} \dot{\Omega} + \frac{\partial N_0}{\partial T} \dot{T} = -\frac{\hbar \Omega}{T} N_0 (N_0 + 1) \left(m_{ii} \dot{u}_{ii} - \frac{\dot{T}}{T} \right), \quad (30.2)$$

причем, согласно (27.30),

$$\dot{T} = -\frac{T}{C} \lambda_{ilmn}^{(T)} \alpha_{ii} \dot{u}_{mn}. \quad (30.3)$$

Чтобы вычислить разность второго и третьего членов в левой части (28.9), заметим, что при $T = \text{const}$ она бы тождественно обратилась в нуль, так как равновесная функция распределения зависела бы только от переменной частоты Ω . Соответственно, когда T зависит от r , только эту зависимость и нужно учитывать при вычислении разности, которая оказывается равной

$$\frac{\partial \Omega}{\partial k} \nabla \Delta T \frac{\hbar \Omega}{T^2} N_0 (N_0 + 1), \quad (30.4)$$

где ΔT опять-таки определяется выражением (27.30).

Воспользовавшись соотношением (28.32) и выражением (5.11) для удельной теплоемкости диэлектрика, можно переписать (27.30) в следующем виде:

$$\frac{\Delta T}{T} = \langle m_{ii} \rangle u_{ii}, \quad (30.5)$$

где операция усреднения $\langle \dots \rangle$ определяется выражением (24.14).

Линеаризуя по ΔN оператор столкновений, получаем кинетическое уравнение в следующем виде:

$$\frac{\hbar\Omega}{T} N_0(N_0 + 1) M_{ii} \dot{u}_{ii} - \frac{\hbar\Omega}{T^2} N_0(N_0 + 1) \frac{\partial\Omega}{\partial k} \nabla T = \hat{J}y, \quad (30.6)$$

где мы ввели обозначение

$$M_{ii} = m_{ii} - \langle m_{ii} \rangle \quad (30.7)$$

и перешли, как и выше, от функции ΔN к функции $y = \Delta N/N_0(N_0 + 1)$.

Как обычно, убеждаемся сначала, что левая часть уравнения (30.6) ортогональна функции $\Omega_j(k)$ — собственной функции оператора \hat{J} , соответствующей нулевому собственному значению. Ортогональность второго слагаемого видна сразу же, если учесть, что оно — нечетная функция k , в то время как $\Omega_j(k)$ — четная функция. Ортогональность первого слагаемого является следствием тождества $\langle M_{ii} \rangle = 0$.

Мы здесь рассмотрим случай, когда концентрация дефектов в кристалле мала, так что основной механизм релаксации — это фонон-фононные столкновения¹⁾. Как было показано в § 9, оператор фонон-фононных столкновений \hat{J} сохраняет четность функции $y(k)$, на которую он действует. Это позволяет разделить уравнение (30.6) на два уравнения:

одно для нечетной части $y^-(k)$:

$$-\frac{\hbar\Omega}{T^2} N_0(N_0 + 1) \frac{\partial\Omega}{\partial k} \nabla T = \hat{J}y^-(k), \quad (30.8)$$

а другое — для четной части²⁾

$$\frac{\hbar\Omega}{T} N_0(N_0 + 1) M_{ii} \dot{u}_{ii} = \hat{J}y^+(k). \quad (30.9)$$

Уравнение (30.8) было изучено в главе II. В задаче о поглощении звука оно возникло в связи с неравновесностью, создаваемой переменными градиентами температуры, сопровождающими распространение звуковой волны в кристалле. Поскольку здесь оно описывает процесс теплопроводности, обусловленный нестационарным

¹⁾ Влияние рассеяния фононов дефектами на коэффициент вязкости кристалла будет рассмотрено в § 38.

²⁾ Очевидно, тензор m_{ii} , а значит и M_{ii} , есть четная функция k .

и пространственно-неоднородным градиентом температуры, нужно выяснить, не возникают ли дополнительные ограничения на пределы его применимости. При решении мы подставляли в левую часть кинетического уравнения равновесную функцию \tilde{N}_0 и пренебрегали членами, содержащими пространственную и временную производную от неравновесной добавки ΔN по сравнению с членом в правой части, $\hat{J}\Delta N$. Условия, когда такое пренебрежение возможно, легко указать при высоких температурах $T \gg \Theta$, когда $\hat{J}\Delta N$ есть по порядку величины $\Delta N/\tau$, а члены с пространственными и временными производными равны по порядку величины $\omega\Delta N$. В этом случае соответствующие условия сводятся к неравенству (28.24). Вопрос о том, как выглядит аналогичное условие при низких температурах, когда скорость фононной релаксации характеризуется двумя разными временами, будет разобран в § 32.

Далее, формула (27.30) для ΔT , а значит, и полученное с ее помощью значение ∇T основаны на предположении об адиабатичности деформации. Выясним условия его справедливости. В общем случае распределение температуры ΔT находится из уравнения теплопроводности

$$C\Delta\dot{T} + T\lambda_{ilmn}^{(T)}\alpha_{ii}\dot{u}_{mn} - \kappa_{ii}^{(T)}\left\{\frac{\partial^2\Delta T}{\partial r_i\partial r_l}\right\} = 0, \quad (30.10)$$

которое и дает соотношение (27.30), если в нем пренебречь последним членом. Его отношение к первому слагаемому есть $\kappa q^2/C\omega$. При высоких температурах по порядку величины $\kappa \approx C\tilde{v}^2\tau$, так что это отношение порядка $\omega\tau$, а условие его малости есть уже сформулированное неравенство (28.24). Как обстоит дело при низких температурах, мы опять-таки увидим в § 32.

Обратимся к решению уравнения (30.9) для функции $y^+(k)$. Как и в § 12, определим температуру неравновесной фононной системы из того условия, чтобы вклад от неравновесной добавки к функции распределения ΔN в плотность энергии был бы равен нулю

$$\int d\varepsilon_k \hbar\Omega \Delta N = 0.$$

Решение уравнения (30.9), удовлетворяющее этому

условно, можно записать в следующем виде:

$$\eta^+(\mathbf{k}) = \frac{\hbar}{T} \hat{J}^{-1} \Omega N_0 (N_0 + 1) M_{il} \dot{u}_{il}, \quad (30.11)$$

откуда для тензора коэффициентов вязкости получаем

$$\eta_{ilmn} = \frac{\hbar^2}{T} \int d\xi_k \Omega M_{il} N_0 (N_0 + 1) \hat{J}^{-1} \Omega M_{mn} N_0 (N_0 + 1). \quad (30.12)$$

Симметрия этого тензора относительно перестановки первой и второй пары значков следует непосредственно из симметричности оператора \hat{J}^{-1} .

В случае высоких температур $T \gg \Theta$ оператор $\hat{J}^{-1} N_0 (N_0 + 1)$ равен по порядку величины τ , откуда получается следующая оценка:

$$\eta \simeq TC\tau \simeq n\hbar \frac{\bar{M}\bar{v}^2}{\Theta}. \quad (30.13)$$

Это выражение от температуры не зависит. Такому поведению можно дать следующее физическое объяснение. Коэффициент внутреннего трения пропорционален как полной энергии фононов, так и их времени свободного пробега τ . Энергия фононов пропорциональна T (так как их равновесная функция распределения $N_0 = T/\hbar\Omega$) а время свободного пробега (10.8) обратно пропорционально T . Их произведение не зависит от T .

При низких температурах $T \ll \Theta$ мы можем оставить в правой части уравнения (30.9) только оператор нормальных процессов \hat{J}_N и пренебречь оператором \hat{J}_U . В отличие от уравнения (13.2), уравнение (30.9) в этом случае имеет решение, поскольку левая и правая его части суть четные функции \mathbf{k} ; умножая его на \mathbf{k} и интегрируя по d^3k , мы получаем слева и справа нуль. По этой причине оператор $\hat{J}^{-1} N_0 (N_0 + 1)$ в (30.12) равен по порядку величины τ_N . Отсюда

$$\eta \simeq TC\tau_N \simeq n\hbar \frac{\bar{M}\bar{v}^2}{T}, \quad (30.14)$$

т. е. коэффициент вязкости обратно пропорционален T .

Температурная зависимость этого выражения также допускает наглядное истолкование. Полная энергия фо-

нонной системы при низких температурах пропорциональна T^4 , тогда как $\tau_N \sim T^{-5}$; их произведение, следовательно, пропорционально T^{-1} .

С помощью (30.13) и (30.14) легко оценить коэффициент поглощения звука γ_η (А. И. Ахизер, 1938). С учетом (27.28) по порядку величины при $T \gg \Theta$

$$\frac{\gamma_\eta}{\omega} \simeq \frac{T}{M\bar{v}^2} \omega\tau, \quad (30.15)$$

а при $T \ll \Theta$

$$\frac{\gamma_\eta}{\omega} \simeq \frac{T}{M\bar{v}^2} \left(\frac{T}{\Theta}\right)^3 \omega\tau_N \simeq \frac{T^4}{\rho\bar{v}^5\hbar^3} \omega\tau_N. \quad (30.16)$$

При выводе выражений для η использовалось неравенство (28.24) (при $T \gg \Theta$) или (28.25) (при $T \ll \Theta$). Мы видим (с учетом этих неравенств), что отношение γ_η/ω мало как при высоких, так и в особенности при низких температурах. Тем самым мы оправдали использование метода последовательных приближений при выводе выражения (27.28) для γ_η .

Оценки отношения γ_κ/ω получаются аналогичным образом, только с использованием (27.32). При высоких температурах, когда теплопроводность по порядку величины определяется выражением (12.15), для отношения γ_κ/ω тоже оказывается справедливой оценка (30.15). Это естественно, поскольку при высоких температурах все релаксационные процессы характеризуются одним временем свободного пробега τ .

При низких температурах, воспользовавшись оценкой (13.21), мы получаем

$$\frac{\gamma_\kappa}{\omega} \simeq \frac{T}{M\bar{v}^2} \left(\frac{T}{\Theta}\right)^3 \omega\tau_U, \quad (30.17)$$

причем условие применимости этой формулы есть неравенство (28.26)¹⁾. Если оно выполнено, $\gamma_\kappa/\omega \ll 1$, и применимость метода последовательных приближений для расчета γ_κ также оказывается обоснованной. Поскольку,

¹⁾ Если, наряду с процессами переброса, заметную роль играет также и рассеяние фононов дефектами, то в оценочной формуле (30.17) время τ_U следует заменить временем τ_κ , введенным в § 14. Оценка (30.17) остается справедливой, пока $\tau_\kappa \gg \tau_N$.

с другой стороны, $\tau_U \gg \tau_N$, при низких температурах должно быть

$$\gamma_k \gg \gamma_n, \quad (30.18)$$

т. е. процессы теплопроводности дают более существенный вклад в поглощение звука, чем процессы вязкости.

Из сказанного следует вывод, что в тех кристаллографических направлениях, где существует разделение звуковых колебаний на продольные и поперечные, продольный звук при $T \ll \Theta$ и $\omega\tau_U \ll 1$ поглощается существенно сильнее поперечного.

§ 31. Особенности распространения звука в кристаллах при $\omega\tau_U \gg 1$

Уравнения фоновой гидродинамики, выведенные в главе II, справедливы в пренебрежении тепловым расширением тела. При учете теплового расширения возникают новые эффекты. Так, температурная волна (волна второго звука) сопровождается волной деформации. Наоборот, при распространении волны деформации, т. е. обычного звука, возникает температурная волна. Ее наличие, благодаря процессам теплопроводности, приводит, как мы видели, к специфическому теплопроводностному поглощению звука. В главе II была построена теория пространственной и временной дисперсии теплопроводности, причем мы видели, что, например, временная дисперсия начинает играть роль при частотах $\omega \simeq \tau_U^{-1}$. Очевидно, при таких частотах должна измениться частотная зависимость теплопроводностного коэффициента поглощения обычного звука.

Получим систему уравнений, с помощью которых можно было бы рассматривать эффекты такого типа¹⁾. В настоящем разделе мы исследуем эти уравнения без диссипативных членов, учитывающих влияние нормальных процессов, а примем во внимание только диссипацию, обусловленную процессами переброса. Диссипация за счет нормальных процессов будет учтена в § 32.

¹⁾ В §§ 31, 32 излагаются результаты, полученные В. Л. Гуревичем в А. Л. Эфросом (1966).

Интересующая нас система включает уравнение, выражающее закон сохранения энергии:

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \operatorname{div} Q = 0 \quad (31.1)$$

и уравнение, описывающее перенос и диссипацию квазиимпульса, обусловленную процессами переброса:

$$\frac{\partial P_i}{\partial t} + S \frac{\partial T}{\partial r_i} + D_{il} P_l = 0. \quad (31.2)$$

К ним необходимо добавить уравнения движения упругой сплошной среды

$$\rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} = \frac{\partial \sigma_{il}}{\partial r_l}. \quad (31.3)$$

Совокупность термодинамических переменных, описывающих рассматриваемое состояние неполного равновесия, теперь включает, помимо температуры T и дрейфовой скорости V , также и тензор деформации u_{il} . Укажем, как следует дополнить термодинамическое описание (по сравнению с состоянием неполного равновесия недеформированной среды, рассмотренным в § 15), чтобы учесть это.

Дифференциал плотности свободной энергии запишется в виде

$$dF = -S dT + V dP + \sigma_{il}^{(0)} du_{il}. \quad (31.4)$$

Отсюда тензор упругих напряжений в отсутствие диссипации

$$\sigma_{il}^{(0)} = \left(\frac{\partial F}{\partial u_{il}} \right)_{T,P}. \quad (31.5)$$

Выражение для плотности свободной энергии деформированного тела имеет вид

$$F = F_0(T, V) + \frac{1}{2} \lambda_{ilmn}^{(T)} u_{il} u_{mn} - \lambda_{ilmn}^{(T)} \alpha_{il} u_{mn} \Delta T. \quad (31.6)$$

Свободную энергию в отсутствие деформации теперь следует считать функцией T и дрейфовой скорости $V = \mathbf{p}^{-1} \mathbf{P}$ (см. (15.25)). Перекрестные члены, содержащие произведение дрейфовой скорости и тензора деформации, в (31.6) отсутствуют: плотность свободной энергии должна быть инвариантна относительно обращения времени,

тогда как такие члены при обращении времени изменили бы знак.

Вычисляя $\sigma_{il}^{(0)}$, согласно (31.5) и (31.6), мы получаем известное выражение

$$\sigma_{il}^{(0)} = \lambda_{ilmn}^{(T)} u_{mn} - \lambda_{ilmn}^{(T)} \alpha_{il} \Delta T.$$

Подставляя его в (31.3), получаем обычные уравнения теории упругости при учете теплового расширения

$$\rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} = \lambda_{ilmn}^{(T)} \frac{\partial u_{mn}}{\partial r_l} - \lambda_{ilmn}^{(T)} \alpha_{mn} \frac{\partial T}{\partial r_l}. \quad (31.7)$$

Чтобы вычислить производную $\partial U / \partial t$, фигурирующую в уравнении (31.1), воспользуемся выражением для dU , которое получается дописыванием слагаемого $\sigma_{il}^{(0)} du_{il}$ к (15.11):

$$dU = T dS + V dP + \sigma_{il}^{(0)} du_{il}. \quad (31.8)$$

Ограничиваясь линейным приближением по амплитуде звука, мы при вычислении производной по времени отбрасываем слагаемые $V \dot{P}$ и $\sigma_{il}^{(0)} \dot{u}_{il}$ как величины второго порядка и получаем

$$\frac{\partial U}{\partial t} = T \frac{\partial S}{\partial t}.$$

Плотность энтропии S получается дифференцированием выражения (31.6):

$$S = - \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_{P, u_{il}} = S_0(T, V) + \lambda_{ilmn}^{(T)} \alpha_{il} u_{mn}. \quad (31.9)$$

Отсюда

$$\frac{\partial S}{\partial t} = \frac{\partial S_0}{\partial t} + \lambda_{ilmn}^{(T)} \alpha_{il} \dot{u}_{mn} = C \frac{\partial T}{\partial t} + \lambda_{ilmn}^{(T)} \alpha_{il} \dot{u}_{mn}$$

(член с $\partial V / \partial t$ здесь писать не надо, так как разложение S_0 по степеням V начинается с квадратичного члена). В итоге из (31.1) получается следующее уравнение:

$$C \frac{\partial T}{\partial t} + T \lambda_{ilmn}^{(T)} \alpha_{il} \dot{u}_{mn} + \operatorname{div} Q = 0 \quad (31.10)$$

(C теперь обозначает удельную теплоемкость при постоянной деформации и $V = 0$).

Если положить $Q = -\kappa \nabla T$, то уравнения (31.7) и (31.10) образуют вместе с этим соотношением замкнутую систему, рассмотренную в § 30. Однако в общем случае такая связь между Q и ∇T не имеет места, а (в пренебрежении диссипацией, обусловленной нормальными процессами) заменяется дифференциальным уравнением (31.2) и соотношениями (15.12) и (13.19). Они, как мы видели в § 16, описывают дисперсию теплопроводности. Мы сейчас с помощью этой системы уравнений рассмотрим связанные колебания второго звука и обычного звука (который мы иногда будем называть просто первым звуком).

Рассмотрим случай простейшей геометрии: звуковые колебания распространяются вдоль оси симметрии третьего или более высокого порядка (ось x). Первый звук будем считать продольным: поперечный звук не вызывает периодических изменений температуры, поэтому он не взаимодействует со вторым звуком.

Будем считать, что $\omega \gg 1/\tau_\sigma$ и пренебрежем вообще диссипативными процессами, т. е. не будем учитывать затухания звука. Тогда полная система уравнений задачи состоит, соответственно, из уравнения теории упругости, уравнений, выражающих законы сохранения энергии и квазиимпульса и соотношения, связывающего P и V :

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} &= \lambda^{(T)} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \lambda^{(T)} \alpha \frac{\partial T}{\partial x}, \\ C \frac{\partial T}{\partial t} + T \lambda^{(T)} \alpha \frac{\partial^2 u}{\partial t \partial x} + T S \frac{\partial V}{\partial x} &= 0, \\ \frac{\partial P}{\partial t} + S \frac{\partial T}{\partial x} &= 0, \\ P &= \nu V. \end{aligned} \quad (31.11)$$

Здесь мы опустили индексы x у фигурирующих в задаче тензоров и ввели обозначение

$$\lambda^{(T)} \alpha = \lambda_{xxmn}^{(T)} \alpha_{mn}.$$

Считая переменные величины пропорциональными $\exp[i(qx - \omega t)]$, полагая $\omega = Wq$ и приравнявая определитель системы нулю, получаем дисперсионное уравнение

$$W^4 - W^2 \left(\frac{\lambda^{(T)}}{\rho} + \frac{TS^2}{\nu C} + \frac{(\lambda^{(T)} \alpha)^2 T}{\rho C} \right) + \frac{\lambda^{(T)} TS^2}{\rho \nu C} = 0.$$

В силу общего соотношения (2.10)

$$\lambda^{(T)} + \frac{T}{C} (\lambda^{(T)} \alpha)^2 = \lambda, \quad (31.12)$$

где $\lambda = \lambda_{xxxx}$ есть соответствующий адиабатический модуль упругости. С учетом (31.12), дисперсионное уравнение переписывается так¹⁾:

$$W^4 - W^2 \left(\frac{\lambda}{\rho} + \frac{TS^2}{\rho C} \right) + \frac{\lambda^{(T)} TS^2}{\rho \rho C} = 0. \quad (31.13)$$

Если пренебречь тепловым расширением, т. е. считать, что $\lambda^{(T)} = \lambda$, то, как видно из дисперсионного уравнения, обычный и второй звуки не взаимодействуют.

Уравнение (31.13) можно переписать в следующем более компактном виде:

$$W^4 - W^2 (v^2 + w_{II}^2) + (v^2 - 2v \Delta w) w_{II}^2 = 0. \quad (31.14)$$

Здесь $v = \sqrt{\lambda/\rho}$, $w_{II} = S \sqrt{T/\rho C}$ — соответственно, скорости первого и второго звуков в пренебрежении их взаимодействием,

$$\Delta w^2 = \frac{T}{C\rho} (\lambda^{(T)} \alpha)^2 \quad (31.15)$$

— разность квадратов адиабатической и изотермической скоростей первого звука. Поскольку обычно в твердых телах эта разность мала по сравнению с самими скоростями, ее можно переписать в виде

$$\Delta w^2 = 2v \Delta w,$$

где Δw — разность между первыми степенями этих скоростей.

Если скорости первого и второго звуков различаются достаточно сильно, так что имеет место неравенство

$$\left| \frac{\Delta w}{v - w_{II}} \right| \ll 1, \quad (31.16)$$

¹⁾ Дисперсионное уравнение типа (31.13) было впервые получено Л. Д. Ландау (1941) при изучении взаимодействия первого и второго звука в гелии II. Ландау рассмотрел более общий случай по сравнению с изученным здесь: уравнение (31.13) получено в первом приближении по параметру ν/ρ , который в твердых телах практически всегда мал, в то время как соответствующее уравнение для гелия II выведено без этого предположения.

то можно получить приближенное решение дисперсионного уравнения (31.13) и тем самым определить поправки к скоростям первого и второго звуков, обусловленные их взаимодействием. Эти скорости, которые мы обозначим, соответственно, W_I и W_{II} , равны

$$W_I^2 = v^2 + \frac{\Delta w^2 w_{II}^2}{v^2 - w_{II}^2}, \quad W_{II}^2 = w_{II}^2 - \frac{\Delta w^2 w_{II}^2}{v^2 - w_{II}^2}. \quad (31.17)$$

Поскольку разность Δw^2 положительна, скорость обычного звука при $\omega \tau_\nu \gg 1$ оказывается меньше, чем при $\omega \tau_\nu \ll 1$, если только $v^2 < w_{II}^2$. При $v^2 > w_{II}^2$ соотношение между высокочастотной и низкочастотной скоростями обратное.

Физическая причина такого поведения скорости звука заключается в следующем. При $\omega \tau_\nu \ll 1$ деформация, создаваемая звуковой волной, является в первом приближении адиабатической, и при распространении звука в диэлектрике возникает распределение температуры, зависимость которого от пространственных координат и от времени повторяет зависимость деформации. Благодаря явлению теплового расширения возникает добавочная жесткость диэлектрика. Формально она проявляется в том, что в уравнениях теории упругости вместо изотермических модулей фигурируют адиабатические. Соответственно, адиабатическая скорость звука оказывается больше изотермической.

При $\omega \tau_\nu \gg 1$ в диэлектрике, как мы видели, может происходить обратимый перенос тепла. При $v < w_{II}$ он в значительной мере выравнивает температуру между разными частками кристалла. Это уменьшает дополнительную жесткость, так что скорость звука W_I оказывается меньше адиабатической скорости v .

При $\omega \tau_\nu \gg 1$ и $v > w_{II}$ переменная составляющая температуры смещена по фазе на π по сравнению с распределением температуры при $\omega \tau_\nu \ll 1$, обусловливающим отличие адиабатических модулей от изотермических. Соответственно, скорость первого звука оказывается в этом случае больше адиабатической скорости.

Аналогичным образом можно объяснить и изменение скорости распространения температурной волны II звука — за счет ее взаимодействия с деформацией.

§ 32. Дисперсия коэффициента поглощения звука

Для того чтобы определить поглощение, нужно дополнить систему связанных уравнений фоновой гидродинамики и теории упругости § 31 диссипативными членами. Для учета диссипации, связанной с нормальными процессами, во-первых, нужно заменить соотношение $Q = TSV$ уравнением (16.6), во-вторых, нужно добавить диссипативные члены к тензорам F_{il} и σ_{il} :

$$F'_{il} = v_{ilmn} \frac{\partial V_m}{\partial r_n} + \mu'_{ilmn} \dot{u}_{mn}, \quad (32.1)$$

$$\sigma'_{il} = \eta_{ilmn} \dot{u}_{mn} + \mu_{ilmn} \frac{\partial V_m}{\partial r_n}. \quad (32.2)$$

Здесь η_{ilmn} — обычный тензор коэффициентов вязкости, определенный в § 27. Тензор v_{ilmn} был определен в § 16. Тензоры μ и μ' описывают «перекрестную» вязкость.

Дадим макроскопический вывод закона возрастания энтропии для рассматриваемой системы. Получив его, мы сможем, в частности, установить симметрию тензоров кинетических коэффициентов μ и μ' . При выводе придется пользоваться термодинамическими соотношениями, которые являются комбинацией соотношений фоновой гидродинамики (§ 15) и теории упругости (§ 27).

Дифференциал плотности внутренней энергии имеет теперь вид (31.8). Вычислим с помощью этого выражения производную по времени от энтропии

$$\dot{\mathcal{P}} = \int \left(\frac{1}{T} \dot{U} - \frac{1}{T} \sigma'_{il} \dot{u}_{il} - \frac{1}{T} VP \right) d^3r. \quad (32.3)$$

Преобразуем это выражение, комбинируя те приемы, которые уже использовались в § 16 при выводе (16.9) или (16.11) и в § 27 при выводе (27.20). Ниже мы кратко опишем соответствующие преобразования.

Плотность внутренней энергии U следует представить в виде разности плотностей полной энергии E и кинетической энергии $\rho u^2/2$. Величина $\dot{E} = -\text{div } G$, где для G остается справедливым соотношение (27.18). Член $(1/T) \text{div } Q$ преобразуется путем интегрирования по частям к виду $\text{div}(Q/T) + Q \nabla T/T^2$. Интеграл от первого слагаемого преобразуется в поверхностный, который в отсутствие потока тепла через поверхность считается рав-

ным нулю; во второе слагаемое мы можем подставить выражение (16.6) для Q , даваемое линейной теорией.

Для $G^{(s)}$ остается справедливой общая формула (27.13), куда в качестве σ'_{il} нужно подставить выражение (32.2). Вместо \dot{P} следует подставить правую часть (16.8), причем в качестве F'_{il} нужно использовать выражение (32.1).

В итоге мы получаем

$$\dot{\mathcal{P}} = \int d^3r \left[-\frac{1}{T^2} (Q_i - TSV_i) \frac{\partial T}{\partial r_i} + \frac{1}{T} F'_{il} \frac{\partial V_i}{\partial r_l} + S^2 \kappa_{il}^{-1} V_i V_l + \frac{1}{T} \sigma'_{il} \dot{u}_{il} \right]. \quad (32.4)$$

Выбирая в качестве величин x_a в соотношениях (11.25) переменные $Q_i - TSV_i$, F'_{il} , V_i и σ'_{il} , мы должны приписать роль обобщенных сил X_a величинам $-\partial T^{-1}/\partial r_i$, $-T^{-1} \partial V_i/\partial r_l$, $-S^2 \kappa_{il}^{-1} V_l$ и $-T^{-1} \dot{u}_{il}$. Коэффициенты в линейных соотношениях, связывающих эти две группы величин, должны удовлетворять, помимо (42.2), (16.10) и (27.21), еще и соотношению

$$\mu_{ilmn} = \mu'_{mnil}. \quad (32.5)$$

Оно показывает, что из двух тензоров, описывающих перекрестную вязкость, независим только один.

Выражение (32.4) для $\dot{\mathcal{P}}$ полезно переписать также и в ином виде, удобном для непосредственного расчета диссипации энергии. Для этого подставим в (32.4) выражение (16.6) для Q и выражения (32.1) и (32.2) для F'_{il} и σ'_{il} и примем во внимание соотношение (32.5). В результате мы получим

$$\dot{\mathcal{P}} = \int d^3r \left(\frac{1}{T^2} \chi_{il} \frac{\partial T}{\partial r_i} \frac{\partial T}{\partial r_l} + \frac{1}{T} v_{ilmn} \frac{\partial V_i}{\partial r_l} \frac{\partial V_m}{\partial r_n} + 2 \frac{1}{T} \mu_{ilmn} \dot{u}_{il} \frac{\partial V_m}{\partial r_n} + \frac{1}{T} \eta_{ilmn} \dot{u}_{il} \dot{u}_{mn} + S^2 \kappa_{il}^{-1} V_i V_l \right). \quad (32.6)$$

Выпишем полную систему связанных линейных уравнений фононной гидродинамики и теории упругости

$$\frac{\partial P_l}{\partial t} + S \frac{\partial T}{\partial r_l} - \nu_{ilmn} \frac{\partial^2 V_m}{\partial r_i \partial r_n} - \mu_{mnl} \frac{\partial \dot{u}_{mn}}{\partial r_i} + TS^2 \kappa_l^{-1} V_i = 0,$$

$$C \frac{\partial T}{\partial t} + T \lambda_{ilmn}^{(T)} \alpha_{il} \dot{u}_{mn} + \text{div } Q = 0,$$

$$Q_l = T S V_l - \chi_{lm} \frac{\partial T}{\partial r_m}, \quad (32.7)$$

$$P_l = \eta_{lm} V_m,$$

$$\rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} = \lambda_{ilmn}^{(T)} \frac{\partial u_{mn}}{\partial r_l} - \lambda_{ilmn}^{(T)} \alpha_{mn} \frac{\partial T}{\partial r_l} + \eta_{ilmn} \frac{\partial \dot{u}_{mn}}{\partial r_l} + \mu_{ilmn} \frac{\partial^2 V_m}{\partial r_l \partial r_n}.$$

Дадим порядковую оценку коэффициентов перекрестной вязкости μ_{ilmn} . Для этого нужно решить кинетическое уравнение $\psi^+ = -\hat{J}_N y$, где ψ^+ определяется формулой (17.10), и решение подставить в выражение (28.27), с помощью которого можно вычислить тензор σ'_{il} , если известна неравновесная добавка к фононной функции распределения. Это дает

$$\mu_{ilmn} = \frac{1}{T} \int d\xi_k N_0 (N_0 + 1) M_{il} \hbar \Omega \times \times \hat{J}_N^{-1} \left(\hbar k_m \frac{\partial \Omega}{\partial k_n} - \delta_{mn} \hbar \Omega \frac{S}{C} \right) N_0 (N_0 + 1). \quad (32.8)$$

Порядковая оценка, которая получается, если оператор $\hat{J}_N^{-1} N_0 (N_0 + 1)$ заменить по порядку величины временем релаксации для нормальных процессов, имеет вид

$$\mu \simeq n \left(\frac{T}{\Theta} \right)^3 T \tau_N \simeq n \hbar \frac{\bar{M} v^2}{T}. \quad (32.9)$$

Таким образом, при низких температурах ($T \ll \Theta$), когда только и могут иметь смысл уравнения фононной гидродинамики, тензоры η и μ оказываются одного порядка.

Выше (§ 27) было показано, что полный коэффициент поглощения звука γ есть сумма вязкостного коэффициента поглощения, γ_η , и теплопроводностного, γ_κ ,

причем оба они пропорциональны ω^2 . При этом при низких температурах следствием соотношения $\tau_N \ll \tau_V$ является неравенство $\gamma_\eta \ll \gamma_\kappa$ (предполагается, естественно, что звук имеет такое направление распространения и поляризацию, что коэффициент γ_κ отличен от нуля).

Однако проделанный расчет коэффициента γ_κ применим, лишь пока $\omega \ll \tau_V^{-1}$, т. е. при столь низких частотах ω , когда еще не началась временная дисперсия теплопроводности. В настоящем разделе с помощью системы уравнений (32.7) мы вычислим коэффициент поглощения в значительно более широкой области частот, ограниченной сверху лишь условием $\omega \ll \tau_N^{-1}$.

Рассмотрим, как и выше (§ 31), продольный звук, распространяющийся вдоль оси симметрии кристалла порядка не ниже третьего (ось x). Начнем с анализа теплопроводностного поглощения, т. е. поглощения, обусловленного процессами переброса (или вообще процессами, не сохраняющими квазимпульс).

Отбросим в исходной системе уравнений (32.7) слагаемые, пропорциональные кинетическим коэффициентам ν , μ , χ и η . Решение оставшейся системы ищем в виде плоской волны, в которой все переменные величины пропорциональны $\exp[i(qx - \omega t)]$. Приравнявая нулю определитель соответствующей системы алгебраических уравнений, получаем дисперсионное уравнение

$$(\omega^2 - v^2 q^2) \left(\omega^2 - \frac{w_{II}^2 q^2}{1 + i/\omega \tau_\kappa} \right) = \frac{\Delta w^2 w_{II}^2 q^4}{1 + i/\omega \tau_\kappa}, \quad (32.10)$$

где τ_κ определяется соотношением (16.4).

В первом приближении по малому параметру, пропорциональному правой части (32.10), решение этого уравнения есть

$$W_I = v + \Delta w \frac{w_{II}^2}{v^2} \frac{(1 - w_{II}^2/v^2) \omega^2 \tau_\kappa^2}{1 + (1 - w_{II}^2/v^2)^2 \omega^2 \tau_\kappa^2}, \quad (32.11)$$

$$\gamma_\kappa = \frac{2\Delta w}{v} \frac{w_{II}^2}{v^2} \frac{\omega^2 \tau_\kappa^2}{1 + (1 - w_{II}^2/v^2)^2 \omega^2 \tau_\kappa^2}. \quad (32.12)$$

Частотной зависимости этих выражений можно дать следующее физическое объяснение. При $\omega \ll 1/\tau_\kappa$ дисперсия теплопроводности роли не играет, и формула (32.12)

переходит в уже известное выражение (27.32). Поправка к скорости звука v оказывается порядка $\omega^2 \tau_{\kappa}^2 \Delta w$.

При $\omega \tau_{\kappa} \approx 1$ эта поправка становится порядка Δw , а коэффициент γ_{κ} перестает расти с частотой пропорционально ω^2 . При $\omega \tau_{\kappa} \gg 1$, разлагая $\kappa(\omega)$ (16.3) по степеням малого параметра $1/\omega \tau_{\kappa}$, мы получаем

$$\kappa(\omega) = \frac{i\kappa}{\omega \tau_{\kappa}} + \frac{\kappa}{\omega^2 \tau_{\kappa}^2}.$$

Вещественная часть теплопроводности убывает с ростом частоты обратно пропорционально ω^2 ; соответственно, коэффициент γ_{κ} перестает зависеть от ω . Скорость звука при этом стремится к предельному значению (31.17).

При дальнейшем возрастании частоты ω начинает играть роль релаксация, обусловленная нормальными процессами. Она описывается членами в системе (32.7), которые мы отбросили при вычислении выражений (32.11) и (32.12) и которые нам теперь предстоит учесть. Все эти члены дают вклад в коэффициент поглощения, пропорциональный времени τ_N ; для этого вклада мы введем обозначение γ_N . Он пропорционален ω^2 при всех частотах, которые много меньше τ_N^{-1} . Это значит, что при достаточно высоких частотах роль коэффициента γ_N становится преобладающей, поскольку при $\omega \tau_{\kappa} \gg 1$ коэффициент γ_{κ} перестает расти с частотой.

Для вычисления γ_N удобно воспользоваться выражением (32.6), которое для продольного звука, распространяющегося вдоль оси x , запишется в виде (тензорный значок x у всех величин опускаем)

$$\begin{aligned} \dot{\mathcal{P}} = \int d^3r \left[\frac{1}{T^2} \kappa \left(\frac{\partial T}{\partial x} \right)^2 + \frac{v}{T} \left(\frac{\partial V}{\partial x} \right)^2 + 2 \frac{\mu}{T} \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial V}{\partial x} + \right. \\ \left. + \frac{\eta}{T} \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + \frac{S^2}{\kappa} V^2 \right]. \end{aligned} \quad (32.13)$$

Квадратичная форма, составленная из величин $\partial V/\partial x$ и $\partial u/\partial x$, должна, очевидно, удовлетворять условию существенной положительности, которое требует выполнения следующих неравенств:

$$v > 0, \quad \eta > 0, \quad \sqrt{v\eta} > \mu. \quad (32.14)$$

Вклад в коэффициент γ_N дают первые четыре слагаемых в подынтегральном выражении; пятое определяет коэффициент γ_{κ} , уже вычисленный. В соответствии со сказанным, нам достаточно при вычислении γ_N рассмотреть случай $\omega \tau_{\kappa} \gg 1$. Для расчета используем метод последовательных приближений, развитый в § 27. Считаем в нулевом приближении волну не затухающей и имеющей вид (27.25). Зависимость дрейфовой скорости V и переменной добавки к температуре ΔT от упругого смещения определяется из второго и третьего уравнений системы (31.11) и имеет вид

$$V = \omega \frac{q^2 w_{II}^2}{\omega^2 - w_{II}^2 q^2} \frac{\lambda^{(T)} \alpha}{S} u_0 \sin(qx - \omega t), \quad (32.15)$$

$$\Delta T = \frac{\omega^2}{\omega^2 - w_{II}^2 q^2} \frac{T}{C} \lambda^{(T)} \alpha q u_0 \sin(qx - \omega t). \quad (32.16)$$

Подставляя (32.15) и (32.16) в (32.13), усредняя по периоду и поделив на $\mathcal{V} \rho u_0^2 \omega^2 / 2$, мы получаем

$$\begin{aligned} \gamma_N = \kappa \frac{v^4}{(v^2 - w_{II}^2)^2} \frac{\Delta w^2}{v^2} \frac{\omega^2}{C v^2} + v \frac{w_{II}^4}{(v^2 - w_{II}^2)^2} \frac{\Delta w^2}{v^2} \frac{C \omega^2}{T S^2} + \\ + 2\mu \frac{w_{II}^2}{v^2 - w_{II}^2} \frac{\lambda^{(T)} \alpha \omega^2}{S} \frac{1}{\rho v^2} + \frac{\eta \omega^2}{\rho v^2}. \end{aligned} \quad (32.17)$$

Воспользовавшись порядковыми оценками коэффициентов κ , v , μ и η , которые даются, соответственно, формулами (17.24), (17.19), (32.9) и (30.14), мы получаем для коэффициента поглощения γ_N оценку

$$\gamma_N \simeq \frac{T}{M v^2} \left(\frac{T}{\Theta} \right)^3 \omega^2 \tau_N \simeq \frac{T^4}{\rho \hbar^3 v^5} \omega^2 \tau_N, \quad (32.18)$$

совпадающую с (30.16). Чтобы сравнить коэффициенты γ_N и γ_{κ} , запишем порядковую оценку для последнего

$$\gamma_{\kappa} \simeq \frac{T}{M v^2} \left(\frac{T}{\Theta} \right)^3 \frac{\omega^2 \tau_{\kappa}}{1 + (\omega \tau_{\kappa})^2} \simeq \frac{T^4}{\rho \hbar^3 v^5} \frac{\omega^2 \tau_{\kappa}}{1 + (\omega \tau_{\kappa})^2}. \quad (32.19)$$

Здесь мы учли, что отношение $\Delta w/v$ равно по порядку величины (28.31), а скорость Π звука w_{II} порядка v .

Выражения (32.18) и (32.19) сравниваются по порядку величины при частоте

$$\omega \simeq 1/\sqrt{\tau_N \tau_*}. \quad (32.20)$$

При меньших частотах в суммарном коэффициенте поглощения $\gamma = \gamma_* + \gamma_N$ преобладает первое слагаемое, а при больших — второе, и коэффициент поглощения с увеличением частоты снова начинает возрастать пропорционально ω^2 . Такое возрастание продолжается вплоть до частот порядка $1/\tau_N$, при которых макроскопическая теория теряет применимость.

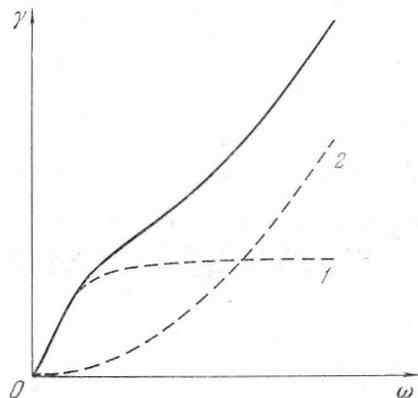


Рис. 7.

Зависимость коэффициента поглощения от частоты во всем рассмотренном частотном интервале схематически изображена на рис. 7.

Частотная зависимость

суммарного коэффициента поглощения показана сплошной кривой. Пунктирные кривые 1 и 2 представляют, соответственно, вклады коэффициентов γ_* и γ_N . На рисунке видно, что первый вклад преобладает в области низких частот, а второй — в области высоких.

§ 33. Поглощение высокочастотного звука в кристаллах

Переходим к рассмотрению поглощения высокочастотного звука, частота которого ω удовлетворяет неравенству

$$\omega \tau \gg 1. \quad (33.1)$$

Под τ при $T \ll \Theta$ мы будем понимать время τ_N .

Неравенство (33.1) означает, что энергия звукового кванта $\hbar\omega$ существенно превышает квантовую неопределенность \hbar/τ энергии тепловых фононов. Тогда поглощение звука можно рассматривать как последовательность элементарных актов поглощения ультразвуковых квантов

фононами достаточно большой частоты. В каждом элементарном акте выполняются законы сохранения энергии и квазиимпульса фононов

$$\omega_a(\mathbf{q}) + \Omega_j(\mathbf{k}) = \Omega_{j'}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) = \Omega_{j'}(\mathbf{k}'). \quad (33.2)$$

Индекс a (который мы часто будем опускать) обозначает номер акустической ветви, поглощение фононов которой мы изучаем.

Мы будем все же считать поглощаемый звук достаточно длинноволновым, так что для характерных значений k выполняется неравенство

$$q \ll k. \quad (33.3)$$

(При $T \geq \Theta$ оно позволяет, в частности, пренебречь вкладом от процессов переброса в поглощение, малым по параметру q/k .)

В первую очередь нас будут интересовать случаи, когда коэффициент поглощения достаточно велик. Для этого, очевидно, основную роль в поглощении должны играть тепловые фононы, у которых при $T \ll \Theta$ волновой вектор k порядка $k_T = T/\hbar v$, а при $T \gg \Theta$ порядка предельного волнового вектора k_0 ¹⁾. Соответственно, в первом случае неравенство (33.3) можно переписать в виде

$$\hbar\omega \ll T, \quad (33.4a)$$

а во втором случае — в виде

$$\hbar\omega \ll \Theta. \quad (33.4b)$$

Эти неравенства имеют наглядный физический смысл: энергия звукового кванта должна быть гораздо меньше энергии тепловых фононов.

Кроме процессов (33.2) возможны также процессы иного типа, в которых длинноволновый фонон (\mathbf{q}, a) распадается на два длинноволновых же фонона. Для распадных процессов законы сохранения энергии и квазиимпульса дают

$$\omega_a(\mathbf{q}) = \Omega_{a'}(\mathbf{k}) + \Omega_{a''}(\mathbf{q} - \mathbf{k}). \quad (33.5)$$

Вклад распадных процессов в поглощение будет исследо-

¹⁾ Нужно, впрочем, иметь в виду, что при $T \gg \Theta$ неравенству (33.1) удовлетворить на опыте трудно, так как оно требует весьма высоких ультразвуковых частот.

ван в § 34¹⁾. Здесь же мы ограничимся замечанием, что распадные процессы должны давать заведомо меньше по сравнению с процессами присоединения (33.2) (если, разумеется, последние разрешены законами сохранения). Действительно, частоты всех фононов, участвующих в распадном процессе, малы. Поэтому мала и соответствующая вероятность: во-первых, как явствует из формул (6.13) и (6.15), она пропорциональна произведению всех трех акустических фононных частот, фигурирующих в (33.5). Во-вторых, при вычислении полной вероятности поглощения фонона (q, a) надо проинтегрировать по всем волновым векторам k фононов, образующихся при распаде. Величина объема в k -пространстве (фазового объема), по которому производится интегрирование, также мала: она имеет порядок q^3 .

В качестве исходного выражения для расчета главного вклада в поглощение от процессов присоединения (33.2) воспользуемся (27.23). Обозначим через $N^{(s)} = \mathcal{E}^{(s)}/\hbar\omega$ число акустических квантов в объеме \mathcal{V} . Звуковая механическая энергия, поглощаемая в единицу времени, равна

$$\begin{aligned} \dot{\mathcal{E}}^{(s)} &= \hbar\omega \left[\frac{\partial N^{(s)}}{\partial t} \right]_{\text{ст}} = \hbar\omega \sum_{j'} \int d\xi_k \beta_{ajj'}(q, k, -k') \times \\ &\times [N'(N+1)(N^{(s)}+1) - (N'+1)NN^{(s)}] \delta(\omega + \Omega - \Omega'). \end{aligned} \quad (33.6)$$

Сохраним в квадратных скобках только член, пропорциональный большому числу $N^{(s)}$. В первом приближении по малому параметру $\hbar\omega/T$ он запишется в виде

$$N^{(s)}(N' - N) = -N^{(s)}N_0(N_0 + 1) \frac{\hbar\omega}{T}.$$

Подставляя это выражение в (33.6) и поделив то, что получилось, на энергию звука в объеме \mathcal{V} , равную $\hbar\omega N^{(s)}$, мы получим для коэффициента поглощения

$$\gamma = \frac{\hbar\omega}{T} \int d\xi_k \sum_{j'} \beta_{ajj'} N_0(N_0 + 1) \delta(\omega + \Omega - \Omega'). \quad (33.7)$$

¹⁾ Оценки (34.31) и (34.32), проделанные в § 34 для изотропного фононного спектра, фактически сохраняют смысл для любого спектра, допускающего распад фонона на два фонона.

Поглощение получается отличным от нуля, если обращается в нуль аргумент δ -функции, т. е. если выполняется закон сохранения (33.2). Если закон сохранения выполняется при $j = j'$, т. е. в пределах одной ветви тепловых фононов, то такие переходы дают больший вклад в поглощение, чем переходы с $j \neq j'$, т. е. между различными ветвями¹⁾, поэтому в настоящем разделе мы рассмотрим случай $j = j'$.

Аргумент δ -функции в интеграле (33.7) при $j = j'$ равен

$$\begin{aligned} \omega(q) + \Omega_j(k) - \Omega_j(k') &= \\ &= \omega(q) + \Omega_j(k) - \Omega_j(k+q) = v_a q - g_j q. \end{aligned}$$

Здесь мы разложили $\Omega_j(k+q)$ по малому вектору q ; v_a — это фазовая скорость акустической ветви a , $g_j = \partial\Omega_j/\partial k$ — групповая скорость фононов ветви j . Обозначая через θ угол между векторами q и g_j , мы можем переписать (33.7) как

$$\gamma = \frac{\hbar\omega}{v_a T q} \int d\xi_k \beta_{ajj} N_0(N_0 + 1) \delta\left(1 - \frac{g_j}{v_a} \cos\theta\right). \quad (33.8)$$

Здесь интеграл отличен от нуля, если хотя бы для некоторых ветвей j и направлений волнового вектора k выполняется неравенство

$$g_j > v_a. \quad (33.9)$$

Считая, что оно выполнено, мы можем немедленно определить частотную зависимость γ . Достаточно заметить, что на основании (6.17) вместе с (6.11)–(6.13) можно написать

$$\beta_{ajj} = qa\beta^{(1)}(k), \quad (33.10)$$

где $\beta^{(1)}$ не зависит от абсолютной величины вектора q , а зависит только от его направления. Тогда из (33.8) и (33.10) явствует, что при условии (33.1) коэффициент γ есть линейная функция ω при любых температурах.

¹⁾ В справедливости этого утверждения мы сможем убедиться, сравнив результаты (33.11) и (33.13), которые мы сейчас получим, с оценками (35.9)–(35.14) коэффициента поглощения звука за счет переходов с $j \neq j'$.

При высоких температурах ($T \gg \Theta$) в интеграл (33.8) дают основной вклад значения k порядка предельных¹⁾. При таких k справедлива оценка, полученная с помощью (6.11): $\beta^{(1)} \simeq \hbar v / \rho a^3$, и коэффициент поглощения

$$\gamma \simeq \frac{\omega T \Theta^3}{\rho \hbar^3 v^5}. \quad (33.11)$$

Чтобы найти температурную зависимость коэффициента γ при $T \ll \Theta$, учтем, что при $k \ll a^{-1}$ функция $\beta^{(1)}(k)$ имеет, согласно (6.13), следующий вид:

$$\beta^{(1)}(k) \simeq (\bar{a}k)^2 \beta^{(0)}. \quad (33.12)$$

Здесь $\beta^{(0)} \simeq \hbar \bar{v} / \rho \bar{a}^3$ зависит только от ориентации векторов k и q относительно кристаллографических осей и их взаимной ориентации. Подставляя (33.12) в (33.8), мы приходим к оценке, справедливой при $T \ll \Theta$ ²⁾:

$$\gamma \simeq \frac{\omega T^4}{\rho \hbar^3 v^5}. \quad (33.13)$$

Таким образом, при низких температурах коэффициент поглощения пропорционален T^4 .

Заметим, что и при высоких, и при низких температурах коэффициент γ удовлетворяет неравенству

$$\gamma / \omega \ll 1. \quad (33.14)$$

Действительно, при $T \gg \Theta$ отношение γ / ω есть параметр ангармонизма $T / \bar{M} v^2$; при $T \ll \Theta$ γ / ω равно этому малому параметру, умноженному на малую же величину $(T / \Theta)^3$.

§ 34. Поглощение продольного звука в упруго изотропной среде

Вопрос о поглощении продольного звука в упруго изотропной среде представляет принципиальный интерес с точки зрения теории кинетических явлений. Это есть

¹⁾ В принципе в интеграл (33.8) при $T \gg \Theta$ могли бы давать вклад как акустические, так и оптические ветви. Однако обычно групповая скорость оптических фононов бывает меньше, чем у акустических, так что неравенство (33.9) для оптических ветвей не выполняется.

²⁾ Этот результат принадлежит Л. Д. Ландау и Ю. Б. Румеру (1937). Ими же был сделан вывод о линейной зависимости коэффициента поглощения γ от частоты ω и температуры T при $T \gg \Theta$.

простейшая ситуация, в которой видно, что для анализа поведения коэффициента поглощения может оказаться неприменимой теория возмущений, несмотря на малость параметра решеточного ангармонизма.

Кристаллические диэлектрики, вообще говоря, обладают заметной упругой анизотропией. В упруго анизотропных телах звуковые колебания строго продольны или поперечны лишь вдоль некоторых избранных направлений распространения (например, вдоль осей симметрии третьего, четвертого или шестого порядка). В остальных направлениях их можно рассматривать как продольные или поперечные лишь приближенно. Известны, однако, случаи, когда упругая анизотропия кристаллов невелика, и такое приближение является довольно хорошим. К таким кристаллам результаты данного раздела могут быть применимы непосредственно (критерий малости анизотропии будет указан ниже).

В какой мере полученные результаты применимы к кристаллам с заметной анизотропией, мы обсудим в § 35.

В конце настоящего раздела мы увидим, что целый ряд результатов оказывается непосредственно применимым для описания поглощения звука в гелии II в фононной области температур.

Начнем с того, что поясним, каким образом видна необходимость учитывать при определенных обстоятельствах высшие приближения теории возмущений, несмотря на малость решеточного ангармонизма.

Попробуем применить формулу (33.8) для расчета коэффициента поглощения продольного звука при $T \ll \Theta$. В изотропном случае частоты продольных и поперечных тепловых акустических колебаний Ω_{al} и Ω_{at} не зависят от направления волнового вектора k . В приближении теории упругости

$$\Omega_{al} = v_l k, \quad \Omega_{at} = v_t k.$$

Рассматривая поглощение продольного звука с частотой $\omega = v_l q$, мы заключаем, что закону сохранения энергии и квазиимпульса фононов

$$|\omega(q) + \Omega(k) = \Omega(k + q) \quad (34.1)$$

можно удовлетворить, если все три фонона, участвующих в столкновении, продольные акустические, а их волновые векторы строго параллельны, т. е. угол θ в точности ра-

вен нулю. Это значит, что равен нулю фазовый объем, соответствующий данному процессу, т. е. выражение (33.8) не имеет определенного смысла.

Однако выражение для коэффициента поглощения получается определенным, если в изотропном законе дисперсии продольных фононов кроме линейного члена присутствует, например, также кубическая добавка

$$\Omega_{al} = v_l(k + \alpha k^3), \quad (34.2)$$

где α — постоянный коэффициент. Соответственно, групповая скорость продольного звука оказывается зависящей от k :

$$g_l(k) = \frac{\partial \Omega_l}{\partial k} = v_l(1 + 3\alpha k^2) \frac{k}{k},$$

т. е. имеет место, как говорят, *дисперсия скорости звука*. Дисперсию мы будем считать малой, так что во всей существенной области k

$$\alpha k^2 \ll 1. \quad (34.3)$$

Аргумент δ -функции в (38.8) в данном случае равен $1 - (1 + 3\alpha k^2) \cos \theta$. Может ли эта разность при некотором значении угла θ обратиться в нуль, зависит от знака константы α .

Если $\alpha > 0$, эта разность обращается в нуль при

$$\cos \theta = \frac{1}{1 + 3\alpha k^2}, \quad (34.4)$$

т. е. трехфононные столкновения оказываются разрешенными. Такой тип фононного закона дисперсии называется *распадным*, так как при этом оказываются разрешенными распады фонона на фононы меньшей частоты (это видно, если прочитать равенство (34.1) справа налево). Разность $g_l(k) - g_l(0)$ в данном случае положительна. Мы будем называть подобную ситуацию случаем *положительной дисперсии скорости звука*.

Имея целью получить точное выражение для коэффициента поглощения звука (а не порядковую оценку, как в § 33), выразим коэффициент $\beta_{ajj}(q, k, -k - q)$ через тензор деформационного потенциала m_i продольных фононов. Последний в случае изотропной сплошной среды

должен, очевидно, иметь следующую общую форму:

$$m_{il} = m_1 \frac{k_i k_l}{k^2} + m_2 \delta_{il}. \quad (34.5)$$

Подставляя (34.5) в (29.11), получаем для ангармонического коэффициента b_{lll} , отвечающего переходу (34.1) с участием трех продольных акустических фононов, выражение

$$b_{lll}(q, k, -k - q) = 2imq\Omega^2, \quad (34.6)$$

где $m = m_1 + m_2$ ¹⁾. Отсюда, согласно (6.17),

$$\beta_{lll}(q, k, -k - q) = \frac{\pi m^2 \hbar \Omega^2 q^2}{\rho \omega} = \frac{\pi m^2 \hbar \Omega^2 \omega}{\rho v_l^2}.$$

Подставляя (34.4) в (33.8), мы имеем

$$\gamma = \frac{m^2 \hbar^2 \omega^2}{8\pi^2 T \rho v_l^2} \int_0^\infty dk k^2 \Omega^2 N_0 (N_0 + 1) \int_0^{2\pi} d\varphi \times \\ \times \int_0^\pi d\theta \sin \theta \delta(\omega - qg_l \cos \theta). \quad (34.7)$$

Интегрирование по азимутальному углу φ дает множитель 2π , поскольку подынтегральное выражение от φ не зависит. Интеграл от δ -функции равен

$$\int_0^\pi \delta[1 - (1 + 3\alpha k^2) \cos \theta] \sin \theta d\theta = \frac{1}{1 + 3\alpha k^2}.$$

В силу неравенства (34.3) это выражение можно с достаточной точностью считать равным 1. При вычислении интеграла по k мы также пренебрежем дисперсионной поправкой — вторым слагаемым в (34.2). Тогда интегрирование дает

$$\int_0^\infty dk k^2 \Omega^2 N_0 (N_0 + 1) = \frac{T^5}{\hbar^5 v_l^3} \int_0^\infty \frac{z^4 e^z dz}{(e^z - 1)^2} = \frac{4T^5}{\hbar^5 v_l^3} \int_0^\infty dz \frac{z^3}{e^z - 1}.$$

¹⁾ В (34.6) мы пренебрегли небольшой непараллельностью фононных волновых векторов.

Интеграл по z равен $\pi^4/15$, так что в итоге

$$\gamma = \frac{\pi^3 m^2 \omega T^4}{15 h^3 \rho v_l^5}. \quad (34.8)$$

По своей зависимости от ω и T , так же как и по порядку величины, это выражение совпадает с оценкой (33.13). Это естественно: учет малой положительной дисперсии скорости звука потребовался только для того, чтобы «сработала» δ -функция. Затем мы положили $\alpha = 0$, после чего зависимости фоновый спектр и взаимодействия от волновых векторов получаются такими же, как и при выводе (33.13). Существенно, что выражение (34.8) при $\alpha \rightarrow 0$ стремится к пределу, отличному от нуля.

Если же $\alpha < 0$, то аргумент δ -функции ни при каких значениях θ в нуль не обращается и, следовательно, выражение (33.8) дает $\gamma = 0$. Таким образом, получается физически бессмысленный результат, согласно которому коэффициент γ существенным образом зависит от знака бесконечно малой нелинейной по k добавки к закону дисперсии продольных акустических фононов. Такой результат получился потому, что использование наинизшего приближения теории возмущений оказывается необоснованным при достаточно малых значениях α .

Чтобы убедиться в этом, рассчитаем коэффициент поглощения иным способом, выразив его через неравновесную функцию распределения фононов, удовлетворяющую кинетическому уравнению. Скорость диссипации механической энергии $T\dot{\mathcal{P}}$ выражается через неравновесную добавку ΔN к функции распределения фононов по формуле (11.22).

В соответствии со сказанным в конце § 28, ищем неравновесную функцию распределения в виде $N = N_0(\tilde{\Omega}) + \Delta N$.

Считая возмущение малым, ограничиваемся линейным по ΔN приближением и используем для вычисления ΔN линеаризованное кинетическое уравнение. Поскольку оператор столкновений при действии на $N_0(\tilde{\Omega})$ дает нуль, а результат, отличный от нуля, получается только при действии на ΔN , в выражении для самого оператора \hat{I} следует пренебречь величинами ΔN по сравнению с невозмущенными фононными частотами Ω .

Мы увидим что, продольный звук сильнее всего возмущает функцию распределения продольных фононов; ее мы и будем вычислять.

Считаем, что величины ΔN и $\Delta \Omega$ пропорциональны $\exp[i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} - \omega t)]$. Линеаризованное кинетическое уравнение, определяющее ΔN , запишется в виде

$$-i\left(\omega - \mathbf{q} \frac{\partial \Omega}{\partial \mathbf{k}}\right) \Delta N + \frac{\partial}{\partial t} N_0(\tilde{\Omega}) = -\hat{I} \Delta N. \quad (34.9)$$

Здесь Ω определяется формулой (34.2), а $\Delta \Omega$ — выражением (28.2). Вводя групповую скорость $\mathbf{g} = \partial \Omega / \partial \mathbf{k}$, переписываем это уравнение в виде

$$-i(\omega - \mathbf{q} \mathbf{g}) \Delta N + \hat{I} \Delta N = -i\omega \frac{\hbar \Delta \Omega}{T} N_0(N_0 + 1).$$

Подставим выражение для ΔN в комплексном виде в формулу (11.22) и произведем усреднение по периоду звука. Мы получим, что скорость диссипации механической энергии есть

$$\dot{\mathcal{E}}_m = -T\dot{\mathcal{P}} = -\mathcal{V} \frac{T}{2} \int d\mathbf{k} \frac{\Delta N^*}{N_0(N_0 + 1)} \hat{I} \Delta N. \quad (34.10)$$

Таким образом, задача свелась к решению уравнения (34.9) для ΔN и последующему вычислению интеграла (34.10).

Чтобы представить себе характер решения кинетического уравнения, рассмотрим его левую часть. Выражение в скобках в левой части уравнения (34.9) есть $v_l q [1 - \cos \theta (1 + 3\alpha k^2)]$. Модуль этого выражения имеет минимум при $\theta = 0$, если $\alpha < 0$. Если же $\alpha > 0$, то это выражение обращается в нуль при¹⁾

$$\cos \theta = 1/(1 + 3\alpha k^2), \quad (34.11)$$

т. е., с учетом малости члена αk^2 , при $\theta = \sqrt{6\alpha} k \ll 1$. В пренебрежении фонон-фононными столкновениями решение кинетического уравнения имеет острый максимум

¹⁾ Обратим внимание на то, что при $\alpha > 0$ условие (34.11) максимума фононной функции распределения и условие (34.4) обращения в нуль аргумента δ -функции, выражающей законы сохранения энергии и квазиимпульса фононов, совпадают. Как мы увидим ниже, это есть следствие того, что поглощение в данном случае можно вычислять и классическими, и квантовыми методами.

при $\theta = 0$ в первом случае и особенность при $\theta = \sqrt{6\alpha} k$ — во втором. Столкновения, как мы убедились, устраняют особенность. Однако, если они происходят достаточно редко, решение кинетического уравнения в обоих случаях сохраняет острый максимум в области малых θ . Нас будет интересовать поведение функции распределения вблизи максимума, поскольку именно эта область, как мы увидим, определяет скорость диссипации механической энергии и, тем самым, коэффициент поглощения звука.

Начнем с замечания, что коль скоро нас интересует поведение функции ΔN вблизи максимума, то результат действия оператора столкновений на нее может быть вычислен уже не по порядку величины, а точно. Рассмотрим линеаризованный оператор столкновений (9.2). Это интегральный оператор, представляющий сумму шести слагаемых. Два из них содержат в качестве множителя величину ΔN , выносящуюся за знак интеграла (так называемый внеинтегральный член), в то время как четыре остальных содержат величины $\Delta N'$, $\Delta N''$ и $\Delta N'''$, которые интегрируются (интегральные члены). Очевидно, первые слагаемые дают гораздо больший вклад, так как в них входит значение функции ΔN вблизи максимума, в то время как в остальные входит некоторое среднее значение от ΔN по всему интервалу углов.

Мы приходим, таким образом, к следующему выводу. Пусть неравновесная добавка к функции распределения есть функция k , имеющая острый максимум, и нас интересует область ее значений вблизи максимума. Тогда в линеаризованном операторе столкновений можно сохранить внеинтегральный член и отбросить интегральные члены (параметр, по которому это можно сделать, есть $1/\omega\tau$). Соответствующий оператор столкновений запишется:

$$\hat{T} \Delta N = \frac{1}{\tau} \Delta N, \quad (34.12)$$

$$\frac{1}{\tau(k)} = \int d\xi k' \left\{ \sum_{j''} \beta_{jj'j''} (N'_0 - N''_0) \delta(\Omega'' - \Omega - \Omega') + \right. \\ \left. + \frac{1}{2} \sum_{j''} \beta_{j'j''j} (N'_0 + N''_0 + 1) \delta(\Omega - \Omega' - \Omega'') \right\}. \quad (34.13)$$

Время (34.13) называется *временем релаксации фононов*. Мы считали здесь, что оно определяется фонон-

фононными столкновениями. Однако его легко написать и для случая комбинарованного фонон-фононного и фонон-дефектного рассеяния — только в этом случае обратное время релаксации следует определить как сумму внеинтегральных членов операторов (9.2) и (9.9). Для времени релаксации должны быть, очевидно, справедливы оценки § 10 (полученные для времени свободного пробега), и мы сохраним для него обозначение τ .

Записывая оператор столкновений в виде (34.12), мы легко находим решение кинетического уравнения (34.9):

$$\Delta N = -i\omega \frac{\hbar \Delta \Omega}{T} N_0 (N_0 + 1) \frac{1}{-i(\omega - qg) + \tau^{-1}}. \quad (34.14)$$

Подставляя (34.14) в (34.10), находим скорость диссипации механической энергии:

$$\dot{\mathcal{E}} = -\mathcal{V} \frac{\pi m^2 \hbar^2 q^4 u_0^2 v_l^2}{(2\pi)^3 T} \int_0^\infty dk k^2 \Omega^2 N_0 (N_0 + 1) \times \\ \times \int_0^\pi d\theta \sin \theta \frac{\tau^{-1}}{v_l^2 q^2 [1 - \cos \theta (1 + 3\alpha k^2)]^2 + \tau^{-2}} \quad (34.15)$$

(здесь мы проинтегрировали по азимутальному углу, от которого подынтегральное выражение не зависит).

В интеграле по θ удобно произвести замену переменной интегрирования $d\xi = -d \cos \theta = \sin \theta d\theta$. При $\omega\tau \gg 1$ последний множитель в подынтегральном выражении имеет острый максимум вблизи $\theta = 0$, так что значение интеграла определяется областью малых θ . Прочие же множители суть плавные функции θ , так что их можно вынести за знак интеграла при $\theta = 0$. Учитывая малость дисперсии скорости звука, всюду, кроме знаменателя подынтегрального выражения, положим $g = v_l$. В итоге (34.15) переписывается в виде

$$\dot{\mathcal{E}} = -\mathcal{V} \frac{m^2 \hbar^2 \omega^4 u_0^2}{8\pi^2 T} \int_0^\infty dk k^4 N_0 (N_0 + 1) \times \\ \times \int_{-1}^1 \frac{\tau^{-1} d\xi}{v_l^2 q^2 [1 - \xi (1 + 3\alpha k^2)]^2 + \tau^{-2}}.$$

Разделив это выражение на звуковую энергию $\rho\omega^2 u_0^2 \mathcal{V}/2$ и проинтегрировав по ζ , мы получаем для коэффициента поглощения

$$\gamma = \frac{m^2 \omega T^4}{4\pi^2 \rho v_l^5 \hbar^3} \int_0^\infty dz \frac{z^4 e^z}{(e^z - 1)^2} \left\{ \operatorname{arctg} \left[2\omega\tau \left(\frac{T}{\hbar v_l} z \right) \right] + \right. \\ \left. + \operatorname{arctg} \left[3\alpha \left(\frac{T}{\hbar v_l} \right)^2 z^2 \omega\tau \left(\frac{T}{\hbar v_l} z \right) \right] \right\}. \quad (34.16)$$

Анализ этого выражения начнем со случая низких частот: $\omega\tau \ll 1$. Строго говоря, при низких частотах оно неприменимо: его вывод использовал представление для оператора столкновений с помощью времени релаксации, которое имеет место только при $\omega\tau \gg 1$. Однако при $\omega\tau \ll 1$ (34.16) должно давать результат, правильный по порядку величины, так как при низких частотах приближение времени релаксации имеет смысл порядковой оценки (поскольку время τ при $T \ll \Theta$ оказывается порядка τ_N). Если время $\tau(k)$ возрастает при уменьшении k не слишком быстро, основной вклад в интеграл дают z порядка единицы, и мы получаем оценку

$$\gamma \simeq \frac{\omega^2 T^4 \tau_N}{\rho v_l^5 \hbar^3},$$

совпадающую с (30.16).

При $\omega\tau \gg 1$ выражение (34.16) должно давать точный результат. Анализируя это выражение, нужно учесть, что в интеграле по z существенны z порядка единицы (точнее, порядка нескольких единиц).

Возможны следующие случаи:

а) Дисперсия скорости фононов положительна ($\alpha > 0$) и достаточно велика, чтобы выполнялось неравенство

$$\alpha k_T^2 \omega\tau \gg 1. \quad (34.17)$$

Здесь $k_T = T/\hbar v_l$; $\tau = \tau(k_T)$. (Разумеется, в то же время она должна считаться достаточно малой, чтобы при $k = k_T$ имело место неравенство (34.3).) Оба арктангенса в квадратных скобках в (34.16) равны $\pi/2$, так что для γ получается выражение (34.8), выведенное выше с помощью квантовомеханического расчета.

Обсудим, почему один и тот же результат оказалось возможным получить как классическим, так и квантовомеханическим методом. Применимость классического подхода, основанного на кинетическом уравнении, определяется условиями (28.3) и (28.4). Для акустического возмущения оба они означают неравенство $\omega \ll T/\hbar$.

Пределы применимости квантовомеханического подхода, использующего представления о столкновениях с участием ультразвукового кванта частоты ω , сводятся к требованию, чтобы эта частота была больше неопределенности частоты теплового фонона $\omega \gg 1/\tau$.

Таким образом, для ультразвуковых частот, удовлетворяющих условию

$$1/\tau \ll \omega \ll T/\hbar,$$

область применимости обоих подходов перекрывается, и они, естественно, дают одинаковый результат (34.8).

Важно, однако, что классический подход позволяет получить не только сам результат, а и пределы его применимости в виде неравенства (34.17), налагающего ограничение снизу на величину α . Если параметр α настолько мал, что это неравенство нарушается, наименее приближение теории возмущений, использованное при выводе (34.8), оказывается недостаточным. Какое выражение для γ получается при этом, мы выясним, рассмотрев следующий предельный случай.

б) Дисперсия скорости звука мала:

$$|\alpha| k_T^2 \omega\tau \ll 1; \quad (34.18)$$

знак ее может быть произвольным. В квадратных скобках в (34.16) следует удержать лишь первое слагаемое, равное с принятой точностью $\pi/2$. Второе слагаемое в силу неравенства (34.18) мало, и мы пренебрегаем. В результате, естественно, получается коэффициент поглощения, равный половине величины (34.8) (S. Simons, 1964):

$$\gamma = \frac{\pi^3 m^2 \omega T^4}{30 \rho v_l^5 \hbar^3}. \quad (34.19)$$

Этому результату можно дать следующее физическое истолкование. На поглощение оказывают конкурирующее действие два фактора — дисперсия и затухание фононов.

Неравенство (34.17) означает, что затуханием можно пренебречь и учитывать действие одной только дисперсии. В случае же (34.18) пренебрегаем наоборот дисперсией, т. е. считаем закон дисперсии линейным. Законы сохранения энергии и квазиимпульса дают в этом случае $\cos \theta = 1$. Это значит, что разрешены столкновения фононов, распространяющихся строго параллельно. Однако, как уже говорилось, фазовый объем, соответствующий таким процессам, равен нулю. Формально это проявляется в том, что значение $\theta = 0$, при котором аргумент δ -функции в (33.8) обращается в нуль, соответствует границе области интегрирования по углам. Именно это мы и имели в виду, когда говорили, что получающееся выражение не имеет определенного математического смысла.

Чтобы получить математически осмысленное выражение, нужно учесть размытие фононного спектра вследствие столкновений. Размытие приводит к тому, что фононные столкновения могут происходить в конечном фазовом объеме, который стремится к нулю вместе с $1/\tau$. Расчет коэффициента поглощения мы производим в наинизшем приближении по малому параметру $1/\omega\tau$. Чтобы получить это наинизшее приближение, в формуле, выведенной при конечных τ , совершим предельный переход $\tau \rightarrow \infty$. Такой переход дает правило раскрытия интегральных выражений типа (34.7), где δ -функция обращается в нуль на границе интервала интегрирования. Правило, как мы видели, заключается в том, что ответ равен половине множителя при δ -функции, так что поглощение получается вдвое меньше, чем в случае а).

Выясним физический смысл времени τ в критерии (34.18). Для этого укажем, какие физические процессы могут давать вклад в величину (34.13). Это любые процессы, в которых участвуют не только продольные фононы, например, развал продольного фонона на два поперечных или же на продольный и поперечный, или же присоединение продольного к поперечному с образованием продольного — все они разрешены законами сохранения энергии и квазиимпульса¹⁾, если волновые векторы вза-

¹⁾ В том, что эти три процесса разрешены, мы убедимся в конце настоящего раздела.

имодействующих фононов одного порядка. Формула (34.19) справедлива, если вклад таких процессов в (34.13) является преобладающим по сравнению с вкладом процессов с участием одних только продольных фононов¹⁾.

Если же это не так и преобладают процессы с участием одних только продольных фононов, то простая теория, лежащая в основе вывода формулы (34.19), неприменима. В этом случае полное решение задачи требует применения методов квантовой теории поля и потому не может быть изложено в этой книге. Ограничимся лишь указанием, что в такой ситуации само ангармоническое взаимодействие фононов создает «наведенную» отрицательную дисперсию. Эта дисперсия велика по сравнению с затуханием, и ее наличие, вообще говоря, должно обеспечить применимость квантовомеханической теории возмущений для описания фонон-фононных столкновений даже и в том случае, если «затравочная» дисперсия мала или же вообще равна нулю²⁾.

Переходим к изучению последнего предельного случая.

в) Дисперсия скорости звука отрицательна ($\alpha < 0$) и велика:

$$|\alpha| k^2 \omega \tau \gg 1. \quad (34.20)$$

Пользуясь приближенным выражением для арктангенса при больших значениях аргумента $\operatorname{arctg} x = \pi/2 - 1/x$ и пренебрегая членом порядка $1/\omega\tau$ по сравнению с $1/|\alpha| k^2 \omega \tau$ получаем

$$\gamma = \frac{m^2 T^2}{12\pi^2 \rho v_l^3 \hbar |\alpha|} \int_0^\infty dz \frac{z^2 e^z}{\tau (e^z - 1)^2}, \quad (34.21)$$

или по порядку величины

$$\gamma \simeq \frac{m^2 T^2}{\rho v_l^3 \hbar \tau_N |\alpha|}. \quad (34.22)$$

В этой оценке фигурирует время свободного пробега

¹⁾ Например, благодаря большим значениям коэффициентов $\beta_{jj,j\tau}$, соответствующих переходам с участием поперечных фононов.

²⁾ Поскольку выражение (34.8) при условии (34.17) может быть получено непосредственно по теории возмущений, в критерий (34.17) входит полное время τ , куда дают вклад все возможные процессы, в том числе и те, в которых участвуют одни только продольные фононы.

фононов τ_N при значении аргумента k , равном нескольким k_T . Поскольку τ_N пропорционально T^{-5} , коэффициент поглощения пропорционален T^7 и не зависит от ω . Он обратно пропорционален $|\alpha|$; таким образом, пока справедливо (34.20), поглощение тем больше, чем меньше $|\alpha|$.

Обратим внимание, что коэффициент поглощения (34.21) обратно пропорционален τ , т. е. пропорционален вероятности фоновых столкновений. Это заставляет думать, что в случае (34.20) кинетическое уравнение (34.9) можно решать методом итераций по малому параметру $1/|\alpha|k_T^2\omega\tau$.

Действительно, выражение (34.21) получается, если подставить в (34.10) первую итерацию:

$$\Delta N^{(1)} = \frac{\omega}{\omega - qg} \frac{\hbar \Delta \Omega}{T} N_0 (N_0 + 1)$$

и выразить оператор столкновений, согласно (34.12), через время релаксации τ .

Выражение (34.21) пропорционально четвертой степени коэффициента фонованого ангармонизма — квадрат коэффициента ангармонизма входит в виде m^2 , а другой квадрат фигурирует в определении (34.13) обратного времени релаксации $1/\tau$. Это наводит на мысль, что результат (34.21) может быть получен и с помощью прямого квантовомеханического расчета — путем разложения по фонованому взаимодействию. Не останавливаясь на деталях, укажем основные этапы такого расчета¹⁾.

При отрицательной дисперсии скорости звука спектр нераспадный, и трехфонные процессы с участием фононов одной только продольной ветви запрещены. Однако, вообще говоря, оказываются разрешенными четырехфонные столкновения типа $2 \rightarrow 2$ (два фонона сливаются и образуют два других). Законы сохранения при этих процессах дают

$$\omega(q) + \Omega(k) - \Omega(k') - \Omega(k + q - k') = 0, \quad (34.23)$$

и процесс оказывается заведомо разрешенным при определенных значениях волновых векторов k и k' если, например, фонон k — продольный, а хоть один из фононов, k' или $k + q - k'$, — поперечный.

¹⁾ Именно таким образом подобный результат и получил впервые И. Я. Померанчук (1942).

В этом проще всего убедиться следующим образом. Учитывая малость волнового вектора q , посмотрим, что дает соотношение (34.23) при $q = 0$. Тогда (34.23) превратится в равенство, выражающее законы сохранения при распаде продольного фонона на продольный и поперечный или же на два поперечных. Такие процессы, как указывалось выше, разрешены. При этом угол между векторами k и k' отличен от нуля и определяется отношениями v_i/v_l и k'/k (см. ниже).

Если теперь считать волновой вектор q в (34.23) отличным от нуля, но достаточно малым, то этот угол также должен измениться на малую величину, т. е. процесс по-прежнему останется разрешенным.

Нас, таким образом, будут интересовать четырехфонные процессы, где в начальном состоянии имеются два продольных фонона, q и k , которые мы будем обозначать, соответственно, 1 и 2. Такие процессы могут происходить либо за счет четверного ангармонизма (член \mathcal{U}_4 (6.29) в разложении ангармонической энергии), либо за счет тройного ангармонизма (член (6.3)) во втором приближении теории возмущений. Если переход за счет \mathcal{U}_3 идет через промежуточное состояние, в котором имеется поперечный фонон, то и тот, и другой члены дают вероятности перехода одного порядка. Покажем, как в этом можно убедиться.

Амплитуда перехода за счет четверного ангармонизма пропорциональна ангармоническому коэффициенту $b_{j_1 j_2 j_3 j_4}(k_1, k_2, k_3, k_4)$. По порядку величины он равен (см. оценку (6.32) и следующие за ней рассуждения)

$$|b(1, 2, 3, 4)| \simeq \bar{v}^2 k_1 k_2 k_3 k_4. \quad (34.24)$$

Ее нужно сравнить с амплитудой перехода за счет тройного ангармонизма во втором приближении теории возмущений.

Вычисляя последнюю по обычным правилам квантовой механики¹⁾, например, для такого процесса, когда в начальном состоянии имеются фононы 1 и 2, а в конечном — какие-то фононы 3 и 4, мы находим, что она про-

¹⁾ См., например, Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. — М.: Наука, 1974, с. 170.

порциональна величине

$$\sum_j \frac{b(1, 2, j) b(j, 3, 4)}{(\Omega_j - \Omega_1 - \Omega_2) \Omega_j}, \quad (34.25)$$

где суммирование производится по всем промежуточным однофононным состояниям таким, что волновой вектор промежуточного фонона равен $k + q$. Поскольку трехфононные процессы с участием фононов 1 и 2 запрещены, знаменатель в этом выражении в нуль не обращается.

Если фонон Ω_j ($k + q$) в промежуточном состоянии поперечный, то знаменатель равен по порядку величины $v^2 k^2$. Пользуясь для ангармонических коэффициентов третьего порядка оценкой (6.13), мы приходим к выводу, что амплитуды (34.24) и (34.25) одного порядка.

Однако амплитуда (34.25) оказывается намного больше, если фонон j в промежуточном состоянии продольный. В этом случае разность

$$\Omega_j - \Omega_2 - \Omega_1 \equiv \Omega_l(k + q) - \Omega_l(k) - \omega(q) \quad (34.26)$$

при малой отрицательной дисперсии скорости звука отлична от нуля, но мала. Соответственно, вклад от подобных переходов оказывается основным — по сравнению с ним пренебрежимо малы как вклад от \mathcal{U}_4 , так и вклад от второго приближения за счет \mathcal{U}_3 через промежуточное состояние с поперечным фофоном.

Разлагая (34.26) по малому волновому вектору q , мы получаем знакомое выражение $qg - \omega$. Значит, в выражении для вероятности соответствующего перехода возникает малый знаменатель $(qg - \omega)^2$. Далее, в выражении для вероятности фигурирует произведение

$$|b_{lll}(q, k, -k - q) b_{laa'}(-k - q, k_1, k + q - k_1)|^2 \times \\ \times \frac{1}{\omega(q) \Omega_l(k) \Omega_a(k_1) \Omega_{a'}(k - k_1 + q)},$$

где l индицирует продольную акустическую ветвь, а из индексов a и a' по крайней мере один отвечает поперечной акустической ветви. Здесь множитель $|b_{lll}|^2/\omega_q$ пропорционален ω . Во всех остальных множителях можно пренебречь малым волновым вектором q . В вероятности перехода фигурирует еще выражение типа (24.33) $(N_2 + 1)N_3N_4 - N_2(N_3 + 1)(N_4 + 1)$, которое, как мы видели

в § 24, пропорционально $\hbar\omega/T$. После выделения этого множителя можно с принятой точностью положить $q = 0$ и в аргументе δ -функции, также входящей в выражение для вероятности перехода.

Интегрируя по k и k_1 , мы получаем выражение для коэффициента γ , которое (в соответствии с (34.21)) не зависит от ω и обратно пропорционально τ .

Осталось еще вычислить ту часть коэффициента поглощения продольного акустического фонона, которая обусловлена процессами распада на два фонона (Г. Слонимский, 1937). В § 33 мы отмечали, что, вообще говоря, распадный вклад в затухание длинноволновых фононов мал по сравнению с прочими из-за малости как взаимодействия, так и фазового объема, в который могут происходить распадные переходы. Мы видели, однако, что прочие вклады в поглощение длинноволновых продольных фононов могут быть малы по своим причинам, так что распадный вклад может оказаться сопоставимым с ними.

Убедимся сначала, что законы сохранения энергии и квазиимпульса допускают распад продольного акустического фонона на продольный и поперечный или же на два поперечных. Для первого из этих процессов мы имеем

$$\omega(q) = \Omega_{al}(k) + \Omega_{al}(q - k), \quad (34.27)$$

или

$$v_l q = v_l k + v_l |q - k|.$$

Перенося первое слагаемое в правой части налево и возводя в квадрат, мы находим, что

$$\cos(q, k) = \frac{v_l}{v_l} + \frac{k}{2q} \left(1 - \frac{v_l^2}{v_l^2}\right).$$

Таким образом, процесс возможен, если длина волнового вектора поперечного фонона, который образуется в результате распадного перехода, удовлетворяет неравенству

$$k \leq \frac{2q}{1 + v_l/v_l}. \quad (34.28)$$

Это и есть условие малости фазового объема, о котором говорилось выше.

Аналогичное условие для распада продольного фонона на два поперечных имеет вид

$$\left(\frac{v_l}{v_t} - 1\right) \frac{q}{2} \leq k \leq \left(\frac{v_l}{v_t} + 1\right) \frac{q}{2}. \quad (34.29)$$

Звуковая энергия, поглощаемая в единицу времени за счет процессов распада, равна

$$\dot{\mathcal{E}}^{(s)} = \frac{1}{2} \hbar \omega \sum_{a'} \int d\xi_k \beta_{laa'}(-q, k, q-k) \times \\ \times [(N^{(s)} + 1) NN' - N^{(s)}(N+1)(N'+1)] \delta(\omega - \Omega - \Omega'),$$

где $\Omega = \Omega(k)$, $\Omega' = \Omega(q-k)$; суммирование по a и a' производится по всем акустическим ветвям, которые могут участвовать в распадном переходе. Пренебрегая единицей по сравнению с большим числом $N^{(s)}$, мы получаем

$$\gamma = \frac{1}{2} \int d\xi_k \sum_{a'} \beta_{laa'}(-q, k, q-k) \times \\ \times (N + N' + 1) \delta(\omega - \Omega - \Omega'). \quad (34.30)$$

Для оценки интеграла воспользуемся соотношением, справедливым по порядку величины (ср. с (33.10) и с (33.12))

$$\beta_{laa'} \simeq \frac{\hbar v}{\rho} qk |q - k|,$$

и учтем, что в силу (34.28) и (34.29) верхний предел в интеграле по k имеет порядок q .

Выделим далее два предельных случая низких и высоких звуковых частот. При $\omega \ll T/\hbar$ во всей области интегрирования можно полагать $N = T/\hbar\omega \gg 1$. Это дает для коэффициента поглощения

$$\gamma \simeq \frac{T\omega^4}{\rho v^5}. \quad (34.31)$$

При $\omega \gg T/\hbar$ основной вклад в интеграл дают по-прежнему характерные значения k порядка q . При таких k можно пренебречь в подынтегральном выражении слагаемыми N и N' по сравнению с единицей. Это дает

$$\gamma \simeq \frac{\hbar\omega^5}{\rho v^5}. \quad (34.32)$$

Отметим еще, что процессы присоединения вида

$$\omega(q) + \Omega_{at}(k) = \Omega_{at}(k+q), \quad (34.33)$$

запрещенные при $q \ll k$, оказываются разрешенными при q порядка k . Вклад этих процессов в поглощение также определяется формулой типа (34.31). Чтобы в этом убедиться, достаточно заметить, что из (34.33) получается выражение для косинуса угла между векторами q и k :

$$\cos(q, k) = \frac{v_t}{v_l} - \frac{1}{2} \left(1 - \frac{v_t^2}{v_l^2}\right) \frac{k}{q},$$

откуда вытекает ограничение сверху на возможные значения k :

$$k \leq \frac{2}{1 - v_t/v_l} q. \quad (34.34)$$

Иными словами, в данном случае, так же как и для процессов распада, максимальное возможное значение k оказывается порядка q .

Обратим внимание на общую закономерность, проявляющуюся в выражениях для коэффициента поглощения звука при $T \ll \Theta$, обусловленного трехфононными процессами, таких, как (33.13), (34.31) или (34.32). Сумма показателей ω и T во всех этих выражениях равна пяти (С. Herring, 1954).

Похожая закономерность имеет место и при $T \gg \Theta$. В этом случае коэффициент γ пропорционален T и сумма показателей ω , T и Θ также равна пяти, как видно из (33.11).

В заключение отметим, что изложенную теорию можно непосредственно применить для расчета коэффициента поглощения высокочастотного звука в He II. Фононный спектр в гелии при нормальном давлении является распадным, и поглощение должно определяться трехфононными процессами. Для коэффициента поглощения должно быть справедливо выражение типа (34.7), с тем, однако, отличим, что в качестве $\beta(q, k, -k-q)$ в него следует подставить величину (8.26), т. е. заменить в нем m^2 на $(1+u)^2$.

Закон дисперсии фононов в гелии мы записываем в виде $\Omega = vk[1 + \xi(k)]$. Соответственно, в качестве

групповой скорости мы должны подставить

$$g(k) = v \left[1 + \frac{d}{dk} (k\xi) \right] = v [1 + \delta(k)],$$

и в наименьшем приближении по малой величине $\delta(k)$ мы получаем выражение, аналогичное (34.8):

$$\gamma = \frac{\pi^3 (1 + \eta)^2 \omega T^4}{15 \hbar^3 \rho v^5}, \quad (34.35)$$

если, разумеется, спектр остается распадным вплоть до k порядка $k_T = T/\hbar v^1$.

В силу, изложенных соображений условия справедливости этого выражения, наряду с положительностью функции δ , включают также и требование, чтобы дисперсионная поправка к частоте тепловых фононов была бы больше коэффициента их поглощения. Величина, обратная их коэффициенту поглощения, представляет собой длину свободного пробега тепловых фононов $v\tau_{\parallel}$ ²). По порядку величины

$$\tau_{\parallel} \simeq \gamma^{-1} (T/\hbar) \simeq \frac{\rho \hbar^4 v^5}{(1 + \eta)^2 T^5}, \quad (34.36)$$

и условие применимости формулы (34.35) запишется в виде

$$T \delta_T \gg \hbar / \tau_{\parallel}, \quad (34.37)$$

где $\delta_T = \delta(k_T)$.

Для случая, когда $T |\delta_T| \leq \hbar / \tau_{\parallel}$, теория поглощения звука в гелии II до настоящего времени отсутствует.

§ 35. Поглощение продольного звука в анизотропных диэлектриках. Длина свободного пробега продольных акустических фононов

Обсудим, как на результатах, полученных в § 34, должна сказаться анизотропия фононного спектра в кристаллах. Прежде всего изменится сама постановка зада-

¹) Количественное совпадение между этой формулой и данными опыта по поглощению звука в гелии II и дало повод Марису и Мессю (Н. J. Maris, W. E. Massey, 1970) предположить, что фононный спектр в гелии II является распадным. Справедливость этого предположения была впоследствии подтверждена и другими экспериментальными данными.

²) Смысл этого обозначения разъяснится в § 42.

чи: в анизотропном кристалле акустические колебания не являются, вообще говоря, чисто продольными или поперечными. Тем не менее, и в анизотропных кристаллах обычно имеется одна звуковая ветвь, у которой в любом заданном направлении групповая скорость g больше, чем у колебаний двух других ветвей. Вектор поляризации такой ветви обычно составляет небольшой угол с вектором k , поэтому ее мы будем называть квазипродольной. Две другие ветви будут называться квазипоперечными¹). Вдоль направлений высокой симметрии кристалла (оси третьего, четвертого и шестого порядков) квазипродольные и квазипоперечные ветви становятся чисто продольными или поперечными.

Укажем прежде всего, когда поглощение квазипродольного звука с волновым вектором q можно рассматривать как непосредственное поглощение акустических квантов коротковолновыми ($k \gg q$) тепловыми фононами с частотой $\Omega(k)$. Как было показано в § 34, соответствующий критерий определяется знаком и величиной разности

$$\delta\omega = -vq + gq \cos(g, q). \quad (35.1)$$

Будем считать волновой вектор q столь малым по абсолютной величине, чтобы дисперсией скорости звука можно было пренебречь. Иными словами, будем считать фазовую скорость v зависящей только от направления вектора q .

Рассмотрим величину (35.1) при некотором фиксированном направлении вектора q . Проведем сначала рассуждение для достаточно низких температур, когда характерные значения волновых векторов k тепловых фононов малы, и можно в первом приближении считать, что групповая скорость g зависит только от направления, но не от абсолютной величины вектора k . В этом случае $\delta\omega$ обращается в нуль, когда векторы q и k параллельны. Действительно, по теореме об однородной функции $\Omega(k) = kg(k)$. Умножая обе стороны равенства на отношение q/k , мы получаем слева $\omega(q)$, а справа $qg(k)$.

При фиксированном q величина $\delta\omega$ зависит от направления k . Обозначим через $\delta\omega_m$ максимальное значе-

¹) Однако там, где это не может привести к недоразумениям, мы их будем называть просто продольными или поперечными.

ние этой разности. Если $\delta\omega > 0$, и $\delta\omega_m\tau \gg 1$, то поглощение звука можно рассматривать как процесс прямого поглощения акустических квантов, что дает для коэффициента γ выражение (33.8) и оценку (33.13). Более типичен, по-видимому, случай $\delta\omega_m = 0$. В этом случае (или вообще при $|\delta\omega_m|\tau \ll 1$) работают соображения § 34, и оценка (33.13) сохраняет силу.

При больших k начинает играть роль зависимость скорости g от абсолютной величины вектора k . В этой ситуации возникает новая возможность: для характерных значений k $\delta\omega_m < 0$. Если при этом $|\delta\omega_m|\tau \gg 1$, то кинетическое уравнение можно решать методом итераций по обратным степеням этого большого параметра. Поскольку волновые векторы k считаются гораздо меньше предельных, типичен случай, когда при параллельных векторах k и q фазовая скорость и проекция групповой скорости на направление q различаются не слишком сильно. При этом фононная функция распределения имеет достаточно острый максимум при малых значениях угла между векторами k и q , что позволяет ввести время релаксации τ . Подставляя выражение

$$\Delta N = \frac{\omega}{\omega - gq} \frac{\hbar \Delta \Omega}{T} N_0 (N_0 + 1) \quad (35.2)$$

для фононной функции распределения в (34.10), находим, что скорость диссипации звуковой энергии

$$\dot{\mathcal{E}} = -\mathcal{V} \frac{\hbar^2}{2T} \int_0^\infty dk k^2 \int d\omega |\Delta \Omega|^2 N_0 (N_0 + 1) \frac{(gq)^2}{(\delta\omega)^2 \tau}. \quad (35.3)$$

Основной вклад в интеграл дает окрестность того направления κ_m в k -пространстве, где величина $-\delta\omega$ достигает минимального значения $-\delta\omega_m$. Соответственно, $1/(\delta\omega)^2$ есть наиболее быстро меняющийся множитель в подынтегральном выражении; все прочие множители можно вынести за знак интеграла по $d\omega$, взявши их значения при $\kappa = \kappa_m$.

Чтобы оценить оставшийся интеграл

$$\int \frac{d\omega}{(\delta\omega)^2}, \quad (35.4)$$

направим полярную ось вдоль κ_m . Разлагая $\delta\omega$ вблизи

значения $\delta\omega_m$ по степеням малого параметра $1 - \cos \theta$ с точностью до его первой степени, убеждаемся, что в интеграл дает основной вклад область значений $\cos \theta$, где относительное изменение $\delta\omega$ порядка единицы. Размеры этой области $\Delta \cos \theta \simeq |\delta\omega_m|/\omega$, так что интеграл (35.4) оказывается равным по порядку величины $1/|\delta\omega_m|\omega$.

Учитывая, что в интеграле по k существенны k порядка k_T , и поделив $\dot{\mathcal{E}}$ на энергию звука $\mathcal{V} \rho \omega^2 u_0^2/2$, мы приходим к оценке

$$\gamma \simeq \frac{m^2 T^4}{\rho \hbar^3 v^4 |\delta v_m| \tau_N}. \quad (35.5)$$

Здесь мы ввели величину δv_m , согласно определению:

$$\delta v_m = \delta\omega_m/q, \quad (35.6)$$

m есть значение деформационного потенциала, соответствующее направлению κ_m в k -пространстве. Обратим внимание на определенное сходство выражений (35.5) и (34.21).

Оценка (35.5) сохраняет силу и для тех направлений, для которых величина $|\delta\omega_m|$ оказывается порядка ω , только $|\delta v_m|$ в ней надо заменить на \bar{v} .

Как мы увидим в §§ 36, 37, вопрос о вычислении коэффициента поглощения коротковолнового звука при $T \gg \Theta$ представляет значительный интерес с точки зрения теории таких кинетических явлений, как теплопроводность и вязкость диэлектриков. Дело в том, что в теории бывает очень важно знать, чему равно время свободного пробега продольных акустических фононов с частотой гораздо меньше предельной. По порядку величины оно равно $1/\gamma$.

Чтобы вычислить γ при $T \gg \Theta$, рассмотрим снова величину $\delta\omega$, определенную формулой (35.1). Основной вклад в поглощение дают фононы с частотами порядка предельной. Обычно этот частотный интервал характеризуется сильной дисперсией скорости, так что групповую скорость g , а следовательно, и величину $\delta\omega$ нужно считать зависящими и от направления, и от абсолютной величины вектора k . Для максимального значения этой величины при характерных значениях k мы сохраним обозначение $\delta\omega_m$.

Если при данном q $\delta\omega_m > 0$, то разрешены трехфононные процессы с участием ультразвукового кванта, и для коэффициента поглощения справедлива оценка (33.11). Для кристаллических диэлектриков, однако, более типичен случай, когда дисперсия скорости звука отрицательна и $\delta\omega_m < 0$. При этом коэффициент поглощения вычисляется по формуле (35.3), где, однако, верхний предел в интеграле по k следует считать порядка $1/a$, а для функций N_0 можно воспользоваться приближением $N_0 = T/\hbar\Omega$. В результате вместо (35.5) получается оценка

$$\gamma \simeq \frac{m^2 T \Theta^3}{\rho \hbar^3 v^4 |\delta v_m| \tau}. \quad (35.7)$$

Поскольку при высоких температурах время τ обратно пропорционально T , коэффициент поглощения пропорционален T^2 . От частоты ультразвука он не зависит.

Мы, таким образом, рассмотрели поглощение продольного звука тепловыми фононами, принадлежащими к продольной же ветви. Если величина $\delta\omega_m$ отрицательна при характерных значениях вектора k и при этом достаточно велика по абсолютной величине, то может оказаться, что соответствующий вклад в поглощение относительно мал. Основными в этой ситуации могут оказаться процессы поглощения звукового кванта тепловым фононом ветви j с образованием теплового фонона другой ветви j' .

Вообще говоря, разность между частотами $\Omega_j(k)$ и $\Omega_{j'}(k+q)$ отнюдь не мала. Это значит, что при k порядка теплового и $q \ll k$ закону сохранения (33.2) в общем случае удовлетворить нельзя. Исключение могут составить лишь окрестности линий контакта колебательных ветвей в k -пространстве, вдоль которых $\Omega_j(k) = \Omega_{j'}(k)$. Нам, таким образом, предстоит выяснить, как влияет контакт изочастотных поверхностей на поглощение звука¹⁾.

Этот вопрос исследуется по существу такими же методами, как и влияние контакта на диэлектрическую релаксацию (§§ 23, 24). Поэтому мы изложим соответствующую теорию достаточно кратко, сосредоточив основ-

¹⁾ Излагаемые ниже результаты принадлежат Херрину (С. Herring, 1954).

ное внимание на отличиях от диэлектрической релаксации.

В качестве исходного возьмем выражение (33.7) для коэффициента поглощения:

$$\gamma = \frac{\hbar\omega}{T} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \beta_{ljj'}(q, k, -k-q) N_0(N_0+1) \times \\ \times \delta[\omega + \Omega_j(k) - \Omega_{j'}(k+q)], \quad (35.8)$$

где индекс l обозначает принадлежность к квазипродольной акустической ветви. Начнем с оценки вклада в γ от точек касания изочастотных поверхностей в случае $T \ll \Theta$. Тогда фононы j и j' — это поперечные акустические фононы t и t' . Вычислим вклад в γ от какой-нибудь одной точки касания поперечных акустических ветвей, которая, как мы знаем, лежит на оси симметрии четвертого или шестого порядка (ось z).

Как и при расчете диэлектрической релаксации, в интеграл (35.8) дают вклад малые углы ϑ (порядка $\sqrt{\omega/\bar{v}kT} \ll 1$). Соответственно, в аргументе выражения перед δ -функцией мы положим $\vartheta = 0$ (вопрос, когда при $\vartheta = 0$ оно остается конечным, мы исследуем ниже). Аргумент же δ -функции мы разложим по малому волновому вектору q и по малому углу ϑ :

$$\omega + \Omega_t(k) - \Omega_{t'}(k+q) = v_l q - g_{t'} q + \\ + \Omega_t(k) - \Omega_{t'}(k) \approx v_l q - g_{t'} q - v_2 k \vartheta^2.$$

Здесь мы воспользовались выражением (22.15) для расщепления частот поперечных акустических колебаний вблизи точки касания. Поскольку фазовая скорость продольных фононов v_l предполагается больше групповой скорости поперечных фононов $g_{t'}$, аргумент δ -функции при некотором значении ϑ обращается в нуль, и интегрирование по ϑ дает

$$\int_0^\pi d\vartheta \sin \vartheta \delta[(v_l - g_{t'})q - v_2 k \vartheta^2] = \frac{1}{2kv_2}.$$

Воспользуемся порядковой оценкой, справедливой при $q \ll k \ll a^{-1}$:

$$\beta_{tt'}(q, k, -k-q) \simeq qk^2 \frac{\hbar v}{\rho},$$

и учтем, что в интеграле (35.8) существенны k порядка k_T . Это дает оценку

$$\gamma \simeq \frac{\omega^2 T^3}{\rho \hbar^2 v^5}. \quad (35.9)$$

Таким образом, коэффициент поглощения оказывается пропорциональным $\omega^2 T^3$.

При $T \gg \Theta$ в интеграле (35.8) основной вклад дают предельные значения k , что приводит к оценке

$$\gamma \simeq \frac{\omega^2 T \Theta^2}{\rho \hbar^2 v^5}. \quad (35.10)$$

Осталось выяснить, обращается ли в нуль ангармонический коэффициент $b_{mn}(q, k, -k - q)$ (квадрату модуля которого пропорционален коэффициент β_{mn}) в точке касания изочастотных поверхностей, т. е. при условии, что вектор k параллелен оси симметрии. Ответ на этот вопрос зависит от ориентации волнового вектора звука q . Если вектор q параллелен оси симметрии, то матричный элемент для перехода между двумя поперечными ветвями обращается в нуль. Действительно, когда вектор q параллелен оси z , длинноволновое звуковое колебание строго продольно. Единственная отличная от нуля компонента тензора деформации есть u_{zz} . Она преобразуется по единичному представлению группы волнового вектора k , и матричный элемент от нее для перехода между ортогональными состояниями поперечных фононов равен нулю.

Если же волновой вектор q отклоняется от оси симметрии на угол ϑ_q , то отличны от нуля и другие компоненты тензора деформации, так что соответствующий матричный элемент уже будет отличен от нуля. При малых ϑ_q он должен быть пропорционален ϑ_q^2 (ср. аналогичные рассуждения, касающиеся угловой зависимости z -компоненты электрофононного потенциала, см. § 22)¹⁾.

¹⁾ Он также получается отличным от нуля, если учесть, что волновые векторы тепловых фононов, участвующих в поглощении звука, имеют малую поперечную часть порядка \sqrt{qk} , чему соответствуют $\vartheta^2 \simeq q/k$. Учет таких членов также может дать отличный от нуля коэффициент поглощения; однако он приобретает дополнительную малость по сравнению с оценками (35.9) или (35.10) по параметру $(\hbar\omega/T)^2$ в первом случае или же по параметру $\hbar\omega/\Theta^2$ — во втором.

Соответственно, коэффициент поглощения звука, распространяющегося в тетрагональном или гексагональном кристалле под малым углом ϑ_q к оси, определяется по порядку величины (в наименьшем приближении по $\hbar\omega/T$ или $\hbar\omega/\Theta$) выражением (35.9) или (35.10), которое надлежит домножить на ϑ_q^4 . Что же касается линий случайного пересечения в гексагональных кристаллах, то оно (если имеется) дает в коэффициент поглощения вклад (35.9) или (35.10), домноженный при малых ϑ_q на ϑ_q^2 .

В кубических кристаллах коэффициент поглощения продольного звука, распространяющегося вдоль оси четвертого порядка, в нуль не обращается: его поглощение определяется точками касания, расположенными вдоль двух других осей четвертого порядка, перпендикулярных данной. Оценки (35.9) или (35.10) остаются для них справедливыми всегда.

Вклад от точек стыка изочастотных поверхностей в поглощение звука вычисляется аналогичным образом (см. также § 22). Приведем окончательные выражения для коэффициента поглощения, справедливые по порядку величины. При $T \gg \Theta$

$$\gamma \simeq \frac{\omega^3 T \Theta}{\rho \hbar v^5}, \quad (35.11)$$

в то время как при $T \ll \Theta$

$$\gamma \simeq \frac{\omega^3 T^2}{\rho \hbar v^5}. \quad (35.12)$$

Выражения (35.11) и (35.12) справедливы как для ромбоэдрических кристаллов, так и для кристаллов более низкой симметрии, где имеется случайный стык изочастотных поверхностей.

Для поглощения звука можно повторить все рассуждения, приведенные в конце § 22 относительно диэлектрической релаксации в кристаллических классах, перечисленных в табл. 3. Оценки (35.9) и (35.12) остаются справедливыми для них при частотах звука, удовлетворяющих неравенству $\hbar\omega \gg T^2/\Theta$. При $\hbar\omega \ll T^2/\Theta$ нужно учесть, что контакт изочастотных поверхностей в высших приближениях по $k\alpha \ll 1$ отсутствует. Производя выкладки, идея которых изложена в конце § 22, мы получаем следующую формулу, которая при $\hbar\omega \ll T^2/\Theta$ приходит

на смену выражению (35.9):

$$\gamma \simeq \frac{\omega^3 T \Theta}{\rho \hbar v^5}. \quad (35.13)$$

Аналогичным образом, вместо (35.12) мы теперь имеем

$$\gamma \simeq \frac{\omega^{7/2} T \Theta^{1/2}}{\rho \hbar^{1/2} v^5}. \quad (35.14)$$

Все формулы данного раздела для коэффициента поглощения, полученные в наименьшем приближении по решеточному ангармонизму, следуют закономерности, отмеченной в § 34: сумма показателей при ω и T (при $T \ll \Theta$) или при ω , T и Θ (при $T \gg \Theta$) равна пяти.

§ 36. Роль длинноволновых продольных фононов в теплопроводности

Оценим вклад длинноволновых продольных акустических фононов в теплопроводность. В ряде случаев их время свободного пробега $\tau(k)$ быстро растет с уменьшением абсолютной величины вектора k . В итоге может оказаться, что именно их вклад, а не вклад тепловых фононов определяет теплопроводность.

Для анализа этого вопроса нужно прежде всего знать зависимость $\tau(k)$ при малых k . Эта зависимость была вычислена в §§ 33—35: коэффициент затухания коротковолнового звука представляет собой, очевидно, не что иное, как обратное время свободного пробега длинноволновых фононов¹⁾.

Рассмотрим температуры больше или порядка дебаевской, когда нормальные процессы и процессы переброса происходят, грубо говоря, одинаково часто. Согласно (12.18), в этом случае можно написать следующую порядковую оценку для теплопроводности:

$$\kappa \simeq \bar{v}^2 \int_0^{k_0} dk k^2 \tau(k) = \bar{v} \int_0^{k_0} dk k^2 l(k). \quad (36.1)$$

¹⁾ Об акустических колебаниях, принадлежащих к частотному интервалу $1/\tau \ll \omega \ll T/\hbar$, Θ/\hbar , мы говорили в одних случаях как о длинноволновых фононах, а в других — как о коротковолновом звуке. В первом случае этот термин имеет целью подчеркнуть, что частота ω гораздо меньше частот тепловых фононов, а во втором — то, что ω гораздо больше обратного времени свободного пробега тепловых фононов.

В § 12 мы установили, что при $T \gg \Theta$ время $\tau(k)$, обусловленное трехфононными столкновениями, обратно пропорционально T . Этот вывод находится также в согласии с формулами (33.11), (34.34), (35.7), (35.10) и (35.11). Таким образом, если теплопроводность ограничивается одними только трехфононными процессами, имеет место зависимость

$$\kappa \sim 1/T. \quad (36.2)$$

Если же $\tau(k)$ продольных фононов при малых k растет как k^{-3} или быстрее, то только трехфононные процессы не обеспечивают конечной теплопроводности, так как интеграл (36.1) расходится на нижнем пределе.

Что же касается поперечных длинноволновых фононов, то для них неравенство (33.9) обычно выполняется и, согласно (33.11), для них $\tau(k) \propto 1/Tk$. Следовательно, их вклад в теплопроводность всегда определяется одними только трехфононными процессами.

Если бы закон дисперсии продольных фононов был изотропным и удовлетворял (для существенных значений k) условиям $\delta\omega_m < 0$, $|\delta\omega_m| \tau \gg 1$, то, согласно (34.31), трехфононные процессы дали бы следующий вклад во время свободного пробега:

$$\tau^{(3)}(k) \simeq \bar{v}/Tk^4. \quad (36.3)$$

Эта формула становится несколько более наглядной, если ее записать для длины свободного пробега

$$l^{(3)} = l_0(\bar{a}k)^{-4}, \quad (36.4)$$

где

$$l_0 \simeq \frac{\bar{M}v^2}{T\bar{a}}. \quad (36.5)$$

При подстановке (36.3) в (36.1) получаем расходящееся выражение. Следовательно, в этом случае одни только трехфононные процессы не обеспечивают конечной теплопроводности.

На самом деле, разумеется, определяющую роль в данной задаче играют детали фононного закона дисперсии такие, как его анизотропия, а также величина и знак дисперсии скорости звука. С этой точки зрения все дисперсии можно грубо разделить на несколько типов, в зависимости от показателя d , фигурирующего в законе

$$l^{(3)} = l_0/(\bar{a}k)^d, \quad (36.6)$$

определяющем зависимость от k длины свободного пробега продольных акустических фононов за счет трехфононных столкновений¹⁾.

К типу 1 относятся кристаллы, у которых разность (35.1) либо положительна, либо хоть и отрицательна, но столь мала, что $|\delta\omega|\tau \leq 1$. В этом случае $d=1$, интеграл (36.1) сходится и зависимость (36.2) можно считать обоснованной. Ко всем прочим типам относятся диэлектрики, у которых разность $\delta\omega$ отрицательна и такова, что

$$|\delta\omega|\tau \gg 1. \quad (36.7)$$

У диэлектриков типа 2 фононный спектр имеет точки касания, так что, согласно (35.10), $d=2$. В этом случае для кубических кристаллов интеграл (36.1) также сходится, и зависимость (36.2) по-прежнему имеет место (С. Herring, 1954).

С этой точки зрения сложнее дело обстоит с одноосными кристаллами — тетрагональной и гексагональной симметрии. Как показано в § 35, точка касания изочастотных поверхностей определяет по порядку величины следующую зависимость длины свободного пробега от величины и направления волнового вектора k :

$$l(k) = l_0(\bar{a}k)^{-2}\vartheta^{-4}, \quad (36.8)$$

где ϑ — угол между вектором k и осью кристалла. Для того чтобы исследовать, как такая зависимость сказывается на теплопроводности в различных направлениях, следует исходить из оценочных формул для продольной и поперечной компонент тензора κ , учитывающих анизотропию теплопроводности (ср. (12.13)):

$$\kappa_{\parallel} \simeq \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} g_z^2 \tau(k), \quad \kappa_{\perp} \simeq \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} g_x^2 \tau(k), \quad (36.9)$$

где ось x направлена произвольным образом в плоскости, перпендикулярной оси кристалла (ось z).

¹⁾ Грубость такого деления связана в первую очередь с тем, что в одном кристалле у продольных фононов, распространяющихся в разных направлениях, длина свободного пробега может по-разному зависеть от k . В этом случае, вообще говоря, преобладающий вклад в теплопроводность должны давать те фононы, у которых длина свободного пробега при уменьшении k возрастает наиболее резко. Соответственно, они в первую очередь и будут определять принадлежность диэлектрика к определенному типу.

Направляя полярную ось вдоль оси z , мы видим, что интеграл по углу ϑ в выражении для κ_{\parallel} расходится как $\int \sin \vartheta d\vartheta/\vartheta^4$, т. е. квадратично. В то же время интеграл по углам в выражении для κ_{\perp} ведет себя как

$$\int \frac{\sin^3 \vartheta d\vartheta}{\vartheta^4},$$

т. е. расходится всего лишь логарифмически. Расходимость устраняется учетом четырехфононных процессов (см. ниже). Таким образом, в этих кристаллах должна наблюдаться заметная анизотропия температурной зависимости теплопроводности.

К диэлектрикам типа 3 следует причислить те кристаллы, у которых фононный спектр имеет точки стыка, так что

$$l^{(3)} = l_0(\bar{a}k)^{-3}. \quad (36.10)$$

Интеграл (36.1) в этом случае имеет слабую (логарифмическую) расходимость. Чтобы устранить ее, приходится учитывать четырехфононные процессы. Вероятность последних, хотя и содержит более высокую степень малого параметра $T/\bar{M}\bar{v}^2$, но зато, согласно (35.7), не зависит от k . Чтобы найти температурную зависимость теплопроводности, нужно подставить в (36.1) полную длину свободного пробега l , которая определяется суммарной вероятностью рассеяния

$$\frac{1}{l} = \frac{1}{l^{(3)}} + \frac{1}{l^{(4)}}. \quad (36.11)$$

Здесь $l^{(4)}$ есть величина, обратная γ/\bar{v} , где γ дается выражением (35.7). Мы представим эту величину в виде

$$\frac{1}{l^{(4)}} = \frac{f}{l_0}, \quad (36.12)$$

где f — безразмерный малый параметр

$$f = \frac{T}{\bar{M}\bar{v}^2} \frac{\bar{v}}{|\delta v_m|}. \quad (36.13)$$

В общем случае

$$l = \frac{l_0}{f + (\bar{a}k)^d}. \quad (36.14)$$

В интересующем нас сейчас случае $d = 3$:

$$\kappa \simeq \bar{v} \int_0^{k_0} \frac{l_0 k^2 dk}{f + (\bar{a}k)^3} \approx \frac{l_0 \bar{v}}{a^3} \ln \frac{1}{f} = \frac{l_0 \bar{v}}{a^3} \ln \left(\frac{\bar{M} \bar{v}^2}{T} \left| \frac{\delta v_m}{\bar{v}} \right| \right). \quad (36.15)$$

Теория, таким образом, дает в этом случае слабую — логарифмическую — зависимость от температуры произведения κT , которую едва ли возможно наблюдать на опыте. Логарифмическая зависимость такого же типа получается и для поперечной компоненты теплопроводности в кристаллах гексагональной и тетрагональной симметрии. К диэлектрикам типа 4 относятся кристаллы низкой симметрии, где $d = 4$. Подставляя для этого случая выражение (36.14) в (36.1) и распространяя интегрирование до бесконечности ввиду быстрого убывания подынтегрального выражения при больших k , мы имеем

$$\kappa \simeq l_0 \bar{v} \int_0^{\infty} \frac{k^2 dk}{f + (\bar{a}k)^4} \approx \frac{l_0 \bar{v}}{a^3 f^{1/4}} = l_0 \bar{v} \left(\frac{\bar{M} \bar{v}^2}{T} \left| \frac{\delta v_m}{\bar{v}} \right| \right)^{1/4}. \quad (36.16)$$

Таким образом, в этом случае $\kappa \propto T^{-5/4}$ (И. Я. Померанчук, 1942). Нужно, однако, заметить, что на эксперименте эту зависимость весьма трудно отличить от зависимости $\kappa \propto T^{-1}$, так как обычно даже при температурах, близких к температуре плавления, неравенство $T \gg \Theta$ — условие применимости выражений (36.12) и (36.13), лежащих в основе данного расчета, выполняется с не очень большим запасом.

Обратим внимание на одну особенность интеграла (36.16). Основной вклад в него дают отнюдь не значения k порядка предельных, как это было в случаях меньших d , а значения порядка

$$k_m = \frac{f^{1/4}}{a} = \left(\frac{T}{\bar{M} \bar{v}^2} \left| \frac{\delta v_m}{\bar{v}} \right| \right)^{1/4} \frac{1}{a}, \quad (36.17)$$

при котором подынтегральное выражение достигает максимума. Таким образом, в этом случае основной поток тепла переносится фононами со сравнительно большими длинами волн.

Выражение (36.16) применимо, если длина свободного пробега (36.14) при $k = k_m$ меньше характерных раз-

меров образца. В противном случае длина l , а следовательно и теплопроводность κ , должна ограничиваться размерами образца. Такое ограничение должно иметь место либо вследствие того, что стенки образца шероховаты, и потому фононы на них рассеиваются диффузно, либо вследствие того, что при зеркальном отражении продольные волны с вероятностью порядка единицы превращаются в поперечные, у которых длина свободного пробега мала.

Следует заметить, что теория теплопроводности при $T \ll \Theta$, изложенная в §§ 13, 14, также применима, лишь если длины свободного пробега всех фононов, вносящих существенный вклад в перенос тепла, меньше размеров образца. В противном случае теплопроводность будет зависеть от этих размеров¹⁾.

Отметим, что, хотя основную роль в переносе тепла в диэлектриках типа 4 играют сравнительно длинноволновые фононы, выражение для их теплопроводности оказывается чувствительным к механизму рассеяния коротковолновых тепловых фононов (Р. Н. Гуржи, А. О. Максимова, 1977). Если последние рассеиваются, главным образом на дефектах, то вместо (36.11) мы должны писать

$$1/l = 1/l^{(3)} + 1/l^{(p,d)}. \quad (36.18)$$

Здесь $l^{(p,d)}$ определяется, так же как и $l^{(4)}$, как величина, обратная γ/\bar{v} , с той лишь разницей, что фигурирующее в выражении (35.7) при $T \gg \Theta$ (или (35.5) при $T \ll \Theta$) время τ следует понимать как характерное время рассеяния тепловых фононов дефектами²⁾. Последнее, как мы знаем, имеет порядок $(n/n_d) \bar{a}/\bar{v}$ при $T \gg \Theta$ и $(n/n_d) (\bar{a}/\bar{v}) (\Theta/T)^4$ при $T \ll \Theta$. Для длины свободного пробега $l(k)$ при произвольных k по-прежнему применимо соотношение (36.14), только в качестве f в него следует подставить

$$f = \frac{n_d}{n} \frac{\bar{v}}{|\delta v_m|} \quad \text{при } T \gg \Theta, \quad (36.19)$$

¹⁾ Анализ этой зависимости имеется в работах: Herring C.—Physical Review, 1954, v. 95, p. 954; Гуржи Р. Н., Максимова А. О.—Физика низких температур, 1977, т. 3, с. 357.

²⁾ Величину $\bar{v}/l^{(p,d)} = 1/\tau^{(p,d)}$ можно было бы также вычислять непосредственно по теории возмущений во втором приближении как вероятность комбинационного фонон-примесного рассеяния.

$$f = \frac{n_d}{n} \frac{\bar{v}}{|\delta v_m|} \left(\frac{T}{\Theta}\right)^7 \quad \text{при } T \ll \Theta. \quad (36.20)$$

При $T \gg \Theta$ для диэлектриков типов 3 и 4 это дает температурный ход теплопроводности $\kappa \propto 1/T$.

§ 37. Теплопроводность в условиях комбинированного фонон-примесного рассеяния фононов

Влияние на теплопроводность рассеяния фононов атомами примеси (точнее, вообще любыми точечными дефектами) обсуждалось в § 14. Температуру мы считали низкой ($T \ll \Theta$), а вероятность рассеяния — малой по сравнению с вероятностью нормальных процессов.

В настоящем разделе мы исследуем обратный случай, когда при характерных фононных частотах примесное рассеяние играет по меньшей мере столь же существенную роль, как и рассеяние, обусловленное решеточным ангармонизмом. Обсудим, какие частоты следует считать характерными с этой точки зрения.

Мы видели, что длина свободного пробега фононов, обусловленная их рассеянием дефектами решетки, резко убывает с ростом частоты фонона. Поэтому при достаточной концентрации дефектов самые коротковолновые фононы не играют роли в переносе тепла.

С другой стороны, на рассеяние длинноволновых фононов дефекты не оказывают практически никакого влияния. Однако вклад длинноволновых фононов в теплопроводность обычно тоже бывает мал из-за малой плотности фононных состояний в длинноволновой области в сочетании с достаточно интенсивным их рассеянием за счет взаимодействия с тепловыми фононами.

Основной вклад в теплопроводность принадлежит, следовательно, некоторым средним длинам волн, для которых интенсивность фононного и примесного рассеяния оказывается, грубо говоря, одинаковой. Теперь, когда частотная зависимость длины свободного пробега длинноволновых фононов, обусловленная решеточным ангармонизмом, детально исследована, мы можем выяснить роль рассеяния на дефектах в теплопроводности.

Как показано в §§ 7, 10, длина свободного пробега акустических фононов, обусловленная их рассеянием на

точечных дефектах, равна

$$l^{(d)}(k) = l_d (\bar{a}k)^{-4}, \quad (37.1)$$

где в случае рассеяния атомами примеси

$$l_d = \frac{n}{n_d} \bar{a},$$

а в случае изотопического рассеяния

$$l_d = \frac{\bar{M}^2}{\Delta M^2} \bar{a}.$$

Для теплопроводности мы будем по-прежнему пользоваться выражением (см. (12.18))

$$\kappa \simeq \bar{v} \int_0^{k_M} l(k) k^2 dk. \quad (37.2)$$

Здесь k_M есть максимальное значение волнового вектора фононов, возбужденных при данной температуре; оно равно k_0 при $T \gg \Theta$ и равно $k_T = T/\hbar v$ при $T \ll \Theta$. $l(k)$ есть полная длина свободного пробега фононов, обусловленная всеми процессами, так что

$$\frac{1}{l(k)} = \frac{1}{l^{(p)}(k)} + \frac{1}{l^{(d)}(k)}, \quad (37.3)$$

где $l^{(p)}$ есть длина свободного пробега, обусловленная столкновениями с участием фононов.

Начнем с рассмотрения диэлектриков типа 1. Для них

$$l^{(p)} = l^{(3)}(k) = l_1 \bar{a}k, \quad (37.4)$$

где $l_1 = l_0$ при $T \gg \Theta$ и $l_1 = l_0(\Theta/T)^3$ при $T \ll \Theta$.

Подставляя (37.4) в (37.2), получаем

$$\kappa \simeq l_1 \frac{\bar{v}}{\bar{a}} \int_0^{k_M} \frac{k dk}{1 + (l_1/l_d)(\bar{a}k)^3}.$$

Подынтегральное выражение имеет максимум при k , равном k_m , которое по порядку величины есть

$$k_m = \bar{a}^{-1} (l_d/l_1)^{1/3}. \quad (37.5)$$

Излагаемая ниже теория справедлива, если эта величина

заметно меньше, чем верхний предел интеграла в (37.2):

$$k_m \ll k_m. \quad (37.6)$$

При любых T это неравенство переписывается в виде

$$n_d \gg nT/\bar{M}\bar{v}^2. \quad (37.7)$$

Ввиду быстрой сходимости интеграла при условии (37.6) верхний предел можно заменить бесконечностью, и тогда по порядку величины

$$\kappa \simeq \bar{v}\bar{a}^{-3}l_1^{1/3}l_d^{2/3}.$$

При $T \gg \Theta$ отсюда имеем¹⁾

$$\kappa \simeq \left(\frac{\bar{M}\bar{v}^2}{T}\right)^{1/3} \left(\frac{n}{n_d}\right)^{2/3} \frac{\bar{v}}{\bar{a}^2}, \quad (37.8)$$

в то время как при $T \ll \Theta$

$$\kappa \simeq \left(\frac{\bar{M}\bar{v}^2}{T}\right)^{1/3} \left(\frac{n}{n_d}\right)^{2/3} \frac{\Theta}{T} \frac{\bar{v}}{\bar{a}^2}. \quad (37.9)$$

Таким образом, для диэлектриков типа 1 (если выполнено условие (37.6)) теплопроводность пропорциональна концентрации дефектов в степени $-2/3$. Температурная зависимость теплопроводности при $T \gg \Theta$ слабая: $\kappa \sim T^{-1/3}$. При $T \ll \Theta$ теплопроводность $\kappa \sim T^{-4/3}$.

Возникает вопрос, в какой мере обосновано исходное выражение (37.2) для теплопроводности. Ведь, согласно ему, в теплопроводность, наряду с рассеянием на примесях, вносят вклад и фонон-фононные нормальные столкновения. Между тем, мы видели в § 13, что нормальные столкновения сами по себе конечной теплопроводности не обеспечивают, так как они происходят с сохранением квазиимпульса фононов.

В рассматриваемом случае комбинированного рассеяния нормальные столкновения играют существенную роль для фононов с $k \lesssim k_m$. В процессе таких столкновений фо-

¹⁾ Для определенности мы всюду пишем оценки теплопроводности для случая рассеяния фононов атомами примеси. В случае изотопического рассеяния отношение n/n_d надо всюду заменить на

$$\bar{M}^2/\Delta\bar{M}^2.$$

ноны с $k \lesssim k_m$ отдают свой квазиимпульс «основной массе» фононов с $k \simeq k_T \gg k_m$. Те же, в свою очередь, настолько интенсивно теряют его при рассеянии на дефектах (которое как раз для коротких волн весьма эффективно), что их функция распределения может считаться почти равновесной. В итоге квазиимпульс «выводится» из фононной системы, так что нормальные процессы в сочетании с рассеянием на дефектах ограничивают теплопроводность.

Расчет теплопроводности диэлектриков типа 2 производится аналогичным образом, с той лишь разницей, что в качестве $l^{(p)}$ следует воспользоваться выражением

$$l^{(p)} = l_2/(\bar{a}k)^2. \quad (37.10)$$

При $T \gg \Theta$ по-прежнему $l_2 = l_0$, в то время как при $T \ll \Theta$

$$l_2 = l_0(\Theta/T)^2. \quad (37.11)$$

Мы имеем теперь

$$\kappa \simeq l_2 \frac{\bar{v}}{\bar{a}^2} \int_0^{k_M} \frac{dk}{1 + (l_2/l_d)\bar{a}^2 k^2}.$$

Подынтегральная функция изменяется монотонно; в интеграле существенны $k \simeq a^{-1}(l_d/l_2)^{1/2}$. Условие (37.6) принимает в данном случае вид (37.7). Для κ получается оценка

$$\kappa \simeq \bar{v}\bar{a}^{-3} \sqrt{l_d l_2}, \quad (37.12)$$

которая в предельных случаях высоких и низких температур дает

$$\begin{aligned} \kappa &\simeq \frac{\bar{v}}{\bar{a}^2} \left(\frac{\bar{M}\bar{v}^2}{T}\right)^{1/2} \left(\frac{n}{n_d}\right)^{1/2} & (T \gg \Theta), \\ \kappa &\simeq \frac{\bar{v}}{\bar{a}^2} \left(\frac{\bar{M}\bar{v}^2}{T}\right)^{1/2} \frac{\Theta}{T} \left(\frac{n}{n_d}\right)^{1/2} & (T \ll \Theta), \end{aligned} \quad (37.13)$$

т. е. в первом случае $\kappa \sim T^{-1/2}$, а во втором $\kappa \sim T^{3/2}$.

Случаи диэлектриков типа 3 и 4 характерны тем, что в $l^{(p)}$ следует учитывать вклад от процессов второго порядка

$$1/l^{(p)} = 1/l^{(3)} + f/l_0.$$

Здесь в кристаллах со сравнительно небольшой концент-

рацией дефектов f дается при $T \gg \Theta$ выражением (36.13), в то время как при $T \ll \Theta$ мы имеем из (35.5):

$$f = \frac{T}{M\bar{v}^2} \left(\frac{T}{\Theta} \right)^7 \frac{\bar{v}}{|\delta v_m|}. \quad (37.14)$$

В кристаллах же со значительной концентрацией дефектов имеют место выражения (36.19) или (36.20). Различие между этими двумя типами диэлектриков заключается в том, что при $d=4$ трехфононными процессами в первом порядке теории возмущений можно заведомо пренебречь при условии (37.7), а при $d=3$ возможность такого пренебрежения требует чуть более жесткого неравенства

$$\frac{n_d \bar{M}\bar{v}^2}{n T} \gg \left(\frac{\bar{M}\bar{v}^2 |\delta v_m|}{T \bar{v}} \right)^{1/3},$$

которое в этом случае будет считаться выполненным. При этом в интеграле (37.2) существенны k порядка

$$k_m \simeq \bar{a}^{-1} (f l_d / l_0)^{1/4}.$$

Теплопроводность при любом соотношении между T и Θ есть по порядку величины (Р. Н. Гуржи, А. О. Максимов, 1977)

$$\kappa \simeq \frac{\bar{v}}{a^3} \frac{l_0^{1/4} l_d^{3/4}}{f^{1/4}}. \quad (37.15)$$

Если f определяется выражением (36.13), мы получаем отсюда

$$\kappa \simeq \frac{\bar{v}}{a^2} \left(\frac{\bar{M}\bar{v}^2}{T} \right)^{1/2} \left(\frac{n}{n_d} \right)^{3/4} \left(\frac{|\delta v_m|}{\bar{v}} \right)^{1/4}. \quad (37.16)$$

Полученные оценки, очевидно, предполагают выполнение неравенства

$$l(k_m)/L \ll 1, \quad (37.17)$$

которое означает, что длина свободного пробега фононов с волновыми векторами порядка k_m гораздо меньше характерных размеров образца. В случае же обратного неравенства нижний предел в интеграле (37.2) следует заменить на величину k_L , определяемую из условия

$$l^{(d)}(k_L) = L. \quad (37.18)$$

С учетом (37.1) это условие дает

$$k_L = \bar{a}^{-1} (l_d/L)^{1/4}. \quad (37.19)$$

В интеграл (37.2) при этом дают основной вклад значения k вблизи нижнего предела, и для теплопроводности получается оценка (И. Я. Померанчук, 1942)

$$\kappa \simeq \bar{v} l_d^{3/4} L^{1/4} \bar{a}^{-3}. \quad (37.20)$$

Таким образом, рассеяние фононов дефектами, само по себе не приводящее к конечной теплопроводности, в сочетании с рассеянием на границах образца дает конечную теплопроводность, пропорциональную $L^{1/4}$).

Поскольку в диэлектриках типа 4 длина свободного пробега фононов за счет трехфононных процессов также обратно пропорциональна k^4 , то их теплопроводность при нарушении неравенства (37.17) тоже оказывается зависящей от размеров образца по закону $L^{1/4}$. Оценки (37.19) и (37.20) остаются в силе и для того случая, если величину $l^{(d)}$ в них заменить на $(\bar{M}\bar{v}^2/T)\bar{a}$. Это дает для теплопроводности (И. Я. Померанчук, 1942)

$$\kappa \simeq \frac{\bar{v} L^{1/4}}{\bar{a}^{9/4}} \left(\frac{\bar{M}\bar{v}^2}{T} \right)^{3/4}, \quad (37.21)$$

т. е. она растет при понижении температуры как $T^{-3/4}$.

§ 38. Коэффициенты диэлектрической релаксации и вязкости в кристаллах с дефектами

Дефекты решетки должны, естественно, оказывать влияние не только на теплопроводность, а и на другие кинетические явления такие, как диэлектрическая релаксация и вязкость. Последние, однако, существуют при конечных частотах ω , в то время как теплопроводность — явление статическое. Однако при достаточно низких частотах это различие не играет роли и, согласно (24.18) и (30.12), мы имеем по порядку величины для коэффи-

¹⁾ Весьма сложная картина поведения теплопроводности возникает, когда рассеяние фононов на границах сочетается с комбинированным фонон-примесным рассеянием. Анализ различных случаев, которые тут могут встретиться, см. в цитированной работе Гуржи и Максимова.

циентов диэлектрической релаксации ξ (в кристаллах без центра симметрии) и коэффициентов вязкости η :

$$\xi \simeq \frac{T}{v} \int_0^{k_M} dk k^2 l(k) \Lambda'^2, \quad (38.1)$$

$$\eta \simeq \frac{T}{v} \int_0^{k_M} dk k^2 l(k) m^2. \quad (38.2)$$

Поскольку порядковые оценки электрофононного потенциала $\Lambda'(k)$ и деформационного потенциала $m_{ii}(k)$ не зависят от величины вектора k , интегралы (38.1) и (38.2) зависят по порядку величины от температуры и концентрации дефектов в диэлектрике таким же образом, как уже знакомый интеграл, входивший в выражение (37.2) для теплопроводности. Поэтому нет необходимости производить оценки заново, а достаточно указать порядковые соотношения, справедливые при достаточно низких частотах:

$$\xi/\kappa \simeq T/\rho \bar{v}^4, \quad (38.3)$$

$$\eta/\kappa \simeq T/\bar{v}^2, \quad (38.4)$$

куда следует подставить оценки теплопроводности, полученные в § 37.

Осталось выяснить, какие частоты следует считать достаточно низкими. Очевидно, это частоты, удовлетворяющие условию

$$\omega \tau(k_m) \ll 1. \quad (38.5)$$

Для диэлектриков типа 1 и 2 отсюда получаются, соответственно, следующие условия:

$$\omega \ll \bar{v} l_d^{1/3} l_1^{-4/3}, \quad (38.6)$$

$$\omega \ll \bar{v} l_d l_2^{-2}. \quad (38.7)$$

Для диэлектриков типов 3 и 4 аналогичное условие имеет вид

$$\omega \ll \frac{fT}{Mv^2} \frac{\Theta}{\hbar}. \quad (38.8)$$

Поскольку у диэлектриков типа 4 зависимость длины свободного пробега от k , обусловленная трехфононными

столкновениями, имеет такой же вид, как и при рассеянии фононов дефектами, в таких диэлектриках порядковые соотношения (38.3) и (38.4) сохраняют справедливость и при условиях чисто фононного рассеяния при $T \gg \Theta$.

Разумеется, и в диэлектриках типа 4 эти соотношения не имеют места при $T \ll \Theta$, поскольку в условиях чисто фононного рассеяния теплопроводность в этом температурном интервале определяется процессами переброса, а коэффициенты η и ξ — нормальными процессами. Оценки, аналогичные проделанным, дают, что при $k_T \gg k_m = f^{1/4} a^{-1}$ эти коэффициенты пропорциональны T^{-2} .

Интересен вопрос, как ведут себя кинетические коэффициенты в промежуточной области частот:

$$\tau^{-1}(k_m) \ll \omega \ll \tau^{-1}(k_M). \quad (38.9)$$

Начнем с рассмотрения коэффициентов диэлектрической релаксации. Поскольку в этом частотном интервале должна играть роль временная дисперсия этих коэффициентов, соответствующие результаты удобнее формулировать непосредственно для мнимой части диэлектрической проницаемости ϵ'' .

Обратимся к выражению (24.31) для ϵ'' . Основной вклад в него дают значения k , при которых выполняется условие $\omega \tau(k) \lesssim 1$. Действительно, при уменьшении k , когда это условие заменяется на обратное, подинтегральное выражение быстро убывает из-за большого слагаемого $(\omega \tau)^2$ в знаменателе. Таким образом, для того чтобы оценить $\epsilon''(\omega)$, достаточно в (24.31) интегрировать от нижнего предела k_ω , определяемого из условия $\omega \tau(k_\omega) = 1$, которое дает

$$k_\omega = \frac{1}{a} \left(\frac{\omega}{v} l_d \right)^{1/4}.$$

Ввиду быстрого убывания подинтегрального выражения в интеграл (24.31) основной вклад вносит область вблизи нижнего предела, и

$$\epsilon'' \simeq (\omega l_d / v)^{3/4} (T / M v^2). \quad (38.10)$$

Таким образом, при интенсивном рассеянии на дефектах диссипативная часть диэлектрической проницаемости пропорциональна $\omega^{3/4}$. Зависимость эта универсальна в

том смысле, что она относится к диэлектрикам всех типов. Однако у диэлектриков разных типов различаются пределы применимости выражения (38.10): в каждом случае конкретная форма условий (38.9) имеет свой вид. Кроме того, при $T \ll \Theta$ частота ω , при которой справедливо выражение (38.10), должна, разумеется, удовлетворять условию

$$k_\omega \ll k_T. \quad (38.11)$$

Как уже отмечалось, в совершенных диэлектриках типа 4 зависимость $l^{(p)}(k)$ имеет такой же характер, как и при рассеянии на дефектах. В диэлектриках типа 4, лишенных дефектов, в соответствующем частотном интервале должна с учетом выражения (36.4) иметь место зависимость

$$\varepsilon'' \simeq \left(\frac{\hbar\omega}{\Theta}\right)^{3/4} \left(\frac{T}{Mv^2}\right)^{1/4}. \quad (38.12)$$

Переходим к изучению коэффициентов вязкости в промежуточной частотной области. Ситуация здесь похожа на рассмотренную выше. Коэффициенты вязкости не зависят от ω при выполнении одного из условий (38.6) — (38.8). Если соответствующее неравенство заменяется на обратное, то для оценки η нужно воспользоваться выражением (38.2), где нижний предел заменить на k_ω . Это дает (P. V. Miller, 1965)

$$\eta \simeq \frac{T}{a^3} \left(\frac{l_d}{v}\right)^{3/4} \omega^{-1/4}. \quad (38.13)$$

В этом случае имеет место слабая дисперсия коэффициента вязкости, и коэффициент поглощения звука γ , согласно (27.28), следующим образом зависит от ω :

$$\gamma \sim \omega^{7/4}. \quad (38.14)$$

Дисперсия теплопроводности оценивается таким же образом, так что учет теплопроводностного вклада в поглощение звука не меняет зависимости (38.14).

В полной аналогии со сказанным выше относительно диэлектрической релаксации зависимость (38.14) должна иметь место для диэлектриков типа 4 в определенном частотном интервале и в отсутствие рассеяния фононов

дефектами решетки. Соответствующая порядковая оценка η имеет вид

$$\eta \simeq \frac{T}{a^3} \left(\frac{l_0}{v}\right)^{3/4} \omega^{-1/4} = \frac{T}{a^3} \left(\frac{Mv}{T} \bar{a}\right)^{3/4} \omega^{-1/4}, \quad (38.15)$$

а для коэффициента поглощения звука опять-таки получается зависимость вида (38.14).

§ 39. Поглощение звука и диэлектрическая релаксация в пьезодиэлектриках

Изложенная в § 27 теория поглощения звука, вообще говоря, неприменима к кристаллам с симметрией, допускающей наличие пьезоэлектрических свойств. В таких кристаллах упругая деформация создает переменное электрическое поле, пропорциональное деформации. И наоборот, помещая их в переменное поле, мы неизбежно создаем в них упругие напряжения. Поэтому диэлектрическая и упругая релаксация при наличии сильной пьезоэлектрической связи должны рассматриваться совместно.

На первый взгляд возникает впечатление, что в таких кристаллах могли бы оказаться связанными не только упругие и электрические явления, а также упругие и тепловые и электрические и тепловые. Дело в том, что симметрия этих кристаллов допускает отличие от нуля кинетических коэффициентов, которые могут быть тензорами третьего ранга. Такие кинетические коэффициенты могли бы, в частности, описывать связь теплопроводности и внутреннего трения. Наличие такой связи означало бы, что выражение (12.1) для плотности потока тепла следовало бы еще дополнить слагаемыми, пропорциональным u_{ii} — скорости изменения деформации. И наоборот, к выражению (27.9) для тензора упругих напряжений могло бы добавиться слагаемое, пропорциональное ∇T .

Кроме того, в выражениях для плотности потока тепла и диссипативной части тензора упругих напряжений могли бы появиться дополнительные слагаемые, пропорциональные \dot{E} — скорости изменения электрического

поля. Соответственно, в выражении для вектора электрической индукции могли бы присутствовать члены, пропорциональные u_i и ∇T , кроме введенных в § 19 членов, пропорциональных \dot{E} .

Рассмотрим, например, слагаемое, описывающее возмущение потока тепла за счет конечной скорости изменения деформации

$$\Delta Q_i = c_{ilm} \dot{u}_{lm}. \quad (39.1)$$

И левая, и правая части (39.1) изменяют знак при замене $t \rightarrow -t$, т. е. оно оказывается инвариантным относительно обращения времени. В то же время соотношения, характеризующие необратимые процессы, приводящие к диссипации механической энергии, неинвариантны относительно обращения времени. Иными словами, добавка (39.1) является недиссипативной¹⁾. Ее включение, например, в систему уравнений, описывающих распространение упругих колебаний в диэлектрике, должно привести к изменению частот колебаний, но не к их затуханию. Этим ничтожным изменением частот мы будем пренебрегать, т. е. мы будем отбрасывать поправки типа (39.1)²⁾. По тем же самым соображениям мы будем отбрасывать добавку к тензору упругих напряжений, пропорциональную ∇T , добавку к плотности потока тепла, пропорциональную \dot{E} , и добавку к вектору электрической индукции, пропорциональную ∇T .

В итоге оказывается, что уравнение переноса тепла сохраняет прежний вид (12.1), в соотношениях же для диссипативных частей электрической индукции D' и тензора упругих напряжений σ' следует добавить слагаемые,

¹⁾ Сравни рассуждения в конце § 14.

²⁾ Малость этой поправки видна из следующих соображений. Во-первых, она должна быть пропорциональна квадрату малой константы решеточного агармонизма: одна степень этой константы обуславливает зависимость ΔQ_i от u_{lm} , отсутствующую в гармоническом приближении; другая фигурирует в выражении для коэффициента теплового расширения диэлектрика, вместе с которым входит в уравнения теории упругости переменная часть температуры, создаваемая потоком тепла (39.1). Во-вторых, она должна содержать отношение частоты ω изменения величины u_{lm} к характерной частоте тепловых фононов.

пропорциональные, соответственно, \dot{u}_{il} и \dot{E} . Это дает

$$\begin{aligned} \sigma'_{il} &= \psi_{m,il} \dot{E}_m + \eta_{ilmn} \dot{u}_{mn}, \\ D'_i &= -\xi_{il} \dot{E}_l - 4\pi \psi'_{i,lm} \dot{u}_{lm}. \end{aligned} \quad (39.2)$$

Здесь тензор ξ_{il} был введен в § 19; η_{ilmn} есть тензор коэффициентов вязкости, определенный в § 27.

Тензоры $\psi_{i,lm}$ и $\psi'_{i,lm}$ не независимы. Они связаны соотношениями Онсагера. Чтобы получить их, запишем выражение для скорости возрастания энтропии диэлектрика, которое в данном случае есть сумма (19.6) и интеграла по объему от $T^{-1} \sigma'_{il} \dot{u}_{il}$ (см. § 27):

$$\dot{\mathcal{P}} = \int d^3r \frac{1}{T} \sigma'_{il} \dot{u}_{il} + \frac{1}{4\pi} \int d^3r \frac{1}{T} E \dot{D}. \quad (39.3)$$

Далее выберем обобщенные координаты x_a и соответствующие им обобщенные силы X_a таким образом, чтобы выражение (39.3) приняло вид (11.27). Возьмем в качестве x_a величины $-\sigma'_{il}/T$ и $-E_i/4\pi T$, а в качестве X_a — величины \dot{D}_i и \dot{u}_i . Чтобы придать системе уравнений (39.2) форму (11.25), перепишем эту систему в следующем виде:

$$\begin{aligned} \sigma'_{il} &= \psi_{m,il} \varepsilon_{mn}^{(0)-1} \dot{D}_n + \eta_{ilmn} \dot{u}_{mn}, \\ E'_i &= \varepsilon_{im}^{(0)-1} \xi_{mn} \varepsilon_{nl}^{(0)-1} \dot{D}_l + 4\pi \varepsilon_{in}^{(0)-1} \psi'_{n,lm} \dot{u}_{lm}. \end{aligned}$$

Здесь мы разрешили второе из уравнений (39.2) относительно величины $E' = \varepsilon^{(0)-1} D'$, причем ограничились наименьшим приближением по малому параметру D'/D ; в диссипативных членах, которые уже малы по этому параметру, мы положили $\dot{D} = \varepsilon^{(0)-1} \dot{E}$. В результате как следствие общих соотношений (11.26) получается следующая связь между тензорами ψ и ψ' :

$$\psi'_{i,lm} = \psi_{i,lm}.$$

С учетом этой связи соотношения (39.2) примут вид

$$\begin{aligned} \sigma'_{il} &= \psi_{m,il} \dot{E}_m + \eta_{ilmn} \dot{u}_{mn}, \\ D'_i &= -\xi_{il} \dot{E}_l - 4\pi \psi_{i,lm} \dot{u}_{lm}. \end{aligned} \quad (39.4)$$

Подставляя (39.4) в (39.3), находим в квадратичном приближении скорость возрастания энтропии

$$\dot{\mathcal{S}} = \frac{1}{T} \int d^3r \left(\eta_{ilmn} \dot{u}_{il} \dot{u}_{mn} + \frac{1}{4\pi} \xi_{il} \dot{E}_i \dot{E}_l + 2\psi_{i,lm} \dot{E}_i \dot{u}_{lm} \right). \quad (39.5)$$

Тензор третьего ранга $\psi_{i,lm}$ можно назвать *тензором пьезоэлектрической вязкости*. Он обладает такой же симметрией, как и тензор пьезоэлектрических модулей.

Зная выражение (39.5) для $\dot{\mathcal{S}}$, легко найти, например, коэффициент поглощения звука в пьезодиэлектриках. Ограничиваясь наименьшим приближением по параметру

$$\gamma/\omega \ll 1, \quad (39.6)$$

решим сначала систему уравнений теории упругости и электродинамики (2.17)–(2.19), описывающих распространение звука в пьезоэлектрике, с отброшенными диссипативными членами, а затем подставим полученное решение в выражение

$$\gamma = 2T \overline{\dot{\mathcal{S}}} / \rho \omega^2 u_0^2 \mathcal{V}$$

для коэффициента поглощения. Производя усреднение по периоду звука, получаем

$$\gamma = \frac{1}{\rho} \left(\eta_{ilmn} q_i q_m e_l e_n + \frac{\xi_{il}}{4\pi} q_i q_l \left| \frac{\varphi_0}{u_0} \right|^2 + 2\psi_{i,lm} q_i q_l e_m \frac{\varphi_0}{u_0} \right). \quad (39.7)$$

Отношение амплитуды электростатического потенциала в звуковой волне φ_0 к амплитуде вектора упругого смещения u_0 , согласно второму уравнению (2.21), равно

$$\varphi_0/u_0 = -4\pi\beta_{i,lm} q_i q_l e_m / \varepsilon_{ab} q_a q_b.$$

Если поляризация и направление волнового вектора звука таковы, что его распространение сопровождается появлением переменной добавки к температуре, то полный коэффициент поглощения есть сумма выражения (39.7) и выражения (27.32), которое определяет вклад в поглощение за счет процессов теплопроводности.

Чтобы вычислить тензор пьезоэлектрической вязкости $\psi_{i,lm}$, надо подставить в выражение (28.14) для фонового вклада в тензор упругих напряжений добавку к функции распределения (24.16), обусловленную переменным электрическим полем. Это дает

$$\psi_{i,lm} = \frac{\hbar^2}{T} \int d\xi_k \Omega M_{lm} N_0 (N_0 + 1) \hat{J}^{-1} \Omega N_0 (N_0 + 1) (\Lambda'_i - \langle \Lambda'_i \rangle). \quad (39.8)$$

Поскольку оператор \hat{J}^{-1} — симметричный, это выражение можно переписать также в виде

$$\psi_{i,lm} = \frac{\hbar^2}{T} \int d\xi_k \Omega (\Lambda'_i - \langle \Lambda'_i \rangle) N_0 (N_0 + 1) \hat{J}^{-1} \Omega M_{lm} N_0 (N_0 + 1). \quad (39.9)$$

Если записать третий член в подынтегральном выражении (39.5) в виде полусуммы слагаемых (39.8) и (39.9), то все выражение можно представить в виде

$$\begin{aligned} \dot{\mathcal{S}} = & \frac{\hbar^2}{T^2} \int d^3r \int d\xi_k \Omega \left[M_{il} \dot{u}_{il} + \dot{E}_l (\Lambda'_i - \langle \Lambda'_i \rangle) \right] \times \\ & \times N_0 (N_0 + 1) \hat{J}^{-1} \Omega \left[M_{mn} \dot{u}_{mn} + \dot{E}_m (\Lambda'_m - \langle \Lambda'_m \rangle) \right] N_0 (N_0 + 1). \end{aligned} \quad (39.10)$$

Поскольку оператор \hat{J}^{-1} существенно положителен, выражение (39.5) также положительно, как и должно быть.

Оценки тензора пьезоэлектрической вязкости получаются стандартным образом и (если считать, что трехфононные процессы обеспечивают сходимость интеграла по d^3k) дают

$$\psi \simeq \frac{T\tau}{M^{1/2} v a^{3/2}}$$

при $T \gg \Theta$ и

$$\psi \simeq \frac{T^4 \tau_N \bar{a}^{3/2}}{M^{1/2} v^4 \hbar^3} \simeq \frac{T^4 \tau_N}{\rho^{1/2} v^4 \hbar^3}.$$

при $T \ll \Theta$. Если подставить сюда оценки для соответ-

ствующих времен релаксации, мы получим

$$\psi \simeq \frac{\bar{M}^{1/2}}{a^{1/2}} \quad (T \gg \Theta), \quad (39.11)$$

$$\psi \simeq \frac{\bar{M}^{1/2}}{a^{1/2}} \frac{\Theta}{T} \quad (T \ll \Theta). \quad (39.12)$$

На основании этих оценок и оценок коэффициента ξ (см. §. 24) можно заключить, что коэффициент поглощения низкочастотного звука в пьезоэлектрических диэлектриках также зависит от температуры и имеет тот же порядок величины, что и в непьезоэлектриках. Однако его угловая зависимость выглядит, вообще говоря, более сложным образом.

Обсудим особенности диэлектрической релаксации в пьезоэлектриках. Типичная постановка эксперимента заключается в том, что пьезоэлектрик помещается в однородное или же слабонеоднородное переменное электрическое поле и измеряется мнимая часть его диэлектрической проницаемости. Последняя же определяется как коэффициент, фигурирующий в линейном соотношении, связывающем \dot{E} и D' — диссипативную часть электростатической индукции.

Чтобы вычислить этот коэффициент, нужно из уравнений (39.4) исключить производную от тензора деформации u_{ii} . Для этого нужно воспользоваться уравнениями теории упругости (в которых, как указывалось выше, можно отбросить диссипативные члены) или, в случае простейшей геометрии, задать граничные условия для тензора напряжений σ_{ii} на поверхности диэлектрика. Последние, естественно, формулируются по-разному, в зависимости от того, является ли поверхность свободной или находится в контакте с другими телами. Таким образом, скорость диэлектрической релаксации в пьезоэлектрике зависит, в частности, от граничных условий, которым удовлетворяют упругие напряжения.

Тем не менее, если переменное электрическое поле остается однородным в пределах диэлектрика, при $\omega \tau_N \ll 1$ можно получить общие заключения о характере частотной и температурной зависимости диэлектрических потерь, анализируя выражения для коэффициентов ξ_{ii} ,

η_{ilm} и $\psi_{i,lm}$. Порядковые оценки для потерь получаются такими же, как и для непьезоэлектриков.

Если же поле неоднородно, то в пьезоэлектрических кристаллах оно создает переменные градиенты температуры, так что возникают потери за счет теплопроводности. В совершенных кристаллах при достаточно низких частотах ω они могут оказаться гораздо больше всех прочих потерь, так как экспоненциально растут при понижении температуры.

§ 40. Электроакустическое эхо

До сих пор мы изучали такие явления, когда отклик диэлектрика на внешнее воздействие следовал непосредственно за этим воздействием и при его выключении затухал за сравнительно короткое время. Существует, однако, обширный класс явлений, когда отклик макроскопической системы на воздействие наблюдается не сразу, а по истечении некоторого времени, в течение которого система ведет себя макроскопически как невозмущенная.

Внешнее воздействие в этом случае может представлять собой, например, серию из двух (или большего числа) импульсов высокочастотного электрического поля. Непосредственно после каждого импульса наблюдается быстро затухающее последствие, о котором говорилось выше. Однако через время порядка промежутка между импульсами в диэлектрике возникает отклик (например, опять-таки в виде импульса высокочастотного поля), который может быть зарегистрирован.

Явления такого типа получили название эхо¹⁾. В диэлектрике эхо обычно связано с генерацией высокочастотным электрическим полем акустических колебаний; потому оно получило название *электроакустического эха*.

Опишем простейший механизм возникновения электроакустического эха в диэлектриках²⁾. Рассмотрим со-

¹⁾ Впервые эхо обнаружил и объяснил Хан (E. L. Hahn, 1950) на системе ядерных спинов. Электроакустическое эхо было открыто экспериментально С. Н. Поповым и Н. Н. Крайник и А. Р. Кеселем, И. А. Сафиним и А. М. Гольдманом (1970).

²⁾ Излагаемые теоретические соображения были сформулированы впервые Кегелем и Голдом (W. H. Kegel, R. W. Gold, 1965) применительно к эху на плазменных волнах.

вокупность большого числа макроскопических частиц диэлектрика, слабо связанных друг с другом. Речь здесь может идти о диэлектрическом порошке; значительное число опытов по наблюдению акустоэлектрического эха и было поставлено на порошках. Каждая частица представляет собой акустический резонатор, в котором имеется некоторый дискретный набор собственных колебаний. Собственные частоты будем обозначать Ω_λ , где λ означает совокупность двух чисел — номера частицы диэлектрика и номера колебательной моды этой частицы.

Пусть в момент $t = 0$ начал действовать импульс внешнего электрического поля с частотой ω . Предположим, что при $t < 0$ акустические колебания в частицах не были возбуждены¹⁾. Если импульс имеет конечную продолжительность t_i , в нем присутствуют компоненты Фурье в интервале $\Delta\omega$ порядка $1/t_i$ вблизи центральной частоты ω . Импульс поля возбуждает акустические колебания с частотами Ω_λ , лежащими в интервале $\Delta\omega$. Упругие смещения в этих колебаниях изменяются со временем по закону

$$\operatorname{Re} \mu_\lambda^{(0)} \exp(-i\Omega_\lambda t). \quad (40.1)$$

В этом выражении величины $\mu_\lambda = \mu_\lambda^{(0)} \exp(-i\Omega_\lambda t)$ играют роль нормальных координат, описывающих колебательные состояния λ . Они аналогичны величинам μ_{kj} , введенным в § 3. Только там они множились на функции координат, имеющие вид плоских волн, а здесь, чтобы получить выражение для упругих смещений, их надо множить на некоторые координатные функции $\Phi^{(\lambda)}(r)$, зависящие от формы диэлектрической частицы и номера собственного колебания, так что зависимость упругого смещения от координат и времени дается выражением $u(r, t) = \operatorname{Re} \mu(t) \Phi^{(\lambda)}(r)$. Сказанное означает, что в отношении реакции на внешнее поле совокупность диэлектрических частиц ведет себя в первом приближении как система невзаимодействующих гармонических осцилляторов.

¹⁾ В наших рассуждениях мы пренебрегаем слабыми тепловыми флуктуациями, всегда существующими при конечных температурах.

Мы считаем, что отклик этой системы на внешнее возмущение указанного вида, который может наблюдаться, скажем, в виде сигнала высокочастотного электрического поля¹⁾, пропорционален сумме

$$\mathcal{M}(t) = \operatorname{Re} \sum_\lambda \mu_\lambda^{(0)} \exp(-i\Omega_\lambda t). \quad (40.2)$$

Рассмотрим поведение этой величины как функции t .

Частоты возбужденных колебаний Ω_λ немного различаются. Это различие мы опишем следующим образом. Перепишем выражение (40.2) в виде²⁾

$$\mathcal{M}(t) = \operatorname{Re} e^{-i\omega t} \sum_\lambda \mu_\lambda^{(0)} e^{-i\varphi_\lambda(t)}.$$

Иными словами, отличие $\Delta\Omega_\lambda$ данной частоты Ω_λ от средней частоты ω будем описывать, вводя медленно изменяющуюся со временем фазу колебания

$$\varphi_\lambda(t) = \Delta\Omega_\lambda t, \quad \Delta\Omega_\lambda \equiv \Omega_\lambda - \omega.$$

Небольшое различие в частотах приводит к тому, что фазы φ_λ , фиксированные моментом включения импульса, со временем расходятся, т. е. отдельные колебания в сумме (40.2) хаотизируются, становятся некогерентными. Время потери когерентности имеет порядок $1/\Delta\omega$, т. е. порядок длительности импульса t_i . По истечении этого времени система макроскопически ведет себя как невозмущенная, хотя фактически колебания каждого из возбужденных осцилляторов продолжают продолжаться. Можно сказать, что система в течение некоторого времени «хранит память» о подействовавшем на нее импульсе. Как мы сейчас увидим, для того чтобы эта память проявилась в виде макроскопического отклика, на систему осцилляторов достаточно подействовать вторым таким же импульсом. Явление

¹⁾ Возникающего например, за счет пьезоэлектрического эффекта, если диэлектрик пьезоэлектрический.

²⁾ Поскольку, различные колебательные моды взаимодействуют с высокочастотным полем по-разному, отдельные члены суммы (40.2) следовало бы домножать на коэффициенты, зависящие от λ и учитывающие это обстоятельство. Вместо этого мы считаем, что величины $\mu_\lambda^{(0)}$ нормированы таким образом, что эти коэффициенты уже включены в определение колебательных координат $\mu_\lambda^{(0)}$.

ние, которое при этом возникает, получило специальное название *двухимпульсного эха*¹⁾.

Итак, пусть в момент времени t_1 на систему подействовал второй импульс внешнего поля той же самой частоты и длительности. После окончания второго импульса каждое колебательное состояние λ в линейном приближении будет описываться выражением

$$\operatorname{Re} \left[\mu_{\lambda}^{(0)} e^{-i\Omega_{\lambda} t} + \mu_{\lambda}^{(1)} e^{-i\Omega_{\lambda} (t-t_1)} \right], \quad (40.3)$$

где $\mu_{\lambda}^{(1)}$ — постоянные, пропорциональные амплитуде второго импульса.

В результате хаотизации фаз отклик на второй импульс обращается в нуль за время t_i (так же, как и после первого импульса). Если бы система осцилляторов была линейной, то спустя время t_i после второго импульса по наблюдению суммарного смещения (40.2) мы не могли бы сделать вывода о том, возбуждены ли отдельные осцилляторы. Ситуация, однако, меняется, если каждый из осцилляторов обладает хотя бы слабым ангармонизмом.

Постараемся понять, какую роль тут играет ангармонизм. Начнем с того, что, не останавливаясь на деталях, укажем, как в принципе можно получить уравнения движения непосредственно для колебательных координат μ_{λ} . Будем исходить из уравнений теории упругости (6.42), учитывающих ангармонизм. Вычислим производные

$$\frac{\partial u^{(\lambda)}}{\partial r_i} = \mu^{(\lambda)} \frac{\partial \Phi^{(\lambda)}(r)}{\partial r_i}$$

и подставим их в уравнения движения (6.42). Затем проинтегрируем получившиеся уравнения по всему объему, в котором функции $\Phi^{(\lambda)}(r)$ отличны от нуля. В результате

¹⁾ Такое название, в частности, имеет целью подчеркнуть различие между данным явлением и явлением так называемого трехимпульсного эха в порошках диэлектриков (обнаруженным С. Н. Поповым, Н. Н. Крайник и Г. А. Смоленским и В. М. Березовым, Я. Я. Асадулиным, В. Д. Корепановым и В. С. Романовым, 1975). Последнее характеризуется чрезвычайно длительным (достигающим многих часов) сохранением «памяти», возникающей в результате совместного действия первых двух импульсов.

получится уравнение, левая часть которого пропорциональна μ_{λ} , а правая представляет собой полином по степеням колебательной координаты μ_{λ} . Поскольку величины $\partial u^{(\lambda)} / \partial r_i$ (по которым нужно дифференцировать U , чтобы получить правую часть (6.42)) пропорциональны μ_{λ} в первой степени, степень этого полинома на единицу меньше, чем порядок ангармонического члена U_n , который удержан в разложении (6.39) плотности внутренней энергии U .

В гармоническом приближении следует удержать в правой части только линейный член, что дает для μ_{λ} зависимость от времени вида (40.1). Чтобы проследить, какую роль играет ангармонизм, будем изучать движение каждого осциллятора λ методом теории возмущений. Иначе говоря, ангармонические члены в правой части будем рассматривать как внешнюю силу, которая получается, если в них подставить координату $\mu_{\lambda}(t)$, вычисленную в гармоническом приближении.

Явление эха определяется ангармонизмом не ниже четвертого порядка¹⁾, учетом которого мы и ограничимся. Это значит, что интересующая нас ангармоническая сила в правой части уравнений для μ_{λ} пропорциональна кубу амплитуды (40.3).

Возводя в куб это выражение, мы обнаруживаем, что там, в частности, присутствует слагаемое вида

$$\operatorname{Re} \mu_{\lambda}^{(0)} e^{-i\Omega_{\lambda} t} \mu_{\lambda}^{(1)*2} e^{2i\Omega_{\lambda} (t-t_1)} = \operatorname{Re} \mu_{\lambda}^{(0)} \mu_{\lambda}^{(1)*2} e^{i\Omega_{\lambda} (t-2t_1)}. \quad (40.4)$$

Под действием такой силы возникает добавка к колебательным координатам μ_{λ} , пропорциональная этой силе. Она-то и определяет явление эха. Мы видим, что выражение (40.4) описывает колебательное движение, обращенное во времени по отношению к (40.2) — изменился знак у временной экспоненты. Кроме того, оно сдвинуто по отношению к моменту $t=0$ на промежуток $2t_1$.

В результате оказывается, что в момент $t=2t_1$ фазы всех экспонент (40.4) обратились в нуль: обращение ко-

¹⁾ Качественно те же самые выводы дал бы и учет ангармонизма третьего порядка во втором приближении теории возмущений.

лебательного движения во времени привело к восстановлению когерентности. Отклик системы осцилляторов, пропорциональный сумме экспонент (40.4), наблюдается в виде импульса высокочастотного электрического поля. Это и есть импульс электроакустического эха, который следует через время $2t_1$ после первого импульса. Амплитуда импульса эха должна быть, очевидно, пропорциональна амплитуде первого импульса и квадрату амплитуды второго импульса, а также константе решеточного ангармонизма (вообще говоря, малой).

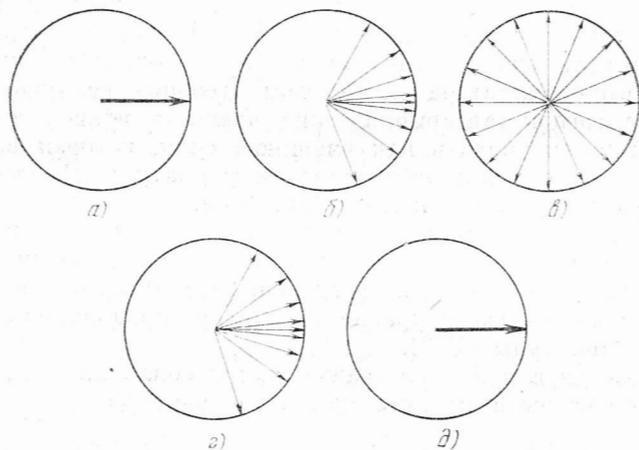


Рис. 8.

Чтобы представить себе нагляднее механизм электроакустического эха, обратимся к рис. 8. На рис. 8, а изображены фазы колебаний в момент $t = 0$. Все они равны. На рис. 8, б представлены фазы колебаний по истечении времени порядка t_1 . Видно, что началось расхождение фаз колебаний, хотя какая-то «фазовая память» еще сохранена. Рис. 8, в изображает фазы колебаний по истечении времени, много большего, чем t_1 . Фазы колебаний распределены равномерно по всему интервалу от 0 до 2π ; фазовая память исчезла.

Рис. 8, г изображает начало процесса схождения фаз колебаний, обусловленного действием второго импульса,

а рис. 8, д — окончание этого процесса, соответствующее формированию импульса эха.

Из сказанного вытекает важное условие формирования эха:

$$t_1 \lesssim 1/\gamma. \quad (40.5)$$

Оно означает, что интервал между двумя импульсами не должен превышать времени затухания звуковых колебаний $1/\gamma$.

Электроакустическое эхо может наблюдаться не только на малых частицах, а и на крупных монокристаллах диэлектриков. В этом случае оно связано с возбуждением бегущих звуковых волн, особенности которого мы не будем здесь обсуждать. Отметим только, что в условие его наблюдения по-прежнему входит неравенство (40.5), однако со следующей любопытной оговоркой.

В предыдущих разделах данной главы мы видели, что в коэффициент затухания высокочастотного звука дают заметный вклад как неупругие процессы, т. е. взаимодействие с тепловыми фононами, так и упругие процессы. Последние представляют собой рассеяние звуковых волн на различных дефектах и, так же как и собственно поглощение, приводят к затуханию амплитуды падающей звуковой волны. В процессах рассеяния как частота, так и фаза колебаний сохраняются¹⁾.

Это значит, что при обращении времени, происходящем под действием второго импульса, рассеянные звуковые волны вновь собираются в плоскую волну (распространяющуюся в обратном направлении) и, тем самым, участвуют в формировании сигнала эха. А это, в свою очередь, означает, что в критерии (40.5) фигурирует только неупругий вклад в коэффициент затухания звука γ . Тем самым, опыты по электроакустическому эху представляют возможность для разделения вкладов обоих типов.

¹⁾ Последнее утверждение становится очевидным, если рассматривать рассеяние классически — как испускание звуковых волн дефектом, совершающим вынужденные колебания под действием падающей звуковой волны. Нужно, однако, иметь в виду, что фазовые соотношения теряются при квантовом рассмотрении рассеяния в терминах фононных чисел заполнения, проделанном в § 7.

§ 41. Нелинейное поглощение высокочастотного звука¹⁾

Пока в этой главе шла речь только о поглощении звука достаточно малой интенсивности. При этом коэффициент поглощения от интенсивности не зависит, уравнение (27.37), определяющее плотность энергии $E^{(s)}$ как функцию координат и времени, является линейным, а о режиме распространения звука в этой ситуации говорят как о линейном режиме.

В связи с возможностями генерации интенсивных высокочастотных звуковых волн представляет интерес и задача о поглощении звука достаточно большой интенсивности и об изучении зависимости коэффициента поглощения от интенсивности. Разумеется, если деформация сплошной среды при распространении звука велика, так что теряет применимость линейная теория упругости, нелинейные эффекты могут быть весьма значительными. Такие большие интенсивности мы рассматривать не будем. Деформация u_{ii} , создаваемая звуковой волной, будет считаться малой: $|u_{ii}| \ll 1$. Будут изучаться гармонические (или почти гармонические) звуковые волны, частота которых удовлетворяет неравенству

$$\omega\tau \gg 1. \quad (41.1)$$

В этом случае в поглощении звука могут проявляться своеобразные нелинейные эффекты, связанные с созданием неравновесности в небольшой группе фононов, находящейся в резонансе со звуковой волной и потому определяющей поглощение звука. Групповая скорость g_x таких резонансных фононов в направлении распространения звука почти равна фазовой скорости звука v . Резонансный характер взаимодействия звуковой волны с такими фононами приводит к тому, что параметром нелинейности оказывается не безразмерный тензор деформации, а его произведение на большой параметр (41.1). Благодаря этому даже при малых деформациях параметр нелинейности может оказаться большим.

¹⁾ В данном разделе излагаются результаты, полученные В. Д. Кагацом (1977).

Будем изучать нелинейное поглощение такого звука, частота которого $\omega_a(q) \equiv \omega$ удовлетворяет соотношению

$$\omega_a(q) + \Omega_j(k) = \Omega_j(k+q), \quad (41.2)$$

или, с учетом малости q , $vq = g_j(k)q$. Температуру считаем достаточно низкой ($T \ll \Theta$), иначе сильному неравенству (41.1) было бы удовлетворить чрезвычайно трудно. В этом случае оптические фононы не возбуждены, следовательно, колебательная ветвь j тепловых фононов, ответственных за поглощение, — акустическая.

Выше, при построении линейной теории поглощения звука, мы пользовались двумя различными методами, приводившими к одинаковым результатам: звуковая волна могла рассматриваться либо как внешнее поле, зависящее от координат и времени по гармоническому закону, либо как поток фононов с частотой $\omega_a(q)$. В нелинейной теории ситуация меняется: если речь идет о звуковой волне с фиксированными частотой и направлением распространения, только первый из этих методов ведет к цели. Причины этого мы обсудим в конце раздела. А пока в духе первого метода будем считать, что частоты фононов определяются выражениями (28.6) и (28.2), где тензор деформации в звуковой волне есть функция координаты x (ось x — направление распространения звука) и времени t .

Неравновесную функцию распределения фононов $N = N_0(\tilde{\Omega}) + \Delta N$ найдем из кинетического уравнения, которое запишется в виде

$$\frac{\partial N_0(\tilde{\Omega})}{\partial t} + \frac{\partial \Delta N}{\partial t} + \frac{\partial \tilde{\Omega}}{\partial k} \frac{\partial \Delta N}{\partial r} - \frac{\partial \tilde{\Omega}}{\partial r} \frac{\partial \Delta N}{\partial k} + \hat{I} \Delta N = 0. \quad (41.3)$$

Ниже мы убедимся, что добавка ΔN мала по сравнению с $N_0(\tilde{\Omega})$. Это позволяет линеаризовать по ΔN оператор столкновений. В выражении для линеаризованного оператора должны, вообще говоря, фигурировать возмущенные фононные частоты $\tilde{\Omega}$. Однако их можно заменить невозмущенными частотами Ω , так как учет отличия между теми и другими дал бы относительную поправку к оператору столкновений порядка деформации u_{ii} ; учет таких поправок лежит за пределами точности расчета. Ниже мы увидим, что функция ΔN является острой функцией

углов, поэтому к ней применимы соображения § 34, позволяющие записать оператор столкновений в приближении времени релаксации: $\hat{I}\Delta N = \Delta N/\tau$, где в качестве τ следует взять выражение (34.13). Наконец, вычисляя производную по времени от равновесной функции распределения, мы имеем

$$\frac{\partial}{\partial t} N_0(\tilde{\Omega}) = -N_0(\tilde{\Omega}) [N_0(\tilde{\Omega}) + 1] \frac{\hbar}{T} \frac{\partial \tilde{\Omega}}{\partial t}.$$

На синусоидальное изменение звукового поля в пространстве и во времени налагается медленное пространственное затухание интенсивности звука. Условие медленности означает малость коэффициента пространственного поглощения звука $\Gamma = \gamma/g$ по сравнению с волновым вектором q . Уравнение (41.3) для функции ΔN отражает оба типа пространственного изменения. Далее мы, однако, будем считать, что можно пренебречь пространственной производной, обусловленной затуханием звука, поскольку соответствующий член в уравнении (41.3) меньше релаксационного члена $\Delta N/\tau$ в силу неравенства

$$g\Gamma\tau = \gamma\tau \ll 1. \quad (41.4)$$

Действительно, в линейном режиме $\gamma\tau$ порядка отношения $\hbar\omega/T$, как показано в § 33; при переходе к нелинейному режиму коэффициент поглощения только уменьшается (см. ниже).

Это позволяет применить для расчета поглощения прием, которым мы уже пользовались в § 27. При решении кинетического уравнения будем считать тензор деформации строго периодической функцией от разности $x_1 = x - vt$, где v — фазовая скорость звука. Коэффициент поглощения вычислим, подставив полученное решение в выражение (11.22) $T\dot{S}$ и поделив эту величину на плотность энергии упругих колебаний $E^{(s)}$.

В описанном приближении кинетическое уравнение (41.3) приобретает вид

$$(\tilde{g}_x - v) \frac{\partial \Delta N}{\partial x_1} - \frac{\partial \Delta \tilde{\Omega}}{\partial x_1} \frac{\partial \Delta N}{\partial k_x} + \frac{1}{\tau} \Delta N = \tilde{N}_0(\tilde{N}_0 + 1) \frac{\hbar v}{T} \frac{\partial \Delta \tilde{\Omega}}{\partial x_1}, \quad (41.5)$$

где $\tilde{g}_x = \partial \tilde{\Omega} / \partial k_x$. В линейной теории поглощения мы мог-

ли пренебречь вторым слагаемым в левой части, которое теперь должны учитывать: оно играет существенную роль в резонансной области вблизи значения k_x , которое определяется условием

$$\tilde{g}_x(k) = v.$$

Ниже мы убедимся в том, что размеры резонансной области малы. Сохраняя нелинейное слагаемое в левой части (41.5), мы учтем влияние звука на движение резонансных фононов — источник нелинейности.

Уравнение характеристик уравнения (41.5) имеет вид

$$\frac{dx_1}{\tilde{g}_x - v} = -\frac{dk_x}{\partial \tilde{\Omega} / \partial x_1}. \quad (41.6)$$

Оно имеет интеграл энергии

$$\Omega_1 \equiv \tilde{\Omega} - k_x v = \text{const}; \quad (41.7)$$

величина Ω_1 сохраняется при движении фононных волновых пакетов, рассматриваемых, в соответствии с (4.11), как классические частицы. Эти частицы совершают движение в поле, которое является пространственно-периодическим, стационарным в движущейся системе координат $x_1 = x - vt$; соответственно, величина $\hbar\Omega_1$ имеет смысл энергии фононов в этой системе.

Метод решения уравнения (41.5) состоит в переходе к переменной (41.7) вместо k_x . В новых переменных кинетическое уравнение запишется в виде

$$(\tilde{g}_x - v) \frac{\partial \Delta N}{\partial x_1} + \frac{1}{\tau} \Delta N = v \frac{\partial \tilde{N}_0}{\partial x_1}, \quad (41.8)$$

где производная $\partial \Delta N / \partial x_1$ берется при постоянном Ω_1 , а скорость \tilde{g}_x следует считать функцией x_1 и величины Ω_1 , определяемой соотношением (41.7). Нам достаточно определить траектории фононных волновых пакетов¹⁾, т. е. зависимость $k_x(x_1)$ или, что то же самое, $\tilde{g}_x(x_1)$, в резонансной области, когда $|\tilde{g}_x - v| \ll v$. Разлагая в этой

¹⁾ Ниже для краткости мы будем говорить просто о траекториях фононов.

области $\tilde{\Omega} - k_x v$ по степеням малой разности $g_x - v$, мы получаем уравнение траектории

$$\Delta\Omega + \frac{1}{2\alpha}(g_x - v)^2 = \Omega_2. \quad (41.9)$$

Здесь и далее мы будем считать x -компоненту групповой скорости равной $g_x = \partial\Omega/\partial k_x$, пренебрегая поправкой к ней за счет $\Delta\Omega$, имеющей относительную малость порядка деформации u_{ii} . Аналогичное приближение мы делаем при вычислении производной

$$\alpha = \partial^2\Omega/\partial k_x^2,$$

которая берется при значении $k_x = k_x^{(0)}$, определяемом из условия $g_x(k) = v$. Наконец, Ω_2 есть величина, связанная с Ω_1 соотношением

$$\Omega_2 = \Omega_1 - \Omega(k_x^{(0)}) + k_x^{(0)}v.$$

Величина $\Delta\Omega$ в звуковой волне есть

$$\Delta\Omega = \Delta\Omega_0 \cos qx_1; \quad (41.10)$$

$\hbar\Delta\Omega_0$, таким образом, есть амплитуда изменения энергии фононов, движущихся в поле звуковой волны. Анализируя уравнение (41.9) вместе с (41.10), мы можем заключить, что все фононы, принадлежащие к резонансной области, можно подразделить на захваченные и пролетные. Первые — это те, у которых величина Ω_2 удовлетворяет условию

$$|\Omega_2| < \Delta\Omega_0. \quad (41.11)$$

Ситуация, соответствующая этому условию, изображена на рис. 9. На рисунке мы видим синусоидальную зависимость величины $\Delta\Omega(x_1)$ от волновой координаты x_1 . Прямая, параллельная оси абсцисс, соответствует значению Ω_2 , которое в случае, изображенном на рисунке, положительно. Уравнение (41.9) может иметь решение только при таких значениях x , при которых график зависимости $\Delta\Omega(x_1)$ лежит ниже этой прямой. Это означает, что такие фононы могут занимать ограниченный пространственный интервал от $x_1 = x^{(1)}$ до $x_1 = x^{(2)}$. Это мы и имели в виду, утверждая, что фононы с $|\Omega_2| < \Delta\Omega_0$ зах-

вачены полем деформационного потенциала, созданного звуковой волной.

Захваченные фононы совершают периодические колебания, отражаясь от стенок потенциальных ям в точках

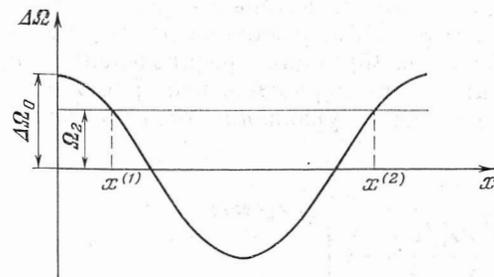


Рис. 9.

поворота $x^{(1)}$ и $x^{(2)}$. Оценим частоту колебаний ω_0 . Согласно (41.9), скорость колебательного движения

$$g_0 \simeq \sqrt{\alpha \Delta\Omega} \simeq \Omega k^{-1} \sqrt{|u_{ii}|} \simeq \bar{v} \sqrt{|u_{ii}|}. \quad (41.12)$$

Частота ω_0 равна скорости g_0 , деленной на длину волны, так что

$$\omega_0 \simeq q \bar{v} \sqrt{|u_{ii}|}. \quad (41.13)$$

Говорить о колебании захваченных фононов в поле звуковой волны можно, только если частота ω_0 заметно превышает их обратное время свободного пробега. Мы будем далее предполагать выполнение соответствующего неравенства

$$\omega_0 \tau \gg 1. \quad (41.14)$$

У пролетных фононов

$$\Omega_2 > \Delta\Omega_0. \quad (41.15)$$

Их движение вдоль оси x_1 инфинитно и представляет собой суперпозицию поступательного движения и колебаний под действием деформационного потенциала звуковой волны.

Условимся называть резонансными те фононы, чья функция распределения заметно искажается полем звуковой волны. В этом смысле все захваченные фононы —

резонансные. Что же касается пролетных, то они относятся к резонансным, если величины Ω_2 и $\Delta\Omega_0$ одного порядка. В этом случае частота колебательной составляющей их движения тоже имеет порядок ω_0 .

Граничные условия, которым следует подчинить решение уравнения (41.8), различны для пролетных и захваченных фононов. Функция распределения пролетных частиц должна быть периодической функцией x_1 . Соответствующее решение уравнения (41.8) есть:

$$\Delta N(x_1) = \left[\exp\left(\int_0^{2\pi/q} \frac{dx'_1/\tau}{g_x - v}\right) - 1 \right]^{-1} x_1^{1+2\pi/q} \int_{x_1}^{x'_1} \frac{dx'_1 v}{g_x - v} \frac{\partial \tilde{N}_0}{\partial x'_1} \exp\left(\int_{x_1}^{x'_1} \frac{dx''_1/\tau}{g_x - v}\right).$$

Для резонансных фононов показатели экспонент в этом выражении порядка $1/\omega_0\tau$ и экспоненты можно разложить по этому малому параметру:

$$\Delta N(x_1) = \left(\int_0^{2\pi/q} \frac{dx'_1/\tau}{g_x - v}\right)^{-1} x_1^{1+2\pi/q} \int_{x_1}^{x'_1} \frac{v dx'_1}{g_x - v} \frac{\partial \tilde{N}_0}{\partial x'_1} \int_{x_1}^{x'_1} \frac{dx''_1/\tau}{g_x - v}. \quad (41.16)$$

Здесь мы учли, что интеграл от первого члена разложения дает нуль. Действительно, звуковая волна — периодическая, синусоидальная и при надлежащем выборе начала отсчета (как, например, на рис. 9) функция $\Delta\Omega(x_1)$, а вместе с ней и функция g_x есть четная функция x_1 , в то время как $\partial\tilde{N}_0/\partial x_1$ — нечетная.

Граничные условия для захваченных фононов требуют равенства вблизи точек поворота $x^{(1,2)}$ функций распределения фононов, движущихся в прямом и обратном направлениях — им соответствуют верхний и нижний знаки в выражении, вытекающем из (41.9):

$$g_x - v = \pm \sqrt{2\alpha(\Omega_2 - \Delta\Omega)}.$$

В наименьшем приближении по $1/\omega_0\tau$ функция распределения захваченных фононов, удовлетворяющая этим ус-

ловиям, есть

$$\Delta N(x_1) = \int_{x^{(1)}}^{x_1} \frac{dx'_1 v}{g_x - v} \frac{\partial \Delta \tilde{N}_0}{\partial x_1}, \quad (41.17)$$

где $x^{(1)} \leq x_1$ — ближайшая со стороны меньших x_1 точка поворота.

Убедимся, что неравновесная добавка к функции распределения удовлетворяет условию

$$|\Delta N| \ll \tilde{N}_0. \quad (41.18)$$

Условие малости деформации предполагает, в частности, выполнение неравенства для частот тепловых фононов $|\Delta\Omega| \ll \Omega \simeq T/\hbar$. Мы имеем по порядку величины при этих частотах

$$\frac{\partial \tilde{N}_0}{\partial x_1} \simeq \frac{\hbar}{T} \frac{\partial \Delta\Omega}{\partial x_1}. \quad (41.19)$$

Оценивая знаменатели в интегралах (41.16) и (41.17) по формуле (41.12), мы находим, что

$$|\Delta N| \simeq \sqrt{\hbar \Delta\Omega/T} \ll 1. \quad (41.20)$$

Между тем, в существенной области фононных частот $\tilde{\Omega}$ функция $N_0(\tilde{\Omega}) \geq 1$. Таким образом, неравенство (41.18) доказано.

Используя малость ΔN , мы можем вычислять скорость диссипации плотности энергии по формуле

$$T\dot{S} = T \int d\xi_k \frac{\Delta N}{N_0(N_0+1)} \hat{T} \Delta N = T \int d\xi_k \frac{\Delta N^2}{\tau N_0(N_0+1)}. \quad (41.21)$$

При оценке этого выражения будем интегрировать по отдельности по dk_x и по $d^2k_\perp = dk_y dk_z$. Интегрирование по d^2k_\perp дает порядковый множитель k_T^2 . Интегрирование по dk_x дает порядковый множитель k_T , умноженный на относительный объем резонансной области, равный, как видно из формулы (41.12), $\sqrt{|u_{il}|}$. Оценивая ΔN из (41.20), мы находим, что

$$T\dot{S} \simeq k_T^3 |u_{il}|^{1/2} \hbar \Delta\Omega/\tau \simeq k_T^3 T |u_{il}|^{3/2}/\tau.$$

Поделив это выражение на плотность энергии $E^{(s)}$, мы получаем окончательно

$$\gamma \simeq \frac{\omega T^4}{\rho v^5 \hbar^3} \frac{1}{\omega_0 \tau} \quad (41.22)$$

или

$$\gamma = \gamma_0 / \omega_0 \tau, \quad (41.23)$$

где γ_0 здесь обозначает линейный коэффициент поглощения, оценка которого дается выражением (33.13). Таким образом, критерием сильной нелинейности в поглощении звука служит неравенство (41.14); если оно выполнено, коэффициент поглощения убывает обратно пропорционально интенсивности $E^{(s)}$ в степени $1/4$. В обратном предельном случае, при $\omega_0 \tau \ll 1$, второе слагаемое в левой части (41.5) можно отбросить по сравнению с третьим, и мы возвращаемся к линейной теории § 33.

Условие применимости линейной теории можно сформулировать в виде ограничения сверху на интенсивность звука $E^{(s)}$: $E^{(s)} \ll E_c^{(s)}$, где $E_c^{(s)}$ есть критическая интенсивность, при которой $\omega_0 \tau = 1$, равная по порядку величины

$$E_c^{(s)} \simeq \rho \bar{v}^2 / (\omega \tau)^4. \quad (41.24)$$

Соотношение (41.23) теперь можно переписать в следующем виде:

$$\gamma = \gamma_0 (E_c^{(s)} / E^{(s)})^{1/4}. \quad (41.25)$$

Рассмотрим пространственное затухание звуковой волны в режиме нелинейного поглощения. Пусть волна возбуждается на границе упругой сплошной среды ($x=0$) и распространяется в глубь вдоль оси симметрии (ось x). Уравнение, описывающее изменение интенсивности, имеет вид

$$g_x \frac{dE^{(s)}}{dx} + \gamma_0 \left(\frac{E_c^{(s)}}{E^{(s)}} \right)^{1/4} E^{(s)} = 0. \quad (41.26)$$

(Предполагается, что на всем протяжении распространения звука его интенсивность такова, что произведение $\omega_0 \tau \gg 1$, так что для коэффициента поглощения сохраняется силу соотношение (41.25).) Решение этого уравнения

имеет вид

$$E^{(s)}(x) = \left(\sqrt[4]{E^{(s)}(0)} - \sqrt[4]{E_c^{(s)}} \frac{\gamma_0 x}{4g_x} \right)^4, \quad (41.27)$$

т. е. убывание происходит значительно медленнее, чем по экспоненциальному закону типа (27.39). Таким образом, при распространении интенсивного звука в условиях $\omega_0 \tau \gg 1$ имеет место акустическое просветление диэлектрика.

Однако по мере распространения звука его интенсивность, убывая, может достигнуть такого значения, когда неравенство $\omega_0 \tau \gg 1$ перестанет выполняться. При таких значениях x закон затухания (41.27) потеряет силу, а при $\omega_0 \tau \ll 1$ затухание станет экспоненциальным.

Описанный метод расчета нелинейного коэффициента затухания существенно использовал понятие фазы периодических звуковых колебаний. Именно оно позволило выделить группу резонансных фононов, которые при своем движении существенным образом «чувствуют» эту фазу, а затем разделить эту группу на пролетные и захваченные фононы. В свете этого становится понятным сделанное выше утверждение, что в теории нелинейного поглощения звука с фиксированной частотой и направлением распространения сам интенсивный звуковой сигнал рассматривать как поток фононов нельзя: ведь при фононном описании нельзя задать фазу звуковой волны как функцию координат и времени.

При построении линейной теории поглощения ситуация была совсем иной. Мы рассматривали поглощение звука как захват звуковых квантов тепловыми фононами. При этом мы пользовались теорией возмущений, считая функцию распределения тепловых фононов равновесной, неискаженной звуковым потоком. Фазовые соотношения при таком расчете роли не играли, и оба метода расчета — квантовый и классический — приводили к одинаковому результату.

Релаксация в системе акустических фононов, имеющих малую дисперсию скорости

§ 42. Продольная и поперечная релаксация

В настоящей главе мы изучим механизмы установления равновесия в системе акустических фононов с малой дисперсией. В этом случае скорость установления равновесия может характеризоваться не одним, а двумя резко различающимися временами релаксации. Это определяет исключительно своеобразное кинетическое поведение таких систем. Задача об описании их кинетического поведения представляет интерес как с физической точки зрения, так и с точки зрения иллюстрации приложений еще одного метода физической кинетики, с которым мы не сталкивались выше.

Системы, о которых мы собираемся рассказать, могут быть реализованы в кристаллических диэлектриках; в каких именно случаях — мы обсудим в § 49. Однако системой, где такие механизмы установления равновесия проявляются наиболее ярко, является гелий II в фононной области температур, которая, как мы уже указывали, простирается примерно до 0,6 К. Соответственно, все обсуждение мы будем вести применительно к гелию II. С точки зрения структуры фононного спектра это простейшая мыслимая ситуация: имеется одна фононная ветвь, спектр которой изотропен.

Фононный закон дисперсии мы запишем в форме, уже использованной в § 34:

$$\Omega = v k [1 + \xi(k)], \quad (42.1)$$

где v — предельное значение скорости звука при малых k ¹⁾, $\xi(k)$ — функция k , характеризующая дисперсию. Соответственно, групповая скорость звука

$$g(k) = v [1 + \delta(k)], \quad (42.2)$$

¹⁾ В гелии II v равно приблизительно 240 м/с.

где

$$\delta(k) = \xi(k) + k d\xi/dk. \quad (42.3)$$

Как свидетельствуют данные опыта, при всех существенных значениях k дисперсию скорости звука в гелии II можно считать малой. Это значит, что функция $\delta(k)$ удовлетворяет неравенству

$$|\delta(k)| \ll 1. \quad (42.4)$$

Существенная область изменения k — это та область, которая вносит вклад в кинетические явления. Как мы увидим, величина ее зависит от температуры: она представляет собой интервал значений k , простирающийся от нуля до нескольких $k_T = T/\hbar v$.

Как было показано в § 34, характер процессов, в которых могут участвовать фононы, определяется знаком дисперсии скорости звука. В настоящее время получены многочисленные экспериментальные данные, согласно которым дисперсия скорости звука в гелии II положительна, т. е. $\delta(k) > 0$, если k остается меньше некоторой характерной величины k_c ¹⁾. При атмосферном давлении $\hbar v k_c$ составляет несколько градусов, т. е. лежит далеко за пределами фононной области температур.

Если функция $\delta(k)$ положительна и выполняется условие

$$\delta_T T \tau_{\parallel} \hbar^{-1} \gg 1, \quad (42.5)$$

означающее, что обратное время свободного пробега тепловых фононов $1/\tau_{\parallel}$ меньше, чем дисперсионная поправка к их частоте $\hbar^{-1} T \delta_T = \hbar^{-1} T \delta(k_T)$, трехфононные столкновения разрешены законами сохранения и, как показано в § 34, их можно рассматривать по теории возмущений. При этом в силу неравенства (42.4) объем k -пространства, в котором могут находиться волновые векторы фононов, участвующих в таком процессе, оказывается малым. Иными словами, в трехфононном столкновении могут участ-

¹⁾ Описанное поведение дисперсии скорости звука имеет место при нормальном давлении. С повышением давления характерная величина k_c убывает и при критическом давлении около 17 ат обращается в нуль. При больших давлениях фононный спектр в гелии II становится нераспадным во всем интервале k . При давлениях же, несколько меньших критического, возможен «смешанный» случай, когда $k_c < k_T$.

вовать только такие фононы, волновые векторы которых направлены друг относительно друга под достаточно малыми углами. Чтобы убедиться в этом, запишем закон сохранения энергии и импульса при фонон-фононных столкновениях

$$\Omega(k) + \Omega(k') = \Omega(k + k'),$$

подставив в качестве фононного закона дисперсии выражение (42.1). Обозначим угол между векторами k и k' через θ' . Предполагая, что угол θ' мал (что будет оправдано последующими расчетами), разложим $\cos \theta'$ по степеням малого аргумента. Это даст

$$|k + k'| = \sqrt{k^2 + k'^2 + 2kk' \cos \theta'} \approx \sqrt{(k+k')^2 - kk'\theta'^2} \approx k + k' - kk'(k+k')^{-1}\theta'^2/2.$$

В аргументе малой величины $|k + k'| \xi(k + k')$ с той же точностью заменим $|k + k'|$ на $k + k'$. Отсюда

$$\theta'^2 = 2 \frac{k+k'}{kk'} f(k+k', k, k'), \quad (42.6)$$

где

$$f(k'', k, k') = k'' \xi(k'') - k \xi(k) - k' \xi(k'). \quad (42.7)$$

Мы видим, таким образом, что, когда волновые векторы k и k' принимают характерные значения порядка k_T , угол θ' оказывается порядка корня из дисперсионного параметра $\xi_T \equiv \xi(k_T)$. При $k \ll k_c$, когда ¹⁾

$$\xi(k) = \alpha k^2, \quad (42.8)$$

$$f(k+k', k, k') = 3\alpha(k+k')kk'. \quad (42.9)$$

В этом случае $\theta'^2 = 6\alpha(k+k')^2$.

С другой стороны, если один из участвующих в столкновении фононов является длинноволновым, т. е. $k \ll k_T$, а второй — коротковолновым ($k' \simeq k_T$),

$$f(k'', k, k') = k[\xi(k') + k' d\xi/dk'] = kb(k').$$

Для коэффициента поглощения в этом случае получается известное выражение (34.35), а для времени свободного пробега тепловых фононов — оценка (34.36). При малом значении параметра (42.4), удовлетворяющего, однако,

¹⁾ Согласно экспериментальным данным, $\alpha = (1,7 \pm 0,34) \times 10^{-15} \text{ см}^2$ при атмосферном давлении.

неравенству (34.37), что позволяет пользоваться теорией возмущений, эти величины не зависят от b , а стремятся к конечным значениям. Таким образом, мы приходим к важному выводу о том, что сама по себе малость фазового объема отнюдь не влечет за собой малости обратного фононного времени свободного пробега.

Однако малость дисперсии скорости звука и связанная с нею малость фазового объема приводит к тому, что скорость установления равновесия в такой системе характеризуется двумя различными временами. Одно из них есть время τ_{\parallel} , введенное выше. Другое гораздо больше, чем τ_{\parallel} , и его физический смысл мы сейчас поясним.

Представим себе, что внешнее воздействие вывело фононный газ из состояния равновесия, после чего это воздействие было прекращено. Столкновения фононов будут приводить фононную систему в состояние равновесия. Поскольку волновые векторы сталкивающихся фононов почти параллельны, в фононном газе можно выделить два процесса релаксации. Первый, это быстрый процесс релаксации в системе фононов, распространяющихся вдоль данного направления в k -пространстве. Он приводит к установлению неполного термодинамического равновесия, а именно: к тому, что равновесное распределение устанавливается внутри каждой группы фононов с определенным направлением распространения κ в k -пространстве. Это состояние неполного равновесия характеризуется функцией распределения Планка, зависящей от аргумента

$$\frac{\Omega(k) - kV(\kappa)}{T(\kappa)}. \quad (42.10)$$

Здесь мы, следуя Ландау и Халатникову (1949), ввели температуру $T(\kappa)$, зависящую от направления κ . Аналогичным образом, мы считаем, что зависит от κ и дрейфовая скорость $V(\kappa)$. Время установления такого распределения есть, очевидно, τ_{\parallel} , которое мы, соответственно, будем называть *продольным временем релаксации*.

Состояние полного равновесия есть такое состояние, в котором T и V не зависят от направления. Установление полного равновесия происходит путем обмена энергией и импульсом между фононами, распространяющимися вдоль разных направлений. Если бы при столкновениях взаимодействовали фононы, распространяющиеся строго парал-

тельно, такого обмена не происходило бы совсем. Фактически сталкиваются фононы, распространяющиеся под малыми углами θ' друг относительно друга. Соответственно, обмен энергией и импульсом имеет место, но он является медленным в силу малости угла θ' . Процесс выравнивания значений T и V , соответствующих различным направлениям — это второй релаксационный процесс, который мы будем рассматривать; мы будем называть его *поперечной релаксацией*. Характерное время поперечной релаксации должно быть гораздо больше времени τ_{\perp} .

Оператор поперечной релаксации должен, очевидно, действовать на функции, характеризующие состояние неполного равновесия, $T(\mathbf{x})$ и $V(\mathbf{x})$. В силу малости дисперсионного параметра $\xi(k)$ мы можем в наинизшем приближении пренебречь им в аргументе фононной функции распределения (42.10) и учесть его только при расчете оператора поперечной релаксации, который иначе обратился бы в нуль. Это означает, в частности, что в этом приближении мы можем характеризовать фононное распределение единственной комбинацией

$$\mathcal{R}(\mathbf{x}) = \left(1 - \frac{\mathbf{x}V}{v}\right) \frac{1}{T} = \frac{1-w}{T} \quad (42.11)$$

двух функций, $T(\mathbf{x})$ и $V(\mathbf{x})$, которую мы будем называть *обратной эффективной температурой*. Здесь мы ввели сокращенное обозначение $w(\mathbf{x}) = \mathbf{x}V/v$ для безразмерной проекции дрейфовой скорости фононов на направление \mathbf{x} .

Поскольку углы θ' между сталкивающимися фононами фононов он должен выражаться через операторы бесми малы, оператор поперечной релаксации, действующий на функцию $\mathcal{R}(\mathbf{x})$, должен быть дифференциальным. В силу полной изотропии как спектра, так и взаимодействия конечно малого поворота в k -пространстве ¹⁾

$$\hat{l}_i = e_{iab} k_a \frac{\partial}{\partial k_b}, \quad (42.12)$$

где e_{iab} есть совершенно антисимметричный единичный псевдотензор третьего ранга.

Можно было бы думать, что оператор поперечной релаксации описывает обычную диффузию энергии фононов

¹⁾ Оператор \hat{l}_i отличается от квантовомеханического оператора момента количества движения множителем $i/$.

между различными направлениями. В этом случае он был бы дифференциальным оператором второго порядка, т. е. представлял собой квадратичную функцию операторов \hat{l}_i . Соответственно, коэффициент при этом операторе тогда был бы пропорционален квадрату угла рассеяния $\xi_T^{1/2}$, т. е. первой степени малого параметра ξ_T .

Процесс диффузии можно представить себе наглядно, считая, что он идет на поверхности единичной сферы в k -пространстве; каждой точке на поверхности сферы отвечает определенное направление в k -пространстве. Состояние неполного равновесия описывается некоторым распределением обратной эффективной температуры $\mathcal{R}(\mathbf{x})$ на поверхность сферы; диффузия приводит к выравниванию значений $\mathcal{R}(\mathbf{x})$ в различных точках сферы.

Однако такая качественная картина на самом деле не правильна. Оператор поперечной релаксации оказывается существенно сложнее обычного оператора диффузии — он имеет четвертый порядок, и его старший член составлен из произведения четырех операторов \hat{l}_i . Соответственно, он пропорционален второй (а не первой) степени малого параметра ξ_T , т. е. четвертой степени угла рассеяния $\xi_T^{(1/2)4}$.

Попытаемся понять качественно происхождение этого различия, сравнив рассматриваемую ситуацию с обычной диффузией (например, диффузией частиц через пористую среду). В последнем случае, как известно, концентрация частиц n должна удовлетворять уравнению неразрывности

$$\partial n / \partial t + \operatorname{div} \mathbf{j} = 0,$$

где \mathbf{j} есть плотность потока частиц. В равновесии $\mathbf{j} = 0$, а $n = \text{const}$. Если отклонение от равновесия мало, плотность потока \mathbf{j} пропорциональна отклонению, т. е. градиенту концентрации: $\mathbf{j} = -D \nabla n$, где D — коэффициент диффузии. Пусть концентрация $n = n_0 + n'$, где n_0 — постоянная величина, n' — малая переменная добавка. В линейном по n' приближении коэффициент D следует считать зависящим только от n_0 , т. е. константой, и мы получаем

¹⁾ На это впервые указал Марис (H. J. Maris, 1973).

уравнение

$$\partial n' / \partial t - D \nabla^2 n' = 0,$$

описывающее зависимость n' от координат и времени при заданных начальных и граничных условиях.

Сравним описанную ситуацию с тем, что мы имеем для системы фононов в изотропной среде. Состояние фоновой системы можно описывать, задавая либо эффективную температуру $\mathcal{R}^{-1}(\kappa)$, либо угловую плотность фоновой энергии $\mathcal{H}(\kappa)$, т. е. плотность энергии, приходящуюся на единичный интервал телесного угла. По определению ¹⁾

$$\mathcal{H}(\kappa) = \int_0^{\infty} \frac{dk k^2}{(2\pi)^3} \hbar \Omega N, \quad (42.13)$$

где N есть функция Планка, зависящая от аргумента (42.10). В нулевом приближении по дисперсии отсюда получается следующая связь термодинамических величин $\mathcal{H}(\kappa)$ и $\mathcal{R}(\kappa)$:

$$\mathcal{H}(\kappa) = \pi / 120 \hbar^3 v^3 \mathcal{R}^4(\kappa). \quad (42.14)$$

Таким образом, обе величины однозначно связаны друг с другом, и мы можем использовать для описания состояния неполного равновесия какую-то одну из них.

В линейном приближении, когда $\mathcal{H}(\kappa)$ можно представить в виде суммы большой постоянной части \mathcal{H}_0 и малой переменной добавки $\Delta \mathcal{H}(\kappa)$ и аналогично для величины $\mathcal{R}(\kappa)$, $\Delta \mathcal{H}(\kappa)$ и $\Delta \mathcal{R}(\kappa)$ пропорциональны друг другу:

$$\Delta \mathcal{H}(\kappa) = - \frac{\pi}{30 \hbar^3 v^3 \mathcal{R}_0^5} \Delta \mathcal{R}(\kappa). \quad (42.15)$$

Пусть некоторое начальное распределение энергии $\mathcal{H}(\kappa)$ задано на поверхности единичной сферы. В нулевом приближении $\mathcal{H}(\kappa)$ есть сохраняющаяся величина при любом значении κ . В следующем приближении происходит релаксация этого распределения. Поскольку, однако, полная энергия фоновой системы сохраняется, и при этом энергией могут обмениваться только соседние

¹⁾ Величина $\mathcal{H}(\kappa)$ определена таким образом, что интеграл от нее по полному телесному углу $\int \mathcal{H}(\kappa) d\omega$ дает плотность энергии фононов.

участки единичной сферы, величина $\mathcal{H}(\kappa)$ должна удовлетворять уравнению неразрывности

$$\partial \mathcal{H} / \partial t + \hat{\mathbf{l}} \mathbf{J} = 0.$$

Подробный вывод этого уравнения будет дан в § 43. Здесь же мы только укажем, что член $\hat{\mathbf{l}} \mathbf{J}$ на поверхности сферы аналогичен члену $\text{div } \mathbf{j}$ в обычном пространстве; интеграл от него по всей поверхности сферы равен нулю, так что полная плотность энергии $\int \mathcal{H}(\kappa) d\omega$, представляющая интеграл от угловой плотности энергии $\mathcal{H}(\kappa)$ по всему телесному углу, остается постоянной.

Теперь нужно написать выражение для псевдовектора \mathbf{J} , характеризующего плотность потока энергии вдоль поверхности единичной сферы. Простейшее мыслимое выражение имеет вид

$$\mathbf{J} = - D \hat{\mathbf{l}} \mathcal{R}, \quad (42.16)$$

где в линейном приближении (обсуждением которого мы пока и ограничимся) D следует считать постоянной. Соотношение такого типа означает, что для величины $\Delta \mathcal{H}$ (или, что то же самое, $\Delta \mathcal{R}$) на поверхности сферы справедливо обычное уравнение диффузии. Однако такое простейшее предположение относительно вида псевдовектора \mathbf{J} приводит к физически бессмысленному результату.

Как видно из соотношения (42.11), общая равновесная форма функции $\mathcal{R}(\kappa)$ есть

$$\mathcal{R} = a + b\kappa, \quad (42.17)$$

т. е. она зависит от четырех постоянных, a и b_i , и есть сумма нулевой и первой сферических гармоник. Это следствие того, что при фоновых столкновениях имеются четыре сохраняющихся величины — энергия и три компоненты импульса.

С другой стороны, когда фоновый газ находится в равновесии, «поток» \mathbf{J} должен обращаться в нуль. В применении к нулевой сферической гармонике оператор $\hat{\mathbf{l}}$ действительно дает нуль. Действие же его на первую сферическую гармонику дает результат, отличный от нуля. Следовательно, выражение для \mathbf{J} не может иметь вида (42.16).

Простейшее выражение для \mathbf{J} , которое обращается в нуль как нулевой, так и первой сферической гармоникой,

имеет вид

$$\mathbf{J} = -M\hat{l}(\hat{l}^2 + 2)\mathcal{R}.$$

Действительно, оператор \hat{l}^2 имеет собственные значения $-n(n+1)$, где $n=0, 1, 2, \dots$. При $n=1$ (первая гармоника) собственное значение равно -2 , стало быть, оператор $\hat{l}^2 + 2$ при действии на первую гармонику дает нуль.

Соответственно, получается линеаризованное уравнение, описывающее поперечную релаксацию:

$$\partial\Delta\mathcal{H}/\partial t - M\hat{l}^2(\hat{l}^2 + 2)\Delta\mathcal{R} = 0. \quad (42.18)$$

Мы привели физические соображения в пользу того, что оператор поперечной релаксации не может быть ниже, чем четвертого порядка. То, что он фактически имеет четвертый порядок, будет показано в § 43.

Такой оператор мы будем иногда называть оператором *сверхдиффузии*. Это название призвано, с одной стороны, подчеркнуть стохастический характер процесса поперечной релаксации, аналогичного в этом смысле обычной диффузии, а с другой — то, что он описывается дифференциальным уравнением более высокого порядка, чем простая диффузия.

§ 43. Вывод выражения для оператора поперечной релаксации

В настоящем разделе будет выведено выражение для дифференциального оператора поперечной релаксации. В следующих разделах (§§ 44—47) будут исследованы свойства этого оператора и рассмотрены физические задачи, в которых играет роль релаксация такого типа (В. Л. Гуревич, Б. Д. Лайхтман, 1975—1977).

Вывод этого оператора удается провести при весьма общих предположениях. Мы не будем, в частности, предполагать линейности этого оператора. Тем самым, его можно будет использовать и для анализа нелинейных задач (которые возникают, если отношение эффективных температур $\mathcal{R}^{-1}(\mathbf{x})$ для различных направлений в \mathbf{k} -пространстве заметно отличается от единицы). Мы не будем также предполагать выполнение неравенства (42.5), т. е.

применимость теории возмущений для описания столкновений фононов. Вывод будет основываться на общих принципах физической кинетики, законах сохранения энергии и импульса при фонон-фононных столкновениях¹⁾, изотропии фононного спектра и взаимодействия, малости характерных углов между волновыми векторами взаимодействующих фононов и малости дисперсии их скорости.

Обсудим сначала, как описывать состояние неполного равновесия системы фононов без предположения о малости дисперсии, а затем укажем, какие упрощения возникнут в теории, если эту малость учесть.

Состояние фононов, распространяющихся в данном направлении \mathbf{x} , можно охарактеризовать, задав угловую плотность энергии $\mathcal{H}(\mathbf{x})$ и угловую плотность импульса $\mathcal{P}_i(\mathbf{x})$. Мы определим эти величины как, соответственно, отношение энергии или импульса фононов, распространяющихся в данном телесном угле $d\Omega$ к величине этого телесного угла и к объему системы \mathcal{V} . Другой способ описания состояния неполного равновесия заключается в том, чтобы задать температуру T и дрейфовую скорость V как функции направления \mathbf{x} . Из двух пар переменных, \mathcal{H} , \mathcal{P}_i и T , V_i , какую-нибудь одну можно рассматривать как независимую, тогда другая будет выражаться через нее.

Углы между сталкивающимися фононами мы считаем малыми. Соответственно, величины $\mathcal{H}(\mathbf{x})$ и $\mathcal{P}_i(\mathbf{x})$ должны удовлетворять следующим дифференциальным законам сохранения в \mathbf{k} -пространстве:

$$\begin{aligned} \partial\mathcal{H}/\partial t + \partial\mathcal{E}_i/\partial k_i &= 0, \\ \partial\mathcal{P}_i/\partial t + \partial\mathcal{P}_{ij}/\partial k_j &= 0. \end{aligned} \quad (43.1)$$

Здесь \mathcal{E}_i и \mathcal{P}_{ij} — плотности потока энергии и импульса в \mathbf{k} -пространстве. Эти потоки описывают передачу энергии и импульса между различными направлениями в

¹⁾ Вывод основан также на предположении, что энергия и импульс — это единственные величины, сохраняющиеся при фонон-фононных столкновениях. Поэтому он неприменим к тому случаю, когда, например, преобладают фононные столкновения типа $2 \rightarrow 2$ (два фонона, сталкиваясь, превращаются в два других фонона). В таких процессах (которые могут оказаться преобладающими, если $b < 0$, т. е. закон дисперсии фононов нераспадный) сохраняется еще одна величина — полное число фононов.

k -пространстве, т. е. они должны быть ортогональны вектору k :

$$\mathfrak{G}_i k_i = 0, \quad \mathfrak{F}_{ij} k_j = 0. \quad (43.2)$$

Условия ортогональности выполняются автоматически, если положить

$$\mathfrak{G}_i = -e_{ijm} k_j J_m, \quad \mathfrak{F}_{ij} = -v^{-1} e_{jlm} k_l \mathfrak{G}_{im} \quad (43.3)$$

(множитель v^{-1} во втором соотношении введен ради удобства).

Подставляя (43.3) в (43.1), получаем

$$\partial \mathcal{H} / \partial t + \widehat{l}_i J_i = 0, \quad (43.4)$$

$$\partial v \mathcal{P}_i / \partial t + \widehat{l}_j \mathfrak{G}_{ij} = 0. \quad (43.5)$$

Первое из этих уравнений мы использовали (без вывода) в § 42. Поскольку эти уравнения описывают поперечную релаксацию, фигурирующие в них псевдовектор J_i и псевдотензор \mathfrak{G}_{ij} не должны зависеть от абсолютной величины волнового вектора k , а должны определяться только его направлением, т. е. вектором κ .

Уравнение (43.5) допускает упрощение, если учесть, что плотность импульса фононов, распространяющихся в направлении κ , параллельна κ :

$$\mathcal{P}_i = \kappa_i \mathcal{P}(\kappa). \quad (43.6)$$

Чтобы получить уравнение для скалярной величины \mathcal{P} , подставим (43.6) в (43.5) и спроектируем получившееся уравнение на направления, параллельное и перпендикулярное κ . В первом случае его следует для этого умножить на κ и воспользоваться соотношением коммутации

$$[\widehat{l}_i, \kappa_j] = e_{ji}^\perp, \quad (43.7)$$

где мы ввели обозначение

$$e_{im}^\perp = e_{ima} \kappa_a. \quad (43.8)$$

В результате получится уравнение

$$v \frac{\partial \mathcal{P}}{\partial t} + \widehat{l}_j \kappa_i \mathfrak{G}_{ij} + e_{ji}^\perp \mathfrak{G}_{ij} = 0. \quad (43.9)$$

Для того чтобы спроектировать (43.5) на направление, перпендикулярное κ , нужно умножить его на e_{ji}^\perp и просуммировать по i . Воспользовавшись соотношением коммутации

$$[\widehat{l}_j, e_{im}^\perp] = \delta_{ij} \kappa_m - \delta_{jm} \kappa_i = \delta_{ij}^\perp \kappa_m - \delta_{jm}^\perp \kappa_i, \quad (43.10)$$

где $\delta_{ij}^\perp = \delta_{ij} - \kappa_i \kappa_j$, мы получаем

$$\widehat{l}_a e_{ji}^\perp \mathfrak{G}_{ia} + \kappa_j \mathfrak{G}_{ii} - \kappa_i \mathfrak{G}_{ij} = 0. \quad (43.11)$$

Поясним физическое содержание этого соотношения. Угловая плотность импульса \mathcal{P}_i есть продольная величина: в каждой точке κ единичной сферы вектор \mathcal{P} параллелен κ . Уравнение (43.9) и описывает, как изменяется длина вектора \mathcal{P} в точке κ за счет импульса, притекающего из соседних точек сферы.

В соседних точках сферы с координатами $\kappa + \Delta \kappa$ векторы \mathcal{P} направлены вдоль $\kappa + \Delta \kappa$, т. е. содержат поперечные составляющие по отношению к вектору κ . Поток этой поперечной компоненты импульса должен автоматически обращаться в нуль в точке κ , а для этого псевдотензор \mathfrak{G}_{ij} должен тождественно удовлетворять некоторому дополнительному условию. Соотношение (43.11) и выражает это условие отсутствия в любой точке κ потока поперечной компоненты импульса.

Чтобы удовлетворить этому условию, удобно ввести вместо псевдотензора \mathfrak{G}_{ij} тензор

$$K_{jm} = e_{ji}^\perp \mathfrak{G}_{im}. \quad (43.12)$$

Будем полагать, что этот тензор удовлетворяет условиям поперечности,

$$\kappa_j K_{jm} = 0, \quad \kappa_m K_{jm} = 0. \quad (43.13)$$

Первое из них следует непосредственно из определения (43.12). Второму всегда можно удовлетворить: с помощью замены $\mathfrak{G}_{im} \rightarrow \mathfrak{G}_{im} + \kappa_m \mathfrak{A}_i$ (где $\mathfrak{A}_i(\kappa)$ — произвольная векторная функция), оставляющей инвариантным соотношение (43.5), можно добиться, чтобы псевдотензор \mathfrak{G}_{im} удовлетворял соотношению $\mathfrak{G}_{im} \kappa_m = 0$, откуда и следует второе соотношение (43.13).

Выразим с помощью уравнения (43.11) второе слагаемое в уравнении (43.9) через тензор K_{jm} . С учетом

тождества $\hat{l}_k = 0$ мы получаем

$$v \dot{\mathcal{P}} + \hat{l}_j \hat{l}_m K_{jm} + K_{mm} = 0. \quad (43.14)$$

Рассмотрим систему фононов, распространяющихся в каком-то одном направлении κ и находящихся в равновесии друг с другом. Для угловой плотности их энергии можно написать следующее термодинамическое соотношение, которое по смыслу аналогично (15.11) и может быть выведено таким же образом:

$$d\mathcal{H} = T ds + V d\mathcal{P},$$

где s есть угловая плотность энтропии фононной системы. Отсюда вариация энтропии единицы объема

$$\delta S = \int d\omega \left[\frac{1}{T(\kappa)} \delta \mathcal{H}(\kappa) - \frac{V(\kappa)}{T(\kappa)} \delta \mathcal{P}(\kappa) \right], \quad (43.15)$$

где интегрирование производится по всему телесному углу.

Скорость возрастания плотности энтропии есть

$$\dot{S} = \int d\omega \left(\frac{1}{T} \dot{\mathcal{H}} - \frac{V}{T} \dot{\mathcal{P}} \right) = \int d\omega \left(\frac{1}{T} \dot{\mathcal{H}} - \frac{vV}{T} \dot{\mathcal{P}} \right). \quad (43.16)$$

В наименьшем приближении по дисперсии фононов, которым мы ограничиваемся, $\mathcal{H}(\kappa) = v\mathcal{P}(\kappa)$, и, с учетом определения (42.11) величины \mathcal{R} ,

$$\dot{S} = \int d\omega \frac{1 - \kappa V/v}{T} v \dot{\mathcal{P}} = - \int d\omega \mathcal{R} (\hat{l}_j \hat{l}_m + \delta_{jm}) K_{jm}.$$

Принимая во внимание антиэрмитовость операторов \hat{l}_i , следующую непосредственно из определения (42.12), перепишем это выражение в виде

$$\dot{S} = - \int d\omega K_{jm} (\hat{l}_m \hat{l}_j + \delta_{mj}) \mathcal{R}. \quad (43.17)$$

В такой форме к нему можно непосредственно применить общие соотношения термодинамики необратимых процессов для систем с распределенными параметрами, приведенные в § 11. Единственное отличие данного случая (не имеющее, как отмечалось, принципиального значения) заключается в том, что в § 11 фигурировали интегралы по объему, в то время как в формуле (43.17) — интеграл по телесному углу $d\omega$.

Выберем в качестве производных по времени от обобщенных координат, x_a , величины K_{jm} . Тогда величины $(\hat{l}_m \hat{l}_j + \delta_{mj}) \mathcal{R}$ играют роль обобщенных сил X_a , сопряженных обобщенным координатам x_a . Линейные соотношения (11.25), связывающие обе совокупности переменных, запишутся в данном случае в виде

$$K_{jm} = - M_{jm, in} (\hat{l}_n \hat{l}_i + \delta_{ni}) \mathcal{R}.$$

Компоненты тензора M могут, вообще говоря, зависеть от эффективной температуры \mathcal{R}^{-1} , но не от ее производных. Выражение для обобщенных координат K_{jm} упрощается, если учесть, что оно должно обращаться в нуль, когда \mathcal{R} имеет равновесную форму (42.17). Рассмотрим действие комбинации $\hat{l}_m \hat{l}_j + \delta_{mj}$ на нулевую сферическую гармонику. При этом первое слагаемое дает нуль. Для того чтобы второе слагаемое также давало нуль, тензор M должен удовлетворять соотношению

$$M_{jm, ii} = 0, \quad (43.18)$$

так что

$$K_{jm} = - M_{jm, in} \hat{l}_n \hat{l}_i \mathcal{R}. \quad (43.19)$$

С другой стороны, следствием соотношений Онсагера (11.26) является симметричность тензора M относительно перестановки первой и второй пары значков:

$$M_{jm, in} = M_{in, jm}. \quad (43.20)$$

Отсюда, с учетом (43.18), имеем

$$K_{mm} = 0, \quad (43.21)$$

так что

$$\dot{S} = - \int d\omega K_{im} \hat{l}_m \hat{l}_i \mathcal{R}. \quad (43.22)$$

Кроме двух свойств (43.18) и (43.20), тензор M должен обладать еще следующим свойством, которое является следствием соотношений (43.13):

$$\kappa_j M_{jm, in} = 0, \quad \kappa_m M_{jm, in} = 0. \quad (43.23)$$

Убедимся, что величины K_{jm} , определяемые выражением (43.19), обращаются в нуль не только нулевой, а и первой сферической гармоникой $b\kappa$. Имеем

$$\hat{l}_n \hat{l}_i b\kappa = \kappa_i b_n - \delta_{in} b\kappa.$$

Подставляя это выражение в (43.19), мы видим, что первое слагаемое дает нуль в силу соотношений (43.20) и (43.23), а второе — в силу соотношения (43.18).

Используем соотношения симметрии для того, чтобы определить самую общую форму, которую может иметь тензор M . В силу изотропии среды этот тензор четвертого ранга можно строить из псевдотензоров e_{ab}^\perp , тензоров δ_{ab} и компонент вектора κ . Наиболее общая комбинация, совместимая с условиями (43.20) и (43.23), имеет вид¹⁾

$$M_{jm, in} = M_1 \delta_{jm}^\perp \delta_{in}^\perp + M_2 \delta_{ji}^\perp \delta_{mn}^\perp + M_3 \delta_{jn}^\perp \delta_{im}^\perp + \\ + M_4 e_{jm}^\perp e_{in}^\perp + M_5 e_{ji}^\perp e_{mn}^\perp + M_6 e_{jn}^\perp e_{im}^\perp, \quad (43.24)$$

где коэффициенты M_i — функции обратной эффективной температуры \mathcal{R} . Соотношение (43.18) устанавливает следующую связь между этими коэффициентами:

$$2M_1 + M_2 + M_3 + M_5 - M_6 = 0. \quad (43.25)$$

Подставляя выражение (43.24), с учетом (43.25), в (43.22), мы получим после довольно длинных, но простых преобразований с использованием соотношений коммутации (43.7), (43.10) и

$$[\hat{l}_j, \hat{l}_m] = -e_{jmn} \hat{l}_n \quad (43.26)$$

и тождества $\kappa \hat{l} = 0$ следующее выражение для \dot{S} :

$$\dot{S} = \int d\omega [(M_2 + M_3) \delta_{jn}^\perp \delta_{im}^\perp + (M_6 - M_5) e_{jn}^\perp e_{im}^\perp] \times \\ \times \left[\left(\hat{l}_n \hat{l}_i - \frac{1}{2} \delta_{ni}^\perp \hat{l}^2 \right) \mathcal{R} \right] \left[\left(\hat{l}_m \hat{l}_j - \frac{1}{2} \delta_{mj}^\perp \hat{l}^2 \right) \mathcal{R} \right].$$

Чтобы упростить это выражение, представим тензор

$$\left(\hat{l}_m \hat{l}_j - \frac{1}{2} \delta_{mj}^\perp \hat{l}^2 \right) \mathcal{R}$$

¹⁾ В это выражение не должны входить комбинации вида $\delta_{jm}^\perp e_{in}^\perp + \delta_{in}^\perp e_{jm}^\perp$, поскольку они представляют собой псевдотензор, а не истинный тензор.

в виде суммы симметричной части

$$B_{mj} = \frac{1}{2} (\hat{l}_m \hat{l}_j + \hat{l}_j \hat{l}_m - \delta_{mj}^\perp \hat{l}^2) \mathcal{R}$$

и антисимметричной — $\frac{1}{2} e_{jmp} \hat{l}_p \mathcal{R}$.

С помощью прямых вычислений убеждаемся, что вклад от антисимметричной части равен нулю. Подынтегральное выражение, содержащее одну только симметричную часть B_{mj} , принимает вид

$$(M_2 + M_3) \delta_{jn}^\perp \delta_{im}^\perp B_{ni} B_{mj} + (M_6 - M_5) e_{jn}^\perp e_{im}^\perp B_{ni} B_{mj}. \quad (43.27)$$

Выпишем это выражение в декартовых координатах, где ось 3 параллельна вектору κ . При этом учтем следующие свойства тензора B_{mj} :

$$B_{mm} = 0, \quad \kappa_m \kappa_j B_{mj} = 0,$$

первое из которых является следствием его определения, а второе вытекает из тождества $\kappa \hat{l} = 0$.

Отсюда в выбранной системе координат $B_{33} = 0$, $B_{11} = -B_{22}$. С учетом этих соотношений, выражение (43.27) переписывается в виде $4M (B_{11}^2 + B_{12}^2)$, где $2M = M_2 + M_3 + M_6 - M_5$. Очевидно,

$$M(\mathcal{R}) > 0. \quad (43.28)$$

Возвращаясь к ковариантной форме записи, мы получаем для \dot{S} :

$$\dot{S} = 2 \int d\omega M \delta_{mi}^\perp \delta_{jn}^\perp \left[\left(\hat{l}_m \hat{l}_j - \frac{1}{2} \delta_{mj}^\perp \hat{l}^2 \right) \mathcal{R} \right] \times \\ \times \left[\left(\hat{l}_n \hat{l}_i - \frac{1}{2} \delta_{ni}^\perp \hat{l}^2 \right) \mathcal{R} \right], \quad (43.29)$$

или, выполнив суммирование,

$$\dot{S} = \int d\omega M [2 (\hat{l}_j \hat{l}_m \mathcal{R})(\hat{l}_m \hat{l}_j \mathcal{R}) - (\hat{l}^2 \mathcal{R})^2]. \quad (43.30)$$

Теперь тензор K_{jm} запишется в виде

$$K_{jm} = -M (2 \hat{l}_j \hat{l}_m - \delta_{jm}^\perp \hat{l}^2) \mathcal{R},$$

а для оператора поперечной релаксации мы имеем

$$\dot{\mathcal{H}} = v\dot{\mathcal{P}} = 2\hat{l}_j\hat{l}_m M\hat{l}_j\hat{l}_m \mathcal{R} - \hat{l}^2 M \hat{l}^2 \mathcal{R}. \quad (43.31)$$

Для ряда приложений бывает удобно, преобразовав (43.30) с учетом антиэрмитовости операторов \hat{l}_i , представить выражение для \dot{S} в следующей форме:

$$\dot{S} = \int d\omega \mathcal{R} (2\hat{l}_j\hat{l}_m M\hat{l}_j\hat{l}_m - \hat{l}^2 M \hat{l}^2) \mathcal{R}. \quad (43.32)$$

По своей структуре такая форма записи напоминает выражение (11.22): функция $\mathcal{R}(\kappa)$ здесь — аналог функции распределения, а оператор поперечной релаксации — аналог оператора столкновений.

Таким образом, оператор поперечной релаксации содержит некоторую функцию обратной эффективной температуры, $M(\mathcal{R})$. Явный вид этой функции нельзя определить из общих соображений — он зависит от конкретной формы взаимодействия фононов. Для случая, когда трехфононные столкновения могут быть описаны по теории возмущений, эта функция будет вычислена в § 45.

Если отклонение обратной эффективной температуры от среднего значения \mathcal{R}_0 мало, мы можем положить

$$\mathcal{R} = \mathcal{R}_0 [1 + Z(\kappa)], \quad |Z| \ll 1. \quad (43.33)$$

$Z(\kappa)$ есть малая по сравнению с единицей функция, характеризующая относительное изменение эффективной температуры фононов \mathcal{R}^{-1} . Оператор поперечной релаксации в этом случае есть линейный оператор, действующий на функцию $Z(\kappa)$. Величина \mathcal{R}_0 , характеризующая полностью равновесное состояние системы фононов, должна иметь вид

$$\mathcal{R}_0 = \frac{1 - \kappa V/v}{T}, \quad (43.34)$$

где V и T — постоянные, не зависящие от κ . В отсутствие среднего дрейфа фононов мы имеем просто

$$\mathcal{R}_0 = 1/T. \quad (43.35)$$

Такие характеристики неравновесного состояния, как, например, угловая плотность энергии неравновесных фононов, выражаются непосредственно через функцию $Z(\kappa)$. Соответствующая формула вытекает непосредственно из

(42.15). В отсутствие среднего дрейфа равновесных фононов, когда $\mathcal{R}_0 = 1/T$, она имеет вид

$$\Delta \mathcal{H}(\kappa) = -\frac{\pi T^4}{30\hbar^3 v^3} Z(\kappa). \quad (43.36)$$

Умножая эту величину на скорость звука v , мы получаем угловую плотность потока энергии, переносимую неравновесными фононами. Направлена она, очевидно, по вектору κ . В случае (43.35) оператор поперечной релаксации приобретает уже знакомый вид

$$\dot{\mathcal{H}} = v\dot{\mathcal{P}} = M_0 T^{-1} \hat{l}^2 (\hat{l}^2 + 2) Z. \quad (43.37)$$

В качестве коэффициента перед дифференциальным оператором фигурирует постоянная

$$\frac{M_0}{T} = M(\mathcal{R}_0) \mathcal{R}_0 = \frac{M(1/T)}{T}. \quad (43.38)$$

Упрощается в этом случае и выражение для \dot{S} :

$$\dot{S} = M_0 T^{-2} \int d\omega [2(\hat{l}_j\hat{l}_m Z)(\hat{l}_m\hat{l}_j Z) - (\hat{l}^2 Z)^2]. \quad (43.39)$$

То же выражение можно переписать и в следующем виде, аналогичном (43.32):

$$\dot{S} = M(\mathcal{R}_0) \mathcal{R}_0^2 \int d\omega Z \hat{l}^2 (\hat{l}^2 + 2) Z. \quad (43.40)$$

Это выражение в еще большей степени, чем (43.32), напоминает формулу (11.22) для скорости возрастания энтропии при малых отклонениях системы фононов от равновесия.

§ 44. Соотношение между температурой и дрейфовой скоростью в состоянии неполного термодинамического равновесия

В следующем разделе мы произведем непосредственные расчеты кинетического коэффициента M . Мы убедимся, что если вклад дисперсии в частоту тепловых фононов больше их затухания, так что для описания фон-фонных столкновений применима теория возмущений, коэффициент M оказывается второго порядка по дисперсионному параметру ξ . Это значит, что состояние

неполного термодинамического равновесия в системе фононов осуществляется с точностью не до нулевого, а до первого порядка по ξ .

В нулевом порядке по ξ для функции $\mathcal{R}(\kappa)$ было получено выражение (42.11) в виде суммы двух слагаемых. При рассмотрении состояния неполного равновесия вдоль какого-нибудь направления κ было в принципе невозможно, например, отделить в этом выражении слагаемое с дрейфовой скоростью

$$w/T = \kappa V/vT.$$

Рассматривая же состояние неполного равновесия в первом порядке по ξ , мы по заданной функции $\mathcal{R}(\kappa)$ сможем однозначным образом определить $T(\kappa)$ и $w(\kappa)$. Этому и посвящен настоящий раздел.

В первом порядке по ξ равновесие устанавливается не между фононами, распространяющимися в каком-то направлении в k -пространстве, а внутри узкого конуса направлений с углом раствора, имеющего, как мы видели, порядок $\xi^{1/2}$. Энергия и импульс фононов внутри такого конуса равны, соответственно:

$$\int_{\Delta_0} d\omega \mathcal{H}(\kappa) \quad \text{и} \quad \int_{\Delta_0} d\omega \mathcal{P}(\kappa),$$

где Δ_0 и обозначает интервал телесных углов, соответствующих этому конусу.

Рассмотрим условие равновесия системы фононов внутри конуса. Это есть, как известно из термодинамики, требование максимальности их энтропии

$$\int_{\Delta_0} d\omega \varepsilon(\kappa) \quad (44.1)$$

при дополнительных условиях постоянства их суммарных энергии и импульса. Это, в свою очередь, эквивалентно требованию равенства нулю следующей вариации:

$$\int_{\Delta_0} \left(\frac{1}{T} \delta \mathcal{H} - \frac{V}{T} \delta \mathcal{P} - \frac{1}{T_0} \delta \mathcal{H} + \frac{V_0}{T_0} \delta \mathcal{P} \right) = 0, \quad (44.2)$$

где $1/T_0$ и V_0/T_0 — соответствующие лагранжевы пара-

метры. Очевидно, $T_0 = T(\kappa_0)$, $V_0 = V(\kappa_0)$, где κ_0 — направление оси конуса.

Учтем, что $\delta \mathcal{P} = \kappa \delta \mathcal{P}$, и разложим подынтегральное выражение по степеням малого угла ε между κ_0 и перпендикулярным направлением κ , лежащим внутри конуса. Пусть ν есть единичный вектор, перпендикулярный векторам κ и κ_0 . Тогда оператор поворота на угол ε вокруг оси ν выражается через оператор \hat{l} как $\exp(\varepsilon \nu \hat{l})$ и

$$\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0} = [\exp(\varepsilon \nu \hat{l}) - 1] \frac{1}{T} \approx \left[\varepsilon \nu \hat{l} + \frac{\varepsilon^2}{2} (\nu \hat{l})^2 \right] \frac{1}{T} \Big|_{\kappa=\kappa_0} \quad (44.3)$$

(после применения оператора \hat{l} к функции $1/T(\kappa)$ следует положить $\kappa = \kappa_0$). Аналогично:

$$\begin{aligned} \frac{w}{T} &\approx \left[1 + \varepsilon \nu \hat{l} + \frac{\varepsilon^2}{2} (\nu \hat{l})^2 \right] \frac{w}{T} \Big|_{\kappa=\kappa_0}, \\ \kappa V_0 &= \left[\kappa V_0 + \varepsilon (\nu \hat{l})(\kappa V_0) + \frac{\varepsilon^2}{2} (\nu \hat{l})^2 (\kappa V_0) \right] \Big|_{\kappa=\kappa_0}. \end{aligned}$$

Для вычисления интеграла (44.2) нужно выполнять операцию усреднения по всем направлениям вектора ν , лежащего в плоскости, перпендикулярной κ_0 . Если направить полярную ось вдоль κ_0 , то усреднять приходится по углу φ . Обозначая операцию усреднения символом $\langle \dots \rangle_\varphi$, мы имеем

$$\langle \nu_i \rangle_\varphi = 0, \quad \langle \nu_i \nu_j \rangle_\varphi = \frac{1}{2} \delta_{ij}. \quad (44.4)$$

Кроме того, для вычисления интеграла потребуется также тождество

$$(\nu \hat{l})^2 = \nu_a \nu_b \hat{l}_a \hat{l}_b. \quad (44.5)$$

В справедливости его легко убедиться, проверив, что ν_a коммутирует с произведением $\nu \hat{l}$ (хотя величины ν_a и \hat{l}_b друг с другом не коммутируют).

Принимая во внимание все эти соотношения, а также тождество $(\hat{l}^2 + 2)\kappa = 0$ и пренебрегая произведением $\varepsilon^2(\mathcal{H} - \nu \mathcal{P})$ как имеющим высший порядок малости, мы находим в первом приближении по дисперсии следующее

условие равновесия:

$$\int_{\Delta_0} d\omega \frac{\varepsilon^2}{4} \left[\hat{l}^2 \frac{1}{T} - (\hat{l}^2 + 2) \frac{w}{T} \right]_{\kappa=\kappa_0} \delta \mathcal{H} = 0.$$

Отсюда получается соотношение, связывающее функции $T(\kappa)$ и $w(\kappa)$:

$$\hat{l}^2 \frac{1}{T} - (\hat{l}^2 + 2) \frac{w}{T} = 0. \quad (44.6)$$

Поскольку, с другой стороны, $\mathcal{R} = (1 - w)/T$, мы можем отсюда выразить T и w через обратную эффективную температуру \mathcal{R} :

$$\frac{1}{T} = \frac{1}{2} (\hat{l}^2 + 2) \mathcal{R}, \quad \frac{w}{T} = \frac{1}{2} \hat{l}^2 \mathcal{R}. \quad (44.7)$$

С физической точки зрения эти соотношения представляются весьма естественными. Действительно, из них, в частности, следует, что если \mathcal{R} содержит нулевую и первую сферические гармоники, то нулевая гармоника целиком входит в $1/T$ и не входит в w/T , в то время как первая гармоника не входит в $1/T$, а дает вклад только в член с гидродинамической скоростью, w/T .

§ 45. Вычисление оператора поперечной релаксации для случая трехфононных столкновений

В настоящем разделе мы займемся явным вычислением функции $M(\mathcal{R})$. Для этого мы произведем непосредственно разложение оператора фонон-фононных столкновений по степеням малого параметра ξ .

Оператор трехфононных столкновений имеет вид

$$\begin{aligned} \left[\frac{\partial N}{\partial t} \right]_{\text{ст}} = & \int \frac{d^3 k'}{(2\pi)^3} \left[\beta(k, k', -k'') f_+(k, k', k'') \delta(\Omega'' - \right. \\ & - \Omega - \Omega') + \frac{1}{2} \beta(k', k''', -k) f_-(k, k', k''') \times \\ & \left. \times \delta(\Omega - \Omega' - \Omega''') \right]. \quad (45.1) \end{aligned}$$

Здесь введены следующие обозначения:

$k'' = k + k'$, $k''' = k - k'$, $\Omega' = \Omega(k')$ и т. д.,

$$f_+(k, k', k'') = N''(N+1)(N'+1) - (N''+1)NN',$$

$$f_-(k, k', k''') = (N+1)N'N''' - N(N'+1)(N'''+1),$$

$$N = N_0 \left(\hbar \frac{\Omega - vkw}{T} \right). \quad (45.2)$$

Для коэффициентов $\beta(k, k', -k'')$ с принятой точностью можно пользоваться выражением (8.26), т. е. считать, что они зависят только от длин векторов k, k', k'', k''' .

Чтобы определить функцию $M(\mathcal{R})$, сначала вычислим скорость возрастания плотности энтропии фононной системы в нашем случае. Все вычисления аналогичны проделанным в § 11, с той лишь разницей, что функция распределения фононов теперь имеет вид (45.2). Подставляя (45.1) в выражение

$$\left[\frac{\partial S}{\partial t} \right]_{\text{ст}} = \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \ln \frac{N+1}{N} \left[\frac{\partial N}{\partial t} \right]_{\text{ст}},$$

симметризуем первый член в операторе столкновений относительно переменных k и k' , после чего в симметризованном члене производим переобозначение переменных, согласно схеме: $k'' \rightarrow k$, $k' \rightarrow k'$, $k \rightarrow k'''$. Кроме того, воспользуемся тождеством, которое легко проверяется

$$f_+(k''', k', k) = -f_-(k, k', k''')$$

и соотношением

$$f_-(k, k', k''') = (N+1)N'N'''(1 - e^{-\hbar A}),$$

где

$$A(k, k', k''') = \frac{\Omega - vkw}{T} - \frac{\Omega' - vk'w'}{T'} - \frac{\Omega''' - vk'''w'''}{T'''},$$

вытекающим непосредственно из явного выражения (45.2) для равновесной фононной функции распределения N . В итоге

$$\begin{aligned} \left[\frac{\partial S}{\partial t} \right]_{\text{ст}} = & \frac{\pi \hbar^2 v}{2\rho} (u+1)^2 \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3 k'}{(2\pi)^3} k k' k''' \times \\ & \times (N+1)N'N'''(1 - e^{-\hbar A}) A \delta(\Omega - \Omega' - \Omega'''). \quad (45.3) \end{aligned}$$

Закон сохранения энергии, выражающий равенство нулю аргумента δ -функции, был проанализирован в начале § 42. После соответствующих переобозначений волновых векторов его можно записать в виде

$$\frac{kk'\theta'^2}{k''} - f(k, k', k'') = 0, \quad (45.4)$$

где функция f определяется выражением (42.7). Как следствие этого закона величина $\hbar A$ оказывается первого порядка малости по параметру ξ . Отсюда следует, что в первом неисчезающем приближении $[\partial S/\partial t]_{\text{ст}}$ имеет второй порядок по ξ .

Разложим величину $A(k, k', k'')$ по степеням малых углов θ' и θ'' , соответственно, между векторами k' и k'' и вектором k . Удобно производить разложение, представив эту величину в следующей форме:

$$A = \frac{\Omega - vkv}{T} - \exp(\theta' n \hat{l}) \frac{\Omega' - vk'v}{T} - \exp(-\theta'' n \hat{l}) \frac{\Omega'' - vk''v}{T}.$$

Здесь n есть единичный вектор, равный

$$n = \frac{[kk']}{|[kk']|} = - \frac{[kk'']}{|[kk'']|},$$

знак минус в экспоненте при угле θ'' стоит потому, что вектор k'' повернут от вектора k в направлении, обратном вектору k' .

Разлагая экспоненты и принимая во внимание закон сохранения энергии $\Omega = \Omega' + \Omega''$, мы получаем

$$A = - \left[(\Omega'\theta' - \Omega''\theta'') n \hat{l} + \frac{1}{2} (\Omega'\theta'^2 + \Omega''\theta''^2) (n \hat{l})^2 \right] \frac{1}{T} + v \left[k' + k'' - k + (k'\theta' - k''\theta'') n \hat{l} + \frac{1}{2} (k'\theta'^2 + k''\theta''^2) (n \hat{l})^2 \right] \frac{v}{T}. \quad (45.5)$$

В коэффициентах при малых величинах θ и θ^2 следует пренебречь малой дисперсией скорости звука, т. е. положить $\Omega = vk$. Согласно теореме синусов, $k' \sin \theta' =$

$= k'' \sin \theta''$. Отсюда явствует, что, во-первых, члены первого порядка по θ' и θ'' в выражении для A взаимно уничтожаются, а, во-вторых, с принятой точностью $\theta'' = \theta' k'/k''$.

В том же самом приближении, как следует из формулы (45.4),

$$\delta(\Omega - \Omega' - \Omega'') = \frac{1}{v} \sigma(k - k') \delta \left[\frac{kk'\theta'^2}{k''} - f(k, k', k'') \right],$$

где $\sigma(x)$ есть знаковая функция, равная единице при $x > 0$ и равная нулю при $x < 0$.

С учетом этих двух соотношений выражение для A переписывается следующим образом:

$$A = v f(k, k', k'') \left[(n \hat{l})^2 \mathcal{R} - \frac{v}{T} \right].$$

Отсюда, с учетом (44.6), мы получаем

$$A = v f(k, k', k'') \left[(n \hat{l})^2 - \frac{1}{2} \hat{l}^2 \right] \mathcal{R}. \quad (45.6)$$

При вычислении интеграла (45.3) мы должны с принятой точностью положить $1 - e^{-\hbar A} = \hbar A$, так что подынтегральное выражение оказывается квадратичной функцией A . Будем сначала интегрировать по телесному углу в пространстве k' , зафиксировав направление вектора k . При этом, помимо средних значений (44.4), нужно будет также вычислить средние от произведения четырех компонент вектора n , $\langle n_i n_j n_k n_m \rangle_{\Phi}$.

Искомое среднее представляет собой тензор четвертого ранга, симметричный относительно перестановки любой пары индексов. Этот тензор, очевидно, должен выражаться в виде суммы произведений компонент единичного тензора δ_{ij} и вектора n . В силу соотношения $n n = 0$ эти величины должны входить в комбинации δ_{ij}^{\pm} . Выражение, удовлетворяющее таким требованиям, имеет вид

$$\langle n_i n_j n_k n_m \rangle_{\Phi} = \frac{1}{8} (\delta_{ij}^{\pm} \delta_{km}^{\pm} + \delta_{ik}^{\pm} \delta_{jm}^{\pm} + \delta_{im}^{\pm} \delta_{jk}^{\pm}). \quad (45.7)$$

(Коэффициент 1/8 определяем, сворачивая левую и правую части по двум парам индексов.)

Выполняя усреднение с помощью (44.5) и (45.7), имеем

$$\langle A^2 \rangle_{\varphi} = \frac{1}{4} v^2 \bar{f}^2(k, k', k'') \delta_{m_i}^{\pm} \delta_{j_n}^{\pm} \left(\hat{l}_m \hat{l}_j - \frac{1}{2} \delta_{m_j}^{\pm} \hat{l}^2 \right) \mathcal{R} \times \\ \times \left(\hat{l}_n \hat{l}_i - \frac{1}{2} \delta_{n_i}^{\pm} \hat{l} \right) \mathcal{R}.$$

Теперь в интеграле (45.3) можно проинтегрировать по абсолютным значениям векторов k и k' . В результате для S получается выражение, имеющее структуру (43.29), причем

$$M(\mathcal{R}) = \frac{\hbar^3 v^2 (1+u)^2}{32 (2\pi)^4 \rho} \int_0^{\infty} dk \int_0^{\hbar} dk' \bar{f}^2(k, k', k-k') \sigma(\bar{f}) \times \\ \times k^2 k'^2 (k-k')^2 [n_0(\hbar v k \mathcal{R}) + 1] n_0(\hbar v k' \mathcal{R}) \times \\ \times n_0[\hbar v (k-k') \mathcal{R}]. \quad (45.8)$$

Температурную зависимость этого выражения можно вычислить в явном виде в двух предельных случаях — высоких и низких температур. При достаточно низких температурах $\mathcal{R}^{-1} \ll \hbar v k_c$ можно считать, что функция $\xi(k)$ имеет простейшую форму (42.8), и

$$M(\mathcal{R}) = \frac{9\mathfrak{F} (1+u)^2 \alpha^2 \hbar}{2^9 \pi^4 \rho (\hbar v)^{12}} \mathcal{R}^{-14}, \quad (45.9)$$

где посредством \mathfrak{F} обозначена безразмерная постоянная

$$\mathfrak{F} = \int_0^{\infty} dz \int_0^z dz' z^4 (z-z')^4 z'^4 [n_0(z) + 1] n_0(z') n_0(z-z').$$

Ее численное значение равно $1,0 \cdot 10^7$. Таким образом, численный коэффициент в формуле (45.9) довольно велик — он составляет примерно 1800. Это связано в конечном счете с тем, что если дисперсионная поправка имеет вид (42.8), в интеграле (45.8) фигурируют высокие степени k и k' . Соответственно, и существенные значения k в этом случае оказываются не порядка k_T , а порядка $10k_T$. Коэффициент M оказывается пропорциональным 14-й степени эффективной температуры.

В обратном предельном случае высоких температур $\mathcal{R}^{-1} \gg \hbar v k_c$ нужно принять во внимание, что функция

$f(k, k', k-k')$ становится отрицательной при достаточно больших значениях своих аргументов; интегрировать же следует только по таким значениям k и k' , при которых она положительна, т. е. удовлетворяющим неравенствам $k, k' \leq k_c$. Соответственно, мы можем положить в подынтегральном выражении в (45.8) $n_0(z) = 1/z$, что дает

$$M(\mathcal{R}) = \frac{(1+u)^2}{2^9 \pi^4 \rho v} \mathcal{R}^{-3} \int_0^{\infty} dk \int_0^{\hbar} dk' \bar{f}^2(k, k', k-k') \times \\ \times \sigma(\bar{f}) k k' (k-k'). \quad (45.10)$$

Это выражение пропорционально кубу эффективной температуры, а в интегралах по k и k' существенны значения k порядка k_c , т. е. много меньше, чем k_T .

Нужно, однако, помнить, что при $\mathcal{R}^{-1} \gg \hbar v k_c$ область значений k и k' , где $f(k, k', k-k') > 0$, охватывает отнюдь не все значения волновых векторов фононов, возбужденных при данной температуре. По этой причине при $\mathcal{R}^{-1} \gg \hbar v k_c$ поперечная релаксация может определяться не трехфононными процессами, которые для большинства возбужденных фононов запрещены, а, например, четырехфононными.

§ 46. Математическая формулировка задач на поперечную релаксацию фононов

Выведем уравнение, которое, вместе с соответствующими граничными условиями, позволит определить обратную температуру \mathcal{R} системы фононов как функцию углов, а также пространственных координат. Это уравнение должно учитывать как поперечную релаксацию фононов, так и эволюцию фононной системы в пространстве, обусловленную распространением фононов между актами столкновений. С помощью этого уравнения можно будет ставить и решать различного рода задачи, в которых возникает необходимость учета поперечной релаксации.

Возьмем в качестве исходного кинетическое уравнение для неравновесной функции распределения фононов N :

$$\frac{\partial N}{\partial t} + \frac{\partial \Omega}{\partial k_i} \frac{\partial N}{\partial r_i} - \frac{\partial \Omega}{\partial r_i} \frac{\partial N}{\partial k_i} = \left[\frac{\partial N}{\partial t} \right]_{\text{ст}}, \quad (46.1)$$

причем в левой части будем пренебрегать дисперсией фононов, т. е. полагать $\Omega = vk$. Не будем пока конкретизировать вида оператора столкновений и, в частности, предполагать, что его можно вычислять по теории возмущений. Тогда условие применимости этого уравнения имеет вид (6.2), $\Omega\tau_{\parallel} \gg 1$, т. е. означает требование малости затухания фононов по сравнению с характерным значением их частоты Ω .

Умножим уравнение (46.1) на $\hbar k^3 dk / (2\pi)^3$ и проинтегрируем по k . Принимая во внимание соотношение

$$\mathcal{P}(\mathbf{x}) = \frac{1}{v} \mathcal{H}(\mathbf{x}) = \hbar \int_0^{\infty} \frac{dk}{(2\pi)^3} k^3 n_0(\hbar vk \mathcal{R}),$$

находим, что интеграл от первого слагаемого в левой части есть $\partial \mathcal{P} / \partial t$. Поскольку в пренебрежении дисперсией $\partial \Omega / \partial k_i = vk_i$, интеграл от второго слагаемого есть $vk_i \partial \mathcal{P} / \partial r_i$. В третьем слагаемом фигурирует производная $\partial \Omega / \partial r_i$. Она может быть отлична от нуля в пространственно-неоднородных задачах, когда скорость звука есть функция координат. В этом случае интеграл от третьего слагаемого переписывается в виде

$$-\frac{\partial v}{\partial r_i} \int_0^{\infty} \frac{\partial N}{\partial k_i} \hbar k^4 \frac{dk}{(2\pi)^3} = -\frac{\partial v}{\partial r_i} \int_0^{\infty} \hbar k^3 \left(k \frac{\partial N}{\partial k} \kappa_i + \frac{\partial N}{\partial \kappa_i} \right) dk = \\ = \frac{\partial v}{\partial r_i} \left(4\kappa_i \mathcal{P} - \frac{\partial \mathcal{P}}{\partial \kappa_i} \right),$$

где при вычислении производных по κ_i нужно учитывать, что эти величины не независимы, а связаны соотношением $\sum_i \kappa_i^2 = 1$. Окончательно уравнение для величины \mathcal{P} записывается в виде

$$\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial t} + vk_i \frac{\partial \mathcal{P}}{\partial r_i} + \frac{\partial v}{\partial r_i} \left(4\kappa_i \mathcal{P} - \frac{\partial \mathcal{P}}{\partial \kappa_i} \right) = \\ = \frac{1}{v} (2\hat{l}_j \hat{l}_m M \hat{l}_j \hat{l}_m - \hat{l}^2 M \hat{l}^2) \mathcal{R}. \quad (46.2)$$

Осталось указать, чему равна производная $\partial v / \partial r_i$. Простейший случай, когда она отлична от нуля — про-

странственно-неоднородные задачи, в которых плотность ρ есть функция координат \mathbf{r} . В этом случае

$$\frac{\partial v}{\partial r_i} = \frac{\partial v}{\partial \rho} \frac{\partial \rho}{\partial r_i} = u \frac{v}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial r_i}.$$

В более общем случае от координаты зависит не только плотность жидкости ρ , а и ее скорость $\dot{\mathbf{u}}$. В этом случае частота фононов, распространяющихся в жидкости, испытывает доплеровский сдвиг, т. е. к ней добавляется слагаемое $\mathbf{k}\dot{\mathbf{u}}$. Соответственно, скорость звука в направлении \mathbf{x} оказывается равной

$$v = v_0 (1 + \mathbf{u}\rho' / \rho_0) + \mathbf{k}\dot{\mathbf{u}}.$$

В этом разложении мы ограничились первым приближением по параметру ρ' / ρ_0 , что допустимо в большинстве интересных случаев. Если, например, возмущение создается периодической звуковой волной, то, учитывая уравнение неразрывности

$$\dot{\rho} + \text{div} \rho \dot{\mathbf{u}} = 0,$$

мы имеем в том же приближении

$$\dot{\mathbf{u}} / v_0 = \rho' / \rho_0, \quad (46.3)$$

откуда

$$v = v_0 [1 + (u + \cos \theta_u) \rho' / \rho_0], \quad (46.4)$$

где θ_u — угол между направлением скорости $\dot{\mathbf{u}}$ и данным направлением в \mathbf{k} -пространстве¹⁾.

В линейном случае уравнение (46.2) можно записать непосредственно для функции $Z(\mathbf{x})$, определенной выражением (43.33). Если функция \mathcal{R}_0 является сферически симметричной, т. е. содержит только нулевую сферическую гармонику и не содержит первой, она не зависит от \mathbf{x} , и линейное уравнение для функции $Z(\mathbf{x})$ получается

¹⁾ Член, описывающий доплеровский сдвиг, имеет вид первой сферической гармоники. Поэтому наличие такого слагаемого в выражении для частоты фононов не меняет вида оператора поперечной релаксации.

следующим:

$$\frac{\partial Z}{\partial t} + v \kappa_i \frac{\partial Z}{\partial r_i} - \frac{\partial v}{\partial r_i} \kappa_i = - \frac{1}{4\tau_{\perp}} \hat{l}^2 (\hat{l}^2 + 2) Z. \quad (46.5)$$

Величину

$$\tau_{\perp} = \frac{v^{\mathcal{P}}(\mathcal{R}_0)}{M(\mathcal{R}_0)\mathcal{R}_0}, \quad (46.6)$$

фигурирующую в правой части этого уравнения и имеющую размерность времени, мы будем называть *поперечным временем релаксации*.

Найдем явную форму уравнения (46.2) в физически наиболее интересном случае, когда функция $\mathcal{R}(\kappa)$ обладает аксиальной симметрией. Выбрав ось симметрии в качестве оси z , мы, соответственно, должны считать, что функция \mathcal{R} зависит только от угла ϑ и пространственной координаты z . Далее

$$\kappa_x = \sin \vartheta \cos \varphi, \quad \kappa_y = \sin \vartheta \sin \varphi, \quad \kappa_z = \cos \vartheta$$

и, следовательно,

$$\begin{aligned} \hat{l}_x &= -\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} - \operatorname{ctg} \vartheta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi}, \\ \hat{l}_y &= \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} - \operatorname{ctg} \vartheta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi}, \quad \hat{l}_z = \frac{\partial}{\partial \varphi}. \end{aligned}$$

Отсюда оператор поперечной релаксации

$$\begin{aligned} v \left[\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial t} \right]_{\perp} &= \left[\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial t} \right]_{\perp} = \\ &= \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} M(\mathcal{R}) \sin^3 \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial \mathcal{R}}{\partial \vartheta}. \end{aligned} \quad (46.7)$$

и уравнение (46.2) записывается в виде ¹⁾

$$\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial t} + v \cos \vartheta \frac{\partial \mathcal{P}}{\partial z} + \frac{\partial v}{\partial z} \left(4 \cos \vartheta \mathcal{P} + \sin \vartheta \frac{\partial \mathcal{P}}{\partial \vartheta} \right) = \left[\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial t} \right]_{\perp}, \quad (46.2a)$$

где в качестве правой части нужно подставить (46.7).

¹⁾ Если гидродинамическая скорость \dot{u} отлична от нуля, мы считаем ее направленной вдоль оси z (иначе бы задача не обладала аксиальной симметрией). Соответственно, мы полагаем $\vartheta_u = \vartheta$.

Дифференциальное уравнение (46.2a) имеет по переменной ϑ четвертый порядок, так что мы должны поставить четыре граничных условия. Первые два условия выражают сохранение плотности энергии фоновой системы при фоновых столкновениях; умножая (46.7) на $\sin \vartheta d\vartheta$ и интегрируя от 0 до π , мы должны получить нуль. Соответственно, мы имеем

$$\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} M(\mathcal{R}) \sin^3 \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial \mathcal{R}}{\partial \vartheta} \Big|_{\vartheta=0, \pi} = 0. \quad (46.8)$$

Эти условия означают, что в точках $\vartheta = 0, \pi$ отсутствуют источники энергии.

Если же такой источник имеется, например, при $\vartheta = 0$, соответствующее граничное условие приобретает вид

$$\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} M(\mathcal{R}) \sin^3 \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial \mathcal{R}}{\partial \vartheta} \Big|_{\vartheta=0} = \frac{B}{2\pi}, \quad (46.8a)$$

где B — константа. Такое граничное условие следует, например, ставить, если высокочастотный ($\omega \tau_{\parallel} \gg 1$) звук поглощается фоновой системой. В этом случае, как мы видели в § 34, в поглощении непосредственно участвуют только фононы с волновыми векторами, параллельными направлению распространения звука, так что постоянная B должна быть равна звуковой энергии, поглощаемой в одну секунду в единичном объеме.

Два других граничных условия выражают сохранение z -компоненты импульса. z -компонента импульса фоновой системы с волновым вектором k равна $\hbar k \cos \vartheta$. Соответственно, умножая (46.7) на $\cos \vartheta \sin \vartheta d\vartheta$, интегрируя один раз по частям и воспользовавшись соотношениями (46.8), в силу которых внеинтегральный член обращается в нуль, мы получаем

$$M(\mathcal{R}) \sin^3 \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial \mathcal{R}}{\partial \vartheta} \Big|_{\vartheta=0, \pi} = 0. \quad (46.9)$$

Если бы при $\vartheta = 0$ существовал источник энергии за счет поглощаемого звука, то в той же точке был бы и источник импульса. Тогда в правой части выражения (46.9) для $\vartheta = 0$ следовало бы написать постоянную $B/2\pi$, равную мощности источника импульса, умноженной на v . Но, с другой стороны, при выводе выражения (46.9),

интегрируя по частям, мы должны были бы воспользоваться формулой (46.8a), а не (46.8). В результате постоянные $V/2\pi$ сократились бы, и граничное условие (46.9) осталось неизменным.

Обсудим, каков порядок величины оператора поперечной релаксации. Поскольку этот оператор дифференциальный, его порядок величины определяется размером интервала углов, где функция $\mathcal{R}(\theta)$ испытывает существенное изменение. Соответственно, мы будем различать *широкоугольную* и *узкоугольную* релаксацию.

В первом случае характерные размеры углового интервала — это весь телесный угол, т. е. они порядка единицы. Характерная величина оператора — это время поперечной релаксации:

$$\left[\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial t} \right]_{\perp} \simeq \frac{\mathcal{P}}{\tau_{\perp}}. \quad (46.10)$$

Характерный размер углового интервала в случае узкоугольной релаксации обозначим через θ_c . По определению узкоугольной релаксации $\theta_c \ll 1$. Тогда из (46.7) следует порядковая оценка

$$\left[\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial t} \right]_{\perp} \simeq \frac{\mathcal{P}}{\theta_c^4 \tau_{\perp}}. \quad (46.11)$$

Если этот угловой интервал расположен в окрестности $\theta = 0$, выражение для оператора (46.7) можно представить в виде

$$v \left[\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial t} \right]_{\perp} = \frac{1}{\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \frac{1}{\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \theta^3 M(R) \frac{\partial}{\partial \theta} \frac{1}{\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \mathcal{R}. \quad (46.12)$$

Таким образом, выражение для дифференциального оператора $[\partial \mathcal{P} / \partial t]_{\perp}$ упрощается, если угловой интервал θ_c мал. С другой стороны, на этот интервал должно также существовать ограничение снизу, так как если он очень мал, т. е. если функция $\mathcal{R}(\theta)$ изменяется весьма резко, релаксацию нельзя описывать дифференциальным оператором. Выясним, какой вид имеет это ограничение.

Физическая картина, использованная при расчете оператора $[\partial \mathcal{P} / \partial t]_{\perp}$, основана на предположении, что в системе фононов можно выделить быстрые релаксационные процессы с характерным временем τ_{\parallel} и медленные про-

цессы с характерным временем $\tau_{\perp} \theta_c^4$, большим по сравнению с τ_{\parallel} . Отсюда получается неравенство

$$\theta_c^4 \gg \tau_{\parallel} / \tau_{\perp}. \quad (46.13)$$

Если для описания фонон-фононных столкновений применима теория возмущений, то по порядку величины $\tau_{\parallel} / \tau_{\perp} \simeq \xi^2$, и это неравенство переписывается в виде

$$\theta_c^2 \gg \xi. \quad (46.14)$$

В заключение раздела обсудим следующий вопрос. Как показывает расчет, проделанный в § 45, имеются два фактора, чье одновременное действие определяет как порядок оператора поперечной релаксации (четвертый), так и его конкретный вид: 1) характеристический угол θ между сталкивающимися фононами мал; 2) малость θ определяется малостью дисперсионного параметра ξ .

С другой стороны, очевидно, что в каком-то достаточно высоком приближении по малым параметрам в операторе поперечной релаксации должен появиться, кроме сверхдиффузионного, и обычный диффузионный член. Он будет описываться дифференциальным оператором второго порядка. Выясним, в каком приближении возникает такой член и какой малый параметр позволяет его отбросить в нашем случае. Для этого изучим по отдельности влияние на поперечную релаксацию малости угла рассеяния и малости дисперсии, т. е. «развяжем» действие этих двух факторов. С этой целью рассмотрим модельный пример, где характерный угол рассеяния θ является малым вследствие того, что сечение рассеяния быстро спадает как функция θ , безотносительно к характерному значению дисперсионного параметра ξ .

Поскольку углы рассеяния малы, законы сохранения угловых плотностей энергии и импульса по-прежнему можно записать в дифференциальной форме

$$\dot{\mathcal{H}} = -\hat{l} \mathbf{J}, \quad v \dot{\mathcal{P}} = -(\hat{l}_j \hat{l}_m + \delta_{jm}^{\perp}) K_{jm},$$

где

$$J_i = D \hat{l}_i T^{-1} + \dots, \quad (46.15)$$

$$K_{jm} = M_{jm, in} (\hat{l}_n \hat{l}_i + \delta_{ni}^{\perp}) \frac{v}{T} + \dots; \quad (46.16)$$

многоточия обозначают слагаемые, содержащие более

высокие степени операторов \widehat{l}_i^1). Первое слагаемое в (46.15) и есть член, описывающий обычную диффузию на поверхности единичной сферы (которую мы хотим оценить и сравнить со сверхдиффузией). Подставив его в (43.16), мы находим вклад в \dot{S} от обычной диффузии:

$$\dot{S} = - \int d\Omega T^{-1} \widehat{l} \widehat{J} = \int d\Omega \widehat{J} \widehat{l} T^{-1} = \int d\Omega D \left(\widehat{l} \frac{1}{T} \right)^2.$$

Мы хотим выяснить, как зависит коэффициент диффузии D по отдельности от характерных значений угла рассеяния θ и дисперсионного параметра ξ .

Как явствует из формулы (45.3), в интересующем нас случае $\hbar A \ll 1$ операторная структура выражения для S есть по существу операторная структура среднего $\langle A^2 \rangle_{\phi}$. Соответственно, обратимся к выражению (45.5) и определим, какие члены после указанного усреднения дадут слагаемое, пропорциональное $(\widehat{l} T^{-1})^2$. Это, очевидно, может быть только первое слагаемое в квадратных скобках при $1/T$. Чтобы оценить его по порядку величины, запишем член в круглых скобках в виде

$$\Omega' \theta' - \Omega''' \theta''' = v[(1 + \xi') k' \theta' - (1 + \xi''') k''' \theta'''].]$$

С учетом соотношения $k' \sin \theta' = k''' \sin \theta'''$, это выражение переписывается как

$$v[(\theta' - \sin \theta') k' - (\theta''' - \sin \theta''') k'''] + v(\xi' k' \theta' - \xi''' k''' \theta''') = \\ = \frac{v}{6} (k' \theta'^3 - k''' \theta'''^3) + v(\xi' k' \theta' - \xi''' k''' \theta''').$$

¹⁾ Используя соображения симметрии, можно убедиться, что перекрестные члены — слагаемое $C_{i,jm} \widehat{l}_j \widehat{l}_m \frac{1}{T}$ в выражении для J_i или же слагаемое $C'_{jm,i} \widehat{l}_i T^{-1}$ — в выражении для K_{jm} писать не надо.

Действительно, псевдотензоры $C_{i,jm}$ и $C_{jm,i}$ должны быть пропорциональны друг другу в силу соотношений Онсагера. С другой стороны, в силу изотропии гелия каждый из этих псевдотензоров может быть пропорционален только совершенно антисимметричному псевдотензору e_{ijm} , т. е. должно быть: $C_{i,jm} = C e_{ijm}$, $C'_{jm,i} = C' e_{ijm}$. И, наконец, в силу соотношений (43.13) $\kappa_j' \widehat{l}_{jm,i} = C' e_{ijm}^{\Delta} = 0$, откуда $C' = C = 0$.

Умножая это выражение на $n \widehat{l}$, возводя в квадрат и выполняя усреднение, мы приходим к следующему выводу. Коэффициент диффузии D имеет порядок величины θ^6 , если $\theta^2 \gg \xi$, или же порядок $\theta^2 \xi^2$ при $\theta^2 \ll \xi$. Следующий же член, содержащий произведение четырех операторов \widehat{l}_i , как явствует из разложения (45.5), пропорционален θ^4 и в обсуждаемом случае не содержит малого параметра, непосредственно связанного с дисперсией. Что же касается членов более высокого порядка по \widehat{l}_i , то, как можно убедиться, все они оказываются меньше либо первого (диффузионного) члена, либо второго (сверхдиффузионного) в отношении одного из двух малых параметров, ξ или θ^2 .

Из сказанного следует, что при $\theta^2 \gg \xi$ диффузионный член всегда можно отбросить, так как он имеет порядок θ^6 , а учтенный — порядок θ^4 . Если же $\theta^2 \ll \xi$, то диффузионный член преобладает при $\theta^2 \xi^2 \gg \theta^4$, т. е. при $\xi^2 \gg \theta^2$.

В случае, который мы изучили в § 45, $\theta^2 \simeq \xi$, так что коэффициент диффузии D имеет порядок ξ^3 , в то время как коэффициент M — порядок ξ^2 . Следовательно, в этом случае мы оправдали возможность пренебречь диффузией, на чем и базируется наша теория.

§ 47. Поглощение звука в гелии II при низких температурах

В настоящем разделе мы рассмотрим теорию поглощения звука в He II в фоновой области температур. Ограничимся рассмотрением звука достаточно малой интенсивности, так что для анализа его поглощения применима линейная теория.

Наличие двух резко различающихся времен релаксации, τ_{\parallel} и τ_{\perp} , позволяет выделить три интервала звуковых частот ω , в которых поглощение может быть исследовано аналитически:

- 1) $\omega \ll \tau_{\perp}^{-1}$;
- 2) $\tau_{\perp}^{-1} \ll \omega \ll \tau_{\parallel}^{-1}$;
- 3) $\tau_{\parallel}^{-1} \ll \omega$.

Выражение для поглощения в частотном интервале 3)

получено в § 34 (формула (34.35)). В настоящем разделе будет изучено поглощение в частотных интервалах 1) и 2).

Как мы видели в § 27, коэффициент поглощения γ есть отношение энергии $\mathcal{V}T\bar{S}$, диссипирующей в 1 с, к полной механической энергии, равной

$$\mathcal{V}\rho\bar{u}^2 = \mathcal{V}v^2\bar{\rho}'^2/\rho_0,$$

так что

$$\gamma = \rho_0 T \bar{S} / v_0^2 \bar{\rho}'^2. \quad (47.1)$$

Здесь черта (как и в § 27) обозначает усреднение по периоду звука (или же по длине звуковой волны). Воспользовавшись выражением (43.40) для \bar{S} и определением (46.6) времени τ_{\perp} , мы имеем, усреднив по периоду,

$$\bar{S} = \frac{1}{2\tau_{\perp}} v_0 \mathcal{P}(\mathcal{R}_0) \mathcal{R}_0 \operatorname{Re} \int d\omega Z^* \hat{l}^2 (\hat{l}^2 + 2) Z. \quad (47.2)$$

Далее будет удобно выделить в функции $Z(\kappa)$ множитель ρ'/ρ_0 , положив

$$Z = -(\rho'/\rho_0) \mathfrak{Z}. \quad (47.3)$$

В силу аксиальной симметрии задачи функции \mathfrak{Z} зависят только от θ . Она удовлетворяет следующему уравнению с комплексными коэффициентами:

$$\left[1 - \cos \theta + \frac{i}{4\omega\tau_{\perp}} \hat{l}^2 (\hat{l}^2 + 2) \right] \mathfrak{Z} = (\kappa + \cos \theta) \cos \theta \quad (47.4)$$

(здесь мы воспользовались выражением (46.4) для добавки к скорости фононов). Выражая из этого уравнения член $\tau_{\perp}^{-1} \hat{l}^2 (\hat{l}^2 + 2) \mathfrak{Z}$ и подставляя в (47.2), а (47.2) — в (47.1), мы получаем для коэффициента поглощения

$$\gamma = \frac{\pi^2}{15} \frac{\omega T^4}{\rho_0 \hbar^3 v_0^5} \operatorname{Im} \mathcal{F}, \quad (47.5)$$

где

$$\mathcal{F} = \int_0^{\pi} d\theta \sin \theta \cos \theta (\kappa + \cos \theta) \mathfrak{Z}^*. \quad (47.6)$$

В частотной области 1) ищем решение уравнения (47.4) в виде ряда по сферическим гармоникам. Первые

члены разложения легко находятся сравнением левой и правой частей уравнения; мы выпишем три первых члена

$$\mathfrak{Z}(\theta) = \frac{1+\kappa}{2} + \frac{1+3\kappa}{2} \cos \theta - \frac{i\omega\tau_{\perp}}{120} (1+\kappa) [1 + 3 \cos \theta + 5(1 + 3 \cos 2\theta)]. \quad (47.7)$$

Структура ряда такова: коэффициент при нулевой степени малого параметра $\omega\tau_{\perp}$ содержит нулевую и первую сферические гармоники; будучи вещественным, вклад в поглощение он не дает. Коэффициент при первой степени $\omega\tau_{\perp}$ содержит сферические гармоники вплоть до второй. Будучи чисто мнимым, он и определяет основной вклад в поглощение. Далее с ростом степени $\omega\tau_{\perp}$ растут и номера сферических гармоник.

Подставляя (47.7) в (47.6) и затем в (47.5), получаем для коэффициента поглощения

$$\gamma = \frac{\pi^2 (\kappa + 1)^2 \omega^2 T^4 \tau_{\perp}}{225 \rho_0 \hbar^3 v_0^5}. \quad (47.8)$$

Это выражение совершенно аналогично формулам (27.28) и (30.15) для твердых диэлектриков: оно пропорционально ω^2 , квадрату константы ангармонизма $1 + \kappa$ и, наконец, характерному времени установления равновесия в системе. Отличительная особенность системы фононов с малой дисперсией скорости звука заключается в том, что это характерное время есть τ_{\perp} ¹⁾.

Чтобы представить себе характер решения уравнения (47.4) в частотной области 2), пренебрежем сначала релаксационным членом. Это дает

$$\mathfrak{Z}(\theta) = \frac{(\kappa + \cos \theta) \cos \theta}{1 - \cos \theta},$$

¹⁾ Как и в твердых телах, коэффициент поглощения звука в гелии II можно было бы выразить через соответствующий коэффициент вязкости. Расчет поглощения при $\omega\tau_{\perp} \ll 1$ эквивалентен вычислению этого коэффициента вязкости. Численный расчет вязкости гелия II за счет трехфононных столкновений проделал Марис (Н. J. Maris, 1973), а аналитический расчет — Бенин (D. Benin, 1975).

Оценки τ_{\perp} , использующие экспериментальные значения коэффициента вязкости, дают при $T = 0,6$ К и атмосферном давлении значение порядка 10^{-5} с. Таким образом, частотный интервал 1) весьма невелик уже на границе фононной области температур и становится еще меньше при понижении температуры.

что при $\vartheta \ll 1$ переходит в

$$\Im(\vartheta) = \frac{2(u+1)}{\vartheta^2}.$$

При убывании ϑ это выражение растет как ϑ^{-2} до тех пор, пока не начинает играть роль релаксационный член. Последний при малых ϑ , как мы видели в § 46, можно представить в виде

$$\frac{1}{\tau_{\perp}} \hat{l}^2 (\hat{l}^2 + 2) \approx \frac{1}{\tau_{\perp}} \left(\frac{1}{\vartheta} \frac{d}{d\vartheta} \vartheta \frac{d}{d\vartheta} \right)^2.$$

По порядку величины это выражение равно $1/\tau_{\perp} \vartheta^4$, так что решение уравнения (47.4) можно записать в виде

$$\Im(\vartheta) = \frac{(u + \cos \vartheta) \cos \vartheta}{1 - \cos \vartheta + (i/4\omega\tau_{\perp}) \vartheta^{-4}}. \quad (47.9)$$

Из этого выражения видно, что вклад от поперечной релаксации начинает играть роль при углах $\vartheta_c \approx (\omega\tau_{\perp})^{-1/6}$. При $1 \gg \vartheta \gg \vartheta_c$ это выражение является точным; при $\vartheta \lesssim \vartheta_c$ оно имеет смысл порядковой оценки.

Обратимся к исследованию интеграла \mathcal{F} , фигурирующего в выражении (47.5) для коэффициента поглощения. В отсутствие поперечной релаксации интеграл логарифмически расходится при малых ϑ , следовательно, он логарифмически велик. Приближенный метод, основанный на использовании выражения (47.9), в принципе и может дать только логарифмическую точность. Ограничиваясь этой точностью, можно сделать в подынтегральном выражении дальнейшие упрощения, записав интеграл в виде

$$\mathcal{F} = (u+1) \int_0^{\vartheta} \frac{\vartheta d\vartheta}{\vartheta^{2/2} - i/4\omega\tau_{\perp} \vartheta} \quad (47.10)$$

(при ϑ порядка единицы подынтегральное выражение имеет нужный порядок величины, что обеспечивает принятую точность; соответственно, верхний предел также считается порядка единицы). Вычисляя интеграл, находим, что с логарифмической точностью

$$\mathcal{F} = \frac{1}{3}(u+1)(\ln \omega\tau_{\perp} + i\pi/2), \quad (47.11)$$

откуда коэффициент поглощения

$$\gamma = \frac{\pi^3}{90} \frac{(u+1)^2 \omega T^4}{\rho_0 \hbar^3 v_0^5}. \quad (47.12)$$

Сравнивая это выражение с (34.35), убеждаемся, что γ обладает такой же частотой и температурной зависимостью, как и в частотном интервале 3), однако численный коэффициент в интервале 2) получается в шесть раз меньше.

Такой численный множитель обусловлен специфической структурой оператора поперечной релаксации. Чтобы лучше понять происхождение дополнительного множителя $1/6$, посмотрим, чему был бы равен интеграл типа (47.10), если бы оператор поперечной релаксации не имел особенности при малых ϑ , так что его с логарифмической точностью можно было бы считать некоторой постоянной величиной τ . Мы имели бы

$$\mathcal{F} = (u+1) \int_0^{\vartheta} \frac{\vartheta d\vartheta}{\vartheta^{2/2} - i/4\omega\tau} = (u+1)(\ln \omega\tau + i\pi/2),$$

т. е. результат получился бы в три раза больше, чем (47.11). Этот результат соответствует случаю б) § 34: дисперсионная добавка к частоте фонона гораздо меньше неопределенности $1/\tau$, приносимой затуханием. Выражение же (34.35), с которым мы сравниваем формулу (47.12), соответствует случаю а), когда соотношение между этими величинами обратное. Как показано в § 34, коэффициент поглощения в случае а) оказывается вдвое больше, чем в случае б); тем самым объясняется появление дополнительного множителя 6 в частотной области 3).

§ 48. Распывание пучка фононов в гелии II

Еще одним эффектом, в котором определяющую роль играет поперечная релаксация, является распывание узкого фононного пучка в гелии II¹⁾. Эффект заключается в следующем.

В гелий II помещался проводник, который нагревался пропускаемым через него током. Нагретый проводник

¹⁾ Этот эффект наблюдался в работе Миллса, Шерлока и Виятта (N. G. Mills, R. A. Sherlock, A. F. G. Wyatt, 1975).

излучал фононы в гелий во всех направлениях. Распространение фононов ограничивалось диафрагмами таким образом, что возникал достаточно узкоугловой фононный пучок, т. е. такой пучок, который занимал угловой интервал гораздо меньше 4π (см. рис. 10, где изображена схема данного эксперимента). А далее на опыте изучалось пространственное и угловое распределение фононов в пучке как функция расстояния до источника фононов и наблюдалось дополнительное уширение фононного пучка по сравнению с тем, что было бы, если бы фононы распространялись без столкновений, по законам геометрической

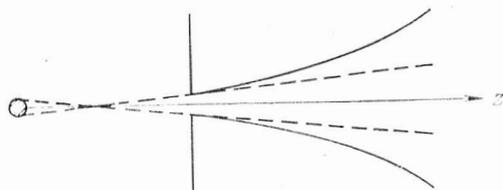


Рис. 10.

акустики. На рисунке пунктиром показаны границы пучка, которые он должен был бы иметь, в соответствии с законами геометрической акустики, а сплошными линиями — истинные его «границы» (фактически, разумеется, нерезкие), определяемые уширением вследствие сверхдиффузии фононов.

Другое явление такого типа, более простое с точки зрения теории, — это излучение фононов в гелий II нагретой твердой поверхностью. Скорости звука в обычных твердых телах примерно на порядок больше скорости звука в гелии II. Соответственно, если твердая поверхность может с высокой точностью считаться плоской, угловое распределение неравновесных фононов, излученных в гелий, должно быть достаточно острым: даже в том случае, если угол падения фонона из твердого тела на границу раздела с гелием близок к $\pi/2$, угол преломления порядка отношения скорости звука в гелии к скоростям звука в твердом теле, т. е. мал. Из сказанного можно сделать вывод, что в гелий должен излучаться «иглообразный» пучок фононов; по мере удаления от излучающей стенки

это острое распределение должно уширяться процессами сверхдиффузии¹⁾.

В данном разделе мы изложим теорию уширения фононного пучка. Будет рассмотрен случай, когда отклонение температуры фононов в пучке от ее значения в ванне с гелием относительно мало, так что эволюция интенсивности пучка описывается линейной теорией (Б. Д. Лайхтман, А. В. Ломакин, 1976).

Уравнение (46.5) для функции $Z(\mathbf{r}, \boldsymbol{\kappa})$, характеризующее неравновесную интенсивность фононов в пучке, имеет в нашем случае вид

$$v\kappa_z \frac{\partial Z}{\partial z} + v\kappa_i \frac{\partial Z}{\partial r_i} = -\frac{1}{4\tau_{\text{д}}} \hat{l}^2 (\hat{l}^2 + 2) Z \quad (48.1)$$

(ось z параллельна направлению распространения пучка; векторный индекс i соответствует поперечным координатам и принимает значения 1, 2).

Поскольку фононный пучок является узким ($\theta_c \ll 1$), можно упростить как левую часть уравнения (48.1), так и выражение для оператора поперечной релаксации в правой части. Нужно, однако, иметь в виду, что соответствующее упрощенное выражение в данном случае не имеет вида (46.7), поскольку функция $Z(\boldsymbol{\kappa}, r)$, вообще говоря, не имеет аксиальной симметрии как функция направления $\boldsymbol{\kappa}$. Для того чтобы понять характер этих упрощений, вернемся к картине функции $Z(\boldsymbol{\kappa})$, заданной на поверхности единичной сферы. Узкоугловое распределение фононов задано на малом участке поверхности сферы. Упрощение, о котором идет речь, означает, что мы будем приближенно считать этот малый участок плоским.

Соответственно, мы будем полагать $|\kappa_x|, |\kappa_y| \ll 1$, $|\kappa_z| = 1$. Тогда

$$\hat{l}_x = -\frac{\partial}{\partial \kappa_y}, \quad \hat{l}_y = \frac{\partial}{\partial \kappa_x}, \quad \hat{l}_z \ll \hat{l}_x, \hat{l}_y; \quad (48.2)$$

слагаемым 2 в (48.1) можно пренебречь по сравнению

¹⁾ Этот эффект также наблюдался Миллсом, Вяттом и Шерлоком (1974). В их эксперименте распределение излучавшихся фононов содержало иглообразную часть, накладывавшуюся на плавно изменяющийся фон (происхождение которого пока не вполне ясно).

с оператором \widehat{L}^2 , и уравнение (48.1) сводится к виду

$$\frac{\partial Z}{\partial z} + \kappa \frac{\partial Z}{\partial r} = -\frac{1}{4v\tau_{\perp}} \left(\sum_i \frac{\partial^2}{\partial^2 \kappa_i} \right)^2 Z. \quad (48.3)$$

Далее в настоящем разделе κ и r будут обозначать двумерные векторы.

Уравнение (48.3) будет решаться при граничных условиях:

$$Z \Big|_{r_i \rightarrow \pm\infty} \rightarrow 0, \quad Z \Big|_{\kappa_i \rightarrow \pm\infty} \rightarrow 0. \quad (48.4)$$

Они означают, что фононный пучок занимает ограниченную область как в реальном пространстве, так и в пространстве направлений κ . Кроме того, еще одним граничным условием должна служить граничная форма пучка, т. е. вид функции $Z(r, \kappa)$ при $z=0$.

Начнем с качественного анализа поставленной задачи, а именно: с анализа асимптотического поведения пучка фононов на больших расстояниях от места генерации, т. е. при достаточно больших z . Для этого заметим, что уравнение (48.3) инвариантно относительно масштабного преобразования

$$\kappa_i \rightarrow \lambda \kappa_i, \quad z \rightarrow \lambda^4 z, \quad r_i \rightarrow \lambda^5 r_i, \quad (48.5)$$

где λ — произвольный масштабный фактор. Соответственно, асимптотическое решение уравнения (48.3) должно иметь вид

$$Z = Z(\kappa_i z^{-1/4}, r_i z^{-5/4}), \quad (48.6)$$

т. е. зависеть от таких комбинаций переменных, которые инвариантны относительно масштабного преобразования.

Обозначая характерные значения κ_i , т. е. характерный интервал углов фононного пучка посредством ϑ_c , мы находим отсюда, что $\vartheta_c \sim z^{1/4}$. Единственная постоянная размерности длины, фигурирующая в уравнении (48.3), есть $v\tau_{\perp}$; она и должна обезразмеривать координату z , так что

$$\vartheta_c \simeq (z/v\tau_{\perp})^{1/4}. \quad (48.7)$$

Аналогичным образом, для пространственного уширения фононного пучка Δr мы имеем

$$\Delta r \simeq z(v\tau_{\perp})^{1/4}. \quad (48.8)$$

Чтобы понять, когда справедливы эти оценки, заметим, что относительно масштабного преобразования (48.5) инвариантно, вообще говоря, только уравнение (48.3), но отнюдь не граничное условие, задающее граничную форму пучка при $z=0$. Это значит, что зависимости (48.7) и (48.8) имеют место на таких расстояниях от источника фононов, где точный вид граничного условия уже перестает сказываться. Для этого характерное угловое и пространственное уширение фононного пучка должно быть заметно больше граничных значений этих величин, обозначаемых, соответственно, ϑ_g и r_g :

$$(z/v\tau_{\perp})^{1/4} \gg \vartheta_g, \quad z(v\tau_{\perp})^{1/4} \gg \Delta r_g. \quad (48.9)$$

При этом, однако, должно оставаться применимым малоугловое приближение:

$$(z/v\tau_{\perp})^{1/4} \ll 1. \quad (48.10)$$

Если бы уширение пучка фононов определялось обычной диффузией между различными направлениями, то в соотношениях (48.7) и (48.8) фигурировал бы показатель $1/2$ вместо $1/4$. Таким образом, уширение фононного пучка вследствие сверхдиффузии происходит по закону, более медленному, чем при обычной диффузии.

Уравнение, описывающее излучение пучка фононов твердой нагретой стенкой, имеет более простой вид, чем (48.1), так как функция Z в этом случае не зависит от поперечных координат r_i . Для узкого пучка оно имеет форму

$$\frac{\partial Z}{\partial z} + \frac{1}{4v\tau_{\perp}} \left(\sum_{i=1,2} \frac{\partial^2}{\partial \kappa_i^2} \right)^2 Z = 0. \quad (48.11)$$

Исследование, аналогичное проделанному выше, показывает, что если удовлетворено неравенство (48.10) и первое из неравенств (48.9), то характерная ширина пучка изменяется с координатой по закону (48.7).

Переходим к аналитическому решению линейной задачи о сверхдиффузии узкого фононного пучка. Решение, как мы увидим, окажется сравнительно сложным. Все же его ход стоит описать подробно, так как этот вопрос представляет заметный методический интерес. Дело в том, что удастся получить решение уравнения (48.3) при

δ -образной начальной форме пучка:

$$Z|_{z=0} = \mathcal{A} \delta^{(2)}(\kappa_i) \delta^{(2)}(r_i). \quad (48.12)$$

Решение с таким граничным условием есть фактически функция Грина уравнения (48.3): решение этого уравнения при произвольном граничном условии представляет собой интеграл от решений с δ -образными граничными условиями. Таким образом, решение, которое мы сейчас получим, может служить основой для анализа разнообразных экспериментальных ситуаций.

Постоянную \mathcal{A} в (48.12) можно выразить через полный поток энергии \mathcal{G} , переносимый пучком фононов. Полный поток энергии равен

$$\mathcal{G} = -\frac{\pi}{30} \frac{T^4}{\hbar^3 v^2} \int \int d^2r d^2\kappa Z(z, \kappa, r).$$

Эта величина, очевидно, должна сохраняться, т. е. не зависеть от координаты z . Поэтому, чтобы вычислить \mathcal{G} , можно подставить в интеграл значение функции Z при $z=0$, которое дается выражением (48.12). Отсюда получаем связь между постоянными \mathcal{G} и \mathcal{A} :

$$\mathcal{G} = -\frac{\pi}{30} \frac{T^4}{\hbar^3 v^2} \mathcal{A}. \quad (48.13)$$

Мы будем считать, что величина \mathcal{G} задается условиями опыта, и выразим через нее наш ответ.

Для того чтобы вычислить функцию $Z(z, \kappa, r)$, произведем преобразование Фурье по четырем переменным κ_i, r_i , положив

$$Z(z, \kappa, r) = (2\pi)^{-4} \int d^2\tilde{r} d^2\tilde{\kappa} \exp[i(\tilde{r}\tilde{r} + \tilde{\kappa}\tilde{\kappa})] \tilde{Z}(z, \tilde{\kappa}, \tilde{r}). \quad (48.14)$$

Умножая уравнение (48.3) на $\exp[-i(\tilde{r}\tilde{r} + \tilde{\kappa}\tilde{\kappa})]$ и интегрируя по d^2r и $d^2\kappa$, получаем после интегрирования по частям, с учетом граничных условий (48.4), следующее уравнение для образа Фурье \tilde{Z} :

$$\frac{\partial \tilde{Z}}{\partial z} + \tilde{r} \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial \tilde{\kappa}} = -\frac{1}{4v\tau_{\perp}} \tilde{\kappa}^2 \tilde{Z}. \quad (48.15)$$

Из (48.12) следует граничное условие

$$\tilde{Z}|_{z=0} = \mathcal{A}. \quad (48.16)$$

Для решения уравнения (48.15) перейдем от переменных $\tilde{\kappa}_1, \tilde{\kappa}_2$ к новым переменным α_1, α_2 , согласно

$$\alpha_{1,2} = \frac{1}{2} \left(\frac{\tilde{\kappa}_1}{r_1} \pm \frac{\tilde{\kappa}_2}{r_2} \right).$$

В новых переменных уравнение (48.15) запишется в виде

$$\frac{\partial \tilde{Z}}{\partial z} + \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial \alpha_1} = -\frac{1}{4v\tau_{\perp}} [\tilde{r}_1^2 (\alpha_1 + \alpha_2)^2 + \tilde{r}_2^2 (\alpha_1 - \alpha_2)^2] \tilde{Z}.$$

Его решение с граничным условием (48.16) есть

$$\tilde{Z} = \mathcal{A} \exp \left\{ -\frac{1}{4v\tau_{\perp}} \int_{\alpha_1-z}^{\alpha_1} [\tilde{r}_1^2 (\alpha'_1 + \alpha_2)^2 + \tilde{r}_2^2 (\alpha'_1 - \alpha_2)^2] d\alpha'_1 \right\}.$$

Интеграл в показателе легко вычисляется и оказывается равным

$$\begin{aligned} & \frac{1}{5} \tilde{r}_1^4 [(\alpha_1 + \alpha_2)^5 - (\alpha_1 + \alpha_2 - z)^5] + \\ & + \frac{1}{5} \tilde{r}_2^4 [(\alpha_1 - \alpha_2)^5 - (\alpha_1 - \alpha_2 - z)^5] + \\ & + 2\tilde{r}_1^2 \tilde{r}_2^2 \left\{ \frac{1}{5} [\alpha_1^5 - (\alpha_1 - z)^5] - \frac{2}{3} \alpha_2^2 [\alpha_1^3 - (\alpha_1 - z)^3] + \alpha_2^4 z \right\}. \end{aligned}$$

Возвращаясь к старым переменным $\tilde{\kappa}_1, \tilde{\kappa}_2$, получаем следующее выражение для решения уравнения (48.15):

$$\tilde{Z}(z, \tilde{r}, \tilde{\kappa}) = \mathcal{A} \exp \left(-\frac{z}{4v\tau_{\perp}} \sum_{n=1}^5 b_n z^{n-1} \right), \quad (48.17)$$

где введены обозначения

$$\begin{aligned} b_1 &= \kappa^4, \\ b_2 &= -[2(\tilde{\kappa}_1^3 \tilde{r}_1 + \tilde{\kappa}_2^3 \tilde{r}_2) + 2\tilde{\kappa}_1 \tilde{\kappa}_2 (\tilde{\kappa}_1 \tilde{r}_2 + \tilde{\kappa}_2 \tilde{r}_1)], \\ b_3 &= 2(\tilde{\kappa}_1^2 \tilde{r}_1^2 + \tilde{\kappa}_2^2 \tilde{r}_2^2) + \frac{2}{3}(\tilde{\kappa}_1^2 \tilde{r}_2^2 + \tilde{\kappa}_2^2 \tilde{r}_1^2 + 4\tilde{\kappa}_1 \tilde{\kappa}_2 \tilde{r}_1 \tilde{r}_2), \end{aligned} \quad (48.18)$$

$$b_4 = -(\tilde{\kappa}_1 \tilde{r}_1^3 + \tilde{\kappa}_2 \tilde{r}_2^3 + \tilde{\kappa}_1 \tilde{r}_1 \tilde{r}_2^2 + \tilde{\kappa}_2 \tilde{r}_2 \tilde{r}_1^2), \quad (48.18)$$

$$b_5 = \tilde{r}^4/5.$$

Получившееся выражение дает решение поставленной задачи. Полезно, однако, представить его в более простом виде. Для этого учтем, что задача с граничным условием (48.12) обладает цилиндрической симметрией, так что в выражениях для коэффициентов b_n имеет смысл перейти к цилиндрическим координатам с помощью преобразований:

$$\begin{aligned} \tilde{r}_1 &= r \cos \varphi_1, & \tilde{r}_2 &= r \sin \varphi_1, \\ \tilde{\kappa}_1 &= \kappa \cos \varphi_2, & \tilde{\kappa}_2 &= \kappa \sin \varphi_2, \\ \tilde{\kappa}_1 &= \kappa \cos \psi_2, & \tilde{\kappa}_2 &= \kappa \sin \psi_2. \end{aligned} \quad (48.19)$$

В новых переменных

$$\begin{aligned} b^2 &= -2\tilde{\kappa}^3 \tilde{r} \cos(\psi_1 - \psi_2), \\ b_3 &= \frac{2}{3} \tilde{\kappa}^2 \tilde{r}^2 [1 + 2 \cos^2(\psi_1 - \psi_2)], \quad (48.20) \\ b_4 &= -\tilde{\kappa} \tilde{r}^3 \cos(\psi_1 - \psi_2). \end{aligned}$$

Подставляя (48.17) в (48.14), получаем решение уравнения (48.3) в цилиндрических координатах

$$\begin{aligned} Z(z, \kappa, r, \varphi_1, \varphi_2) &= \frac{1}{(2\pi)^4} \int_0^\infty \tilde{d}\tilde{r} \tilde{r} \int_0^\infty \tilde{d}\tilde{\kappa} \tilde{\kappa} \int_0^{2\pi} d\psi_1 \int_0^{2\pi} d\psi_2 \times \\ &\times \tilde{Z}(z, \tilde{\kappa}, \tilde{r}, \psi_1 - \psi_2) \exp\{i[\tilde{r}\tilde{r} \cos(\varphi_1 - \psi_1) + \tilde{\kappa}\tilde{\kappa} \cos(\varphi_2 - \psi_2)]\}. \end{aligned} \quad (48.21)$$

Здесь функция $\tilde{Z}(z, \tilde{\kappa}, \tilde{r}, \psi)$ дается выражением (48.17), куда в качестве коэффициентов b_2, b_3, b_4 следует подставить выражения (48.20). Тот факт, что эта функция зависит только от разности $\psi = \psi_1 - \psi_2$, является отражением цилиндрической симметрии задачи и позволяет сократить число переменных, от которых зависит функция Z . Именно: рассмотрим некоторую пространственную точку r . Вследствие цилиндрической симметрии задачи функция

$Z(z, \kappa, r)$ в этой точке может зависеть только от разности углов $\varphi = \varphi_1 - \varphi_2$, а не от каждого из них по отдельности. Мы проследим сейчас это с помощью формальных математических преобразований.

Произведем в (48.21) замену переменных $\chi = \varphi_1 - \psi_1$. Тогда это выражение перепишется в виде

$$\begin{aligned} Z(z, \kappa, r, \varphi) &= (2\pi)^{-4} \int_0^\infty \tilde{d}\tilde{r} \tilde{r} \int_0^\infty \tilde{d}\tilde{\kappa} \tilde{\kappa} \int_0^{2\pi} d\psi \int_0^{2\pi} d\chi \tilde{Z}(z, \tilde{\kappa}, \tilde{r}, \psi) \times \\ &\times \exp\{i[\tilde{r}\tilde{r} \cos \chi + \tilde{\kappa}\tilde{\kappa} \cos(\varphi - \psi - \chi)]\}. \end{aligned} \quad (48.22)$$

Интегрирование по χ здесь легко выполняется. Для этого заметим, что

$$\begin{aligned} \tilde{r}\tilde{r} \cos \chi + \tilde{\kappa}\tilde{\kappa} \cos(\varphi - \psi - \chi) &= \\ &= [\tilde{r}\tilde{r} + \tilde{\kappa}\tilde{\kappa} \cos(\varphi - \psi)] \cos \chi + \tilde{\kappa}\tilde{\kappa} \sin(\varphi - \psi) \sin \chi = \\ &= \sqrt{(\tilde{r}\tilde{r})^2 + (\tilde{\kappa}\tilde{\kappa})^2 + 2\tilde{r}\tilde{r}\tilde{\kappa}\tilde{\kappa} \cos(\varphi - \psi)} \cos(\chi + \delta). \end{aligned}$$

Поскольку интегрирование по χ происходит по целому периоду, интеграл по χ не зависит от фазы δ (поэтому явное выражение для нее мы не приводим), и в результате интегрирования мы получим

$$\begin{aligned} Z(z, \kappa, r, \varphi) &= (2\pi)^{-3} \int_0^\infty \tilde{d}\tilde{r} \tilde{r} \int_0^\infty \tilde{d}\tilde{\kappa} \tilde{\kappa} \int_0^{2\pi} d\psi \times \\ &\times J_0 \left(\sqrt{(\tilde{r}\tilde{r})^2 + (\tilde{\kappa}\tilde{\kappa})^2 + 2\tilde{r}\tilde{r}\tilde{\kappa}\tilde{\kappa} \cos(\varphi - \psi)} \right) \tilde{Z}, \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} \tilde{Z}(z, \tilde{\kappa}, \tilde{r}, \psi) &= \mathcal{A} \exp \left\{ -\frac{z}{4v\tau_{\perp}} \left[\tilde{\kappa}^4 - 2\tilde{\kappa}^3 \tilde{r} \cos \psi + \right. \right. \\ &\left. \left. + \frac{2}{3} z^2 \tilde{\kappa}^2 \tilde{r}^2 (1 + 2 \cos^2 \psi) - z^3 \tilde{\kappa} \tilde{r}^3 \cos \psi + \frac{1}{5} z^4 \tilde{r}^4 \right] \right\}, \end{aligned} \quad (48.23)$$

а

$$J_0(t) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{it \cos \chi} d\chi$$

— функция Бесселя нулевого порядка.

Исследуем пространственную форму пучка неравновесных фононов, т. е. определим зависимость от координат

нат z и r переносимой ими плотности потока энергии G . Интегрируя по $d^2\kappa$ выражение (43.36) (умноженное на скорость v), мы получаем

$$G(z, r) = -\frac{\pi}{30} \frac{T^4}{\hbar^3 v^2} \int d^2\kappa Z(z, \kappa, r). \quad (48.24)$$

Этот интеграл представляет собой не что иное, как значение образа Фурье от функции $Z(z, \kappa, r)$ по переменной κ при $\tilde{\kappa} = 0$. Полагая в выражении (48.23) $\tilde{\kappa} = 0$, мы имеем

$$G(z, r) = -\frac{\pi}{30} \frac{T^4}{\hbar^3 v^2} \frac{\mathcal{A}}{(2\pi)^2} \int d^2\tilde{r} \exp(i\tilde{r}r) \exp\left(-\frac{z^5 \tilde{r}^4}{20v\tau_{\perp}}\right).$$

Опять-таки вследствие цилиндрической симметрии задачи поток энергии не зависит от угла, так что

$$G(z, r) = -\frac{\pi}{30} \frac{T^4}{\hbar^3 v^2} \frac{\mathcal{A}}{2\pi} \int_0^{\infty} d\tilde{r} \tilde{r} J_0(r\tilde{r}) \exp\left(-\frac{z^5 \tilde{r}^4}{20v\tau_{\perp}}\right).$$

Это выражение будет удобно представить в следующем виде:

$$G(z, r) = \mathcal{G} \left(\frac{20v\tau_{\perp}}{z^5}\right)^{1/2} \frac{1}{2\pi} f\left[\left(\frac{20v\tau_{\perp}}{z}\right)^{1/4} \frac{r}{z}\right]. \quad (48.25)$$

Здесь \mathcal{G} — полный поток энергии, определяемый выражением (48.13), а функция $f(x)$ есть

$$f(x) = \int_0^{\infty} J_0(xy) y e^{-y^4} dy. \quad (48.26)$$

Чтобы исследовать решение (48.25) в предельных случаях, потребуются предельные выражения функции $f(x)$ как при малых, так и при больших x . При малых x эту функцию можно аппроксимировать первыми членами ряда, получающегося при почленном интегрировании в (48.26) разложения функции

$$J_0(x) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m (x/2)^{2m}}{m! \Gamma(m+1)}.$$

Это дает

$$f(x) = \frac{1}{4} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m}{(m!)^2} \left(\frac{x}{2}\right)^{2m} \Gamma\left(\frac{m+1}{2}\right). \quad (48.27)$$

В частности, $f(0) = \sqrt{\pi}/4$.

Для определения асимптотического поведения функции $f(x)$ при больших x перепишем (48.26) в следующем виде:

$$f(x) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} dy y \int_0^{\pi} d\psi \exp(ixy \cos \psi - y^4),$$

и перейдем от переменных интегрирования y и ψ к переменным

$$\beta = y \sin \psi, \quad \gamma = y \cos \psi.$$

Якобиан перехода есть $1/y$, так что мы получаем

$$f(x) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\gamma \exp(ix\gamma - \gamma^4) \int_0^{\infty} d\beta \exp(-\beta^4 - 2\beta^2\gamma^2).$$

Сместим контур интегрирования в комплексной плоскости переменной γ , обходя точку $\gamma = 0$ сверху, после чего разложим внутренний интеграл по обратным степеням γ . В результате мы получим

$$f(x) = 2^{-3/2} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m! 2^{2m}} \Gamma\left(2m + \frac{1}{2}\right) \int \frac{d\gamma e^{ix\gamma - \gamma^4}}{\gamma^{4m+1}}. \quad (48.28)$$

Асимптотику оставшегося интеграла нетрудно найти методом перевала. Три перевальные точки

$$\gamma_{1,2,3} = (ix/4)^{1/3}$$

и положение перевального контура интегрирования C показаны на рис. 11. На том же рисунке заштрихованы секторы, где интеграл сходится ($\text{Re } \gamma^4 > 0$).

Главный член асимптотического ряда функции $f(x)$ дает первый член ряда (48.28):

$$f(x) \approx \frac{1}{2^{3/2} \pi^{1/2}} \int_C \frac{d\gamma}{\gamma} e^{ix\gamma - \gamma^4}.$$

Применяя к нему метод перевала, получаем

$$f(x) \approx \frac{2^{1/3}}{3^{1/2} x^{2/3}} \exp \left[-\frac{3}{2} \left(\frac{x}{4} \right)^{4/3} \right] \cos \left[\frac{3^{3/2}}{2} \left(\frac{x}{4} \right)^{4/3} - \frac{\pi}{3} \right]. \quad (48.29)$$

Вблизи оси пучка, где

$$r \ll z^{5/4} / (v\tau_{\perp})^{1/4},$$

интенсивность следует закону

$$G(z) = \frac{1}{4} \mathcal{G} \left(\frac{5v\tau_{\perp}}{\pi} \right)^{1/2} z^{-5/2},$$

т. е. убывает с расстоянием z как $z^{-5/2}$. Убывание обусловлено тем, что по мере распространения все большая доля интенсивности пучка переходит в процессе сверхдиффузии на его периферию. Распределение интенсивности на периферии, где

$$r \gg z^{5/4} / (v\tau_{\perp})^{1/4}$$

дается выражением (48.25), куда в качестве функции

$$f \left[\left(\frac{20v\tau_{\perp}}{z} \right)^{1/4} \frac{r}{z} \right]$$

следует подставить ее асимптотическое разложение (48.29). Интенсивность по мере увеличения координаты r убывает по экспоненциальному закону на

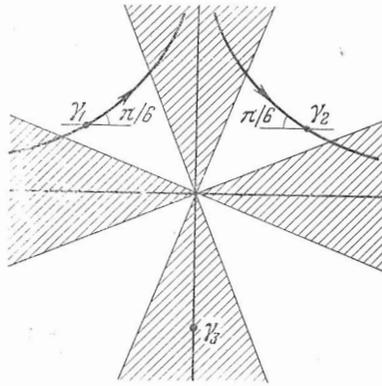


Рис. 11.

масштабе (48.8), однако не монотонно, а испытывая осцилляции того же масштаба. Такие осцилляции характерны именно для сверхдиффузии и связаны с высоким порядком уравнения, управляющего этим процессом (при обыкновенной диффузии мы имели бы уравнение второго порядка, которое давало бы просто экспоненциальное спадание интенсивности пучка от оси к периферии, без осцилляций).

По аналогичному закону происходит и сверхдиффузия иглообразного углового распределения фононов, ис-

пускаемых в гелий II нагретой твердой стенкой. Чтобы найти функцию $Z(z, \kappa)$, описывающую эту ситуацию, можно было бы решить непосредственно уравнение (48.11). Однако, поскольку нам известно решение $Z(z, \kappa, r)$ (48.22) более общего уравнения (48.3), нам будет удобнее выразить ответ через это решение.

Примем во внимание уже отмечавшееся обстоятельство, что это решение представляет собой функцию Грина уравнения (48.3), так что решение уравнения при произвольных граничных условиях выражается в виде интеграла от этой функции. В данном случае граничные условия пространственно-однородны, так как стенка считается равномерно нагретой и искомое решение имеет вид

$$\int d^2 r_0 Z(z, \kappa, r - r_0).$$

Здесь интегрирование производится по всей площади стенки s , а $Z(z, \kappa, r - r_0)$ есть решение уравнения (48.3) с граничным условием

$$Z|_{z=0} = \mathcal{A}_1 \delta^{(2)}(\kappa) \delta^{(2)}(r - r_0).$$

Полный поток энергии, переносимый пучком фононов в направлении, перпендикулярном поверхности стенки, есть

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_0 &= -\frac{\pi}{30} \frac{T^4}{\hbar^3 v^2} \int d^2 r_0 \int d^2 r \int d^2 \kappa Z(z, \kappa, r - r_0) = \\ &= -\frac{\pi}{30} \frac{T^4 s}{\hbar^3 v^2} \int d^2 r \int d^2 \kappa Z(z, \kappa, r) = -\frac{\pi}{30} \frac{T^4}{\hbar^3 v^2} s \mathcal{A}_1. \end{aligned} \quad (48.30)$$

Это соотношение устанавливает связь между плотностью потока энергии, излучаемой стенкой, $G_0 = \mathcal{G}_0/s$ и константой \mathcal{A}_1 :

$$G_0 = -\frac{\pi}{30} \frac{T^4}{\hbar^3 v^2} \mathcal{A}_1.$$

Мы будем считать, что величина G_0 задается условиями эксперимента, и выразим через нее ответ, который мы получим.

Угловое распределение плотности потока энергии, которое нас интересует, дается выражением

$$G(\kappa) = -\frac{\pi}{30} \frac{T^4}{\hbar^3 v^2} \int d^2 r Z(z, \kappa, r) =$$

$$= -\frac{\pi}{30} \frac{T^4}{h^3 v^2} \int d^2 \tilde{\kappa} \exp(i \tilde{\kappa} \kappa) \tilde{Z}(z, \tilde{\kappa}, 0) = \\ = \frac{G_0}{(2\pi)^2} \int d^2 \tilde{\kappa} \exp\left(i \tilde{\kappa} \kappa - \frac{z \kappa^4}{4v\tau_{\perp}}\right).$$

Переходя в последнем интеграле к полярным координатам, мы получаем выражение знакомого вида

$$G(\kappa) = \frac{1}{2\pi} G_0 \int_0^{\infty} d\tilde{\kappa} \tilde{\kappa} J_0(\tilde{\kappa} \kappa) \exp\left(-\frac{z \kappa^4}{4v\tau_{\perp}}\right),$$

или

$$G(\kappa) = \frac{1}{\pi} G_0 \left(\frac{v\tau_{\perp}}{z}\right)^{1/2} f\left[\left(\frac{4v\tau_{\perp}}{z}\right)^{1/4} \kappa\right]. \quad (48.31)$$

В направлениях, «почти перпендикулярных» стенке, где $\kappa \ll (z/v\tau_{\perp})^{1/4}$, мы имеем

$$G = \frac{G_0}{4\sqrt{\pi}} \left(\frac{v\tau_{\perp}}{z}\right)^{1/2}. \quad (48.32)$$

При $\kappa \gg (z/v\tau_{\perp})^{1/4}$ интенсивность пучка фононов спадает экспоненциально по закону, определяемому асимптотическим разложением (48.29), причем это спадание опять-таки сопровождается осцилляциями.

§ 49. Пределы применимости теории поперечной релаксации

Мы рассмотрели задачу о поперечной релаксации в системе фононов с малой дисперсией на примере фононов в гелии II. Обсудим, в какой мере методы и результаты предыдущих разделов могут оказаться применимыми для фононов в твердых диэлектриках.

Важное отличие от той простейшей ситуации, которая имеет место для фононов в гелии II, заключается здесь в двух обстоятельствах: 1) наличие трех акустических колебательных ветвей; 2) анизотропия фононного спектра. Первое обстоятельство может иметь принципиальный характер. Как мы видели в § 34, в трехфононных столкновениях могут участвовать фононы с волновыми векторами, направленными под большими углами друг к дру-

гу, если эти фононы принадлежат к различным колебательным ветвям. Однако вероятности фонон-фононных столкновений существенным образом зависят от величины соответствующих ангармонических коэффициентов $b_{aa'a''}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{k}'')$. Последние же могут весьма сильно меняться от кристалла к кристаллу и даже для различных направлений в одном кристалле, т. е. обладать сильной анизотропией. Можно представить себе такие случаи, когда эти коэффициенты для переходов внутри какой-нибудь одной акустической ветви оказываются заметно больше, чем для переходов между этой ветвью и другими акустическими ветвями. Именно в этих случаях и может возникнуть сходство с ситуацией, рассмотренной в настоящей главе.

Трехфононные столкновения в пределах одной акустической ветви a должны включать фононы, волновые векторы которых почти параллельны. Если при этом дисперсия скорости звука достаточно велика и положительна, то трехфононные столкновения внутри ветви a быстро устанавливают равновесие вдоль данного направления в \mathbf{k} -пространстве, которое (как и выше) характеризуется значениями температуры и дрейфовой скорости, зависящими от направления. Установление полного равновесия в системе фононов ветви a происходит либо за счет взаимодействия с фононами других ветвей, либо же за счет поперечной релаксации, которая качественно происходит таким же способом, какой был описан выше для фононов в гелии II.

Нужно при этом заметить, что в случае широкоугольной релаксации в силу анизотропии задачи оператор поперечной релаксации уже не выражается через компоненты операторов \hat{l}_i , а представляет собой дифференциальный оператор более сложного вида. Значительно проще выглядит этот дифференциальный оператор для случая узкоугольной релаксации, когда при его записи возможны упрощения, аналогичные тем, что мы проделали в § 46. В этом случае в твердых диэлектриках могут наблюдаться некоторые из эффектов, обсуждавшихся выше для гелия II, например, уширение узких фононных пучков, описываемое формулами типа (48.7) и (48.8).

Таким образом, сама по себе анизотропия фононного спектра (при условии, что заметно преобладают столкно-

вения в пределах одной фононной ветви) может не препятствовать возникновению в диэлектриках физической ситуации, напоминающей описанную выше для гелия II. Это утверждение также относится в первую очередь к случаю узкоугольной релаксации, поскольку сформулированному выше условию на соотношение ангармонических коэффициентов для переходов внутри ветви a и между различными ветвями легче удовлетворить для какого-то узкого углового интервала, чем для полного телесного угла.

Развитая выше теория поперечной релаксации в гелии II не принимала во внимание четырехфононных столкновений. Между тем, при определенных условиях они могли бы играть заметную роль в поперечной релаксации. Уточним, какие именно столкновения здесь имеются в виду. Четырехфононные столкновения, как указывалось в § 6, могут быть двух типов: $1 \rightleftharpoons 3$ (один фонон распадается на три или наоборот три фонона сливаются в один) и $2 \rightarrow 2$ (два фонона, сталкиваясь, превращаются в другие два). Столкновения типа $1 \rightleftharpoons 3$ могут происходить только между фононами, волновые векторы которых при малой дисперсии почти параллельны. В этом отношении они подобны столкновениям типа $1 \rightleftharpoons 2$. Вероятность же процессов типа $1 \rightleftharpoons 3$, как мы видели в § 6, меньше вероятности процессов $1 \rightleftharpoons 2$, грубо говоря, в отношении T/Mv^2 , где M — масса атома гелия. Величина, стоящая в знаменателе, составляет примерно 20 К, так что это отношение весьма мало. Поэтому процессы $1 \rightleftharpoons 3$ можно не учитывать на фоне процессов $1 \rightleftharpoons 2$.

Анализ законов сохранения при процессах $2 \rightarrow 2$ показывает, что в этих процессах могут участвовать и фононы, волновые векторы которых ориентированы под большими углами друг к другу. Чтобы в этом убедиться, достаточно рассмотреть законы сохранения при процессе $2 \rightarrow 2$ в пренебрежении малой дисперсией скорости звука:

$$k_1 + k_2 = k_3 + |k_1 + k_2 - k_3|.$$

Видно, что если угол между векторами k_1 и k_2 достаточно велик, то угол между векторами k_3 и $k_1 + k_2 - k_3$ в общем случае также велик. Поэтому мы должны сравнить вклад в поперечную релаксацию от процессов $2 \rightleftharpoons 1$, вы-

численный выше, и от процессов типа $2 \rightarrow 2$: последние хотя и происходят, грубо говоря, в Mv^2/T раз реже первых, но зато такое столкновение приводит, вообще говоря, к существенному изменению волновых векторов сталкивающихся фононов и тем самым вносит более эффективный вклад в поперечную релаксацию, чем отдельное столкновение типа $2 \rightleftharpoons 1$.

Рассмотрим сначала вклад столкновений типа $2 \rightarrow 2$ в поперечную релаксацию при нераспадном фононном спектре, т. е. при $\xi(k) < 0$. Этот вопрос подробно исследовался Л. Д. Ландау и И. М. Халатниковым (1949), и ниже мы коротко опишем те выводы, к которым они пришли. Ситуация в этом случае напоминает ту, что мы обсуждали применительно к диэлектрикам в § 34. Четырехфононные столкновения имеют место как за счет ангармонизма четвертого порядка в первом приближении теории возмущений, так и за счет ангармонизма третьего порядка во втором приближении теории возмущений. Основной вклад дают вторые процессы. Как мы видели в § 34, соответствующая вероятность рассеяния резко возрастает при уменьшении угла между волновыми векторами сталкивающихся фононов и остается конечной только при учете отрицательной дисперсии скорости звука. Для нас, однако, сейчас представляет интерес рассеяние на большие углы, так как при процессах $2 \rightarrow 2$ именно оно определяет скорость поперечной релаксации. Соответствующее характерное время, $\tau_{2 \rightarrow 2}$, оказывается не зависящим от величины дисперсионного параметра.

Непосредственно сравнивать операторы поперечной релаксации за счет процессов $2 \rightleftharpoons 1$ и $2 \rightarrow 2$ мы не можем, так как они имеют различную структуру. Однако сопоставить скорость поперечной релаксации в различных случаях можно, сравнив выражения для какой-нибудь кинетической величины. Выберем в качестве таковой коэффициент поглощения звука в гелии II при $\omega\tau_{2 \rightarrow 2} \ll 1$.

В этом случае релаксация является широкоугольной, а для коэффициента поглощения в теории Ландау — Халатникова получается

$$\gamma_{\text{ЛХ}} = \frac{2\pi^2 (u+1)^2 T^4}{75\hbar^3 v^5 \rho} \omega^2 \tau_{2 \rightarrow 2}, \quad (49.1)$$

где

$$\frac{1}{\tau_{2 \rightarrow 2}} = \frac{9 \cdot 13! (u+1)^4 T^9}{2^{13} (2\pi)^7 \rho^2 v^{10} \hbar^7}. \quad (49.2)$$

Таким образом, коэффициент $\gamma_{\text{лх}}$ пропорционален T^{-5} и $\omega^2 \tau_{2 \rightarrow 2}$; в свою очередь, $1/\tau_{2 \rightarrow 2}$ пропорционально четвертой степени ангармонической константы $u+1$, как и должно быть в случае процесса, вычисляемого во втором приближении теории возмущений.

Это выражение мы хотим сравнить с формулой (47.8) для коэффициента поглощения, обусловленного процессами $2 \rightleftharpoons 1$. Чтобы произвести сравнение, нужно указать, в каком температурном интервале будет задано время $\tau_{\perp}(T)$, или; что то же самое, функция $M(\mathcal{R}_0^{-1}) = M(T)$, через которую это время выражается по формуле (46.6). Интереснее всего произвести такое сравнение для низких температур $T \ll \hbar v k_c$. При этом $M \propto T^{14}$ и, соответственно, $\tau_{\perp} \propto T^{-9}$. Температурная зависимость времен релаксации $\tau_{2 \rightarrow 2}$ и τ_{\perp} оказывается в этом случае одинаковой, и, следовательно, отношение коэффициентов поглощения (47.8) и (49.1) не зависит от температуры, а может зависеть только от давления. Это отношение равно

$$\frac{\gamma}{\gamma_{\text{лх}}} = \frac{(1+u)^{23} \cdot 5 \cdot 7 \cdot 11 \cdot 13}{8 \cdot 2^5 \pi^2} \frac{\hbar}{\alpha^2 \rho v}. \quad (49.3)$$

Подставляя сюда значение α , приведенное в сноске на стр. 344, $u = 2,84$, $\rho = 0,14$ г/см³ и $v = 2,4 \cdot 10^4$ см/с, мы находим, что при нормальном давлении это отношение составляет 0,006.

Нужно, однако, подчеркнуть, что выражение (49.1) получено в предположении отрицательной дисперсии скорости звука, мы же хотели сравнить скорости поперечной релаксации за счет процессов $2 \rightleftharpoons 1$ и $2 \rightarrow 2$ в случае положительной дисперсии. В этом случае вероятность процесса $2 \rightarrow 2$, вычисленная в наименьшем приближении теории возмущений, обращается в бесконечность там, где соответствующий энергетический знаменатель обращается в нуль т. е. если частота фонона в промежуточном состоянии равна сумме фононных частот в начальном состоянии. Эта расходимость устраняется путем учета высших приближений теории возмущений, приводящих к возникновению неопределенности в энергии фонона. Вычисление

вероятности процесса $2 \rightarrow 2$ с учетом этого обстоятельства есть довольно громоздкая задача.

Однако для поперечной релаксации существенны акты рассеяния фононов на большие углы, когда соответствующая вероятность заведомо конечна. Как явствует из формулы (49.2), характерное время $\tau_{2 \rightarrow 2}$ в случае отрицательной дисперсии скорости звука вообще не зависит от величины дисперсии. Поэтому можно надеяться, что оно не зависит и от знака дисперсии. Тогда отношение (49.3) должно давать оценку относительного вклада процессов $2 \rightleftharpoons 1$ и $2 \rightarrow 2$ в поперечную релаксацию. Эта оценка свидетельствует о том, что при нормальном давлении вклад процессов $2 \rightleftharpoons 1$ является преобладающим.

При переходе от широкоугольной к узкоугольной релаксации характерное время поперечной релаксации быстро убывает с уменьшением размеров интервала углов θ_c . — оно, как мы видели, пропорционально θ_c^4 . В этом случае относительная роль процессов $2 \rightleftharpoons 1$ может только увеличиться.

Однако, как уже указывалось, при повышении давления характерное значение волнового вектора k_c убывает. Соответственно, должно существовать такое характерное давление (вообще говоря, зависящее от температуры), начиная с которого вклад четырехфононных процессов $2 \rightarrow 2$ становится преобладающим и коэффициент γ определяется выражением Ландау — Халатникова (49.1).

Содержание

Предисловие	3
Основные обозначения	7
Глава I. Кинетическое описание системы фононов	11
§ 1. Колебания кристаллической решетки	11
§ 2. Длинноволновые колебания решетки и их взаимодействие с электромагнитным полем	24
§ 3. Квантование колебаний решетки. Фононы	42
§ 4. Функция распределения фононов	49
§ 5. Дебаевское приближение для фононного спектра. Термодинамические функции системы фононов	58
§ 6. Решеточный ангармонизм и фонон-фононное взаимодействие. Кинетическое уравнение для фононов	64
§ 7. Рассеяние фононов дефектами кристаллической решетки. Симметрия сечения рассеяния	82
§ 8. Фононы в гелии II	93
§ 9. Линеаризованный оператор столкновений и его симметрия	101
§ 10. Время и длина свободного пробега фононов	107
§ 11. Законы сохранения энергии и возрастания энтропии системы фононов. Кинетические коэффициенты и соотношения их симметрии	112
Глава II. Перенос тепла	124
§ 12. Тензор теплопроводности. Расчет теплопроводности кристаллических диэлектриков при высоких температурах	124
§ 13. Теплопроводность кристаллических диэлектриков при низких температурах. Роль процессов переброса	131
§ 14. Влияние рассеяния фононов дефектами кристаллической решетки на теплопроводность	138
§ 15. Дисперсия теплопроводности. Уравнения фононной гидродинамики. Второй звук	142
§ 16. Диссипативные члены в уравнениях фононной гидродинамики. Поглощение второго звука	151
§ 17. Вычисление кинетических коэффициентов в уравнениях фононной гидродинамики	156
§ 18. «Пуазейлево» течение фононов	164

СОДЕРЖАНИЕ

399

Глава III. Кристаллические диэлектрики в электромагнитном поле	169
§ 19. Диэлектрическая релаксация в непьезоэлектриках	169
§ 20. Взаимодействие однородного электрического поля с фононами	174
§ 21. Вывод общих выражений для диссипативной части диэлектрической проницаемости, обусловленной двухфононными процессами	185
§ 22. Диэлектрическая релаксация, обусловленная двухфононными процессами. Низкие температуры	191
§ 23. Диэлектрическая релаксация, обусловленная двухфононными процессами. Высокие температуры	211
§ 24. Низкочастотная диэлектрическая релаксация в кристаллах без центра симметрии	215
§ 25. Инфракрасное поглощение в полярных диэлектриках	
§ 26. Влияние дефектов кристаллической решетки на диэлектрическую релаксацию	230
Глава IV. Поглощение звука	232
§ 27. Диссипация энергии упругих колебаний и поглощение звука в непьезоэлектрических диэлектриках	232
§ 28. Вывод общего выражения для диссипативной части тензора упругих напряжений	243
§ 29. Связь между ангармоническими коэффициентами и деформационным потенциалом фононов	252
§ 30. Вычисление тензора коэффициентов вязкости и коэффициента поглощения звука в кристаллических диэлектриках	256
§ 31. Особенности распространения звука в кристаллах при $\omega\tau \gg 1$	262
§ 32. Дисперсия коэффициента поглощения звука	268
§ 33. Поглощение высокочастотного звука в кристаллах	274
§ 34. Поглощение продольного звука в упруго изотропной среде	278
§ 35. Поглощение продольного звука в анизотропных диэлектриках. Длина свободного пробега продольных акустических фононов	296
§ 36. Роль длинноволновых продольных фононов в теплопроводности	304
§ 37. Теплопроводность в условиях комбинированного фонон-примесного рассеяния фононов	310
§ 38. Коэффициенты диэлектрической релаксации и вязкости в кристаллах с дефектами	315
§ 39. Поглощение звука и диэлектрическая релаксация в пьезодиэлектриках	319

§ 40. Электроакустическое эхо	325
§ 41. Нелинейное поглощение высокочастотного звука . . .	332
Глава V. Релаксация в системе акустических фононов, имеющих малую дисперсию скорости	
§ 42. Продольная и поперечная релаксация	342
§ 43. Вывод выражения для оператора поперечной релаксации	350
§ 44. Соотношение между температурой и дрейфовой скоростью в состоянии неполного термодинамического равновесия	359
§ 45. Вычисление оператора поперечной релаксации для случая трехфононных столкновений	362
§ 46. Математическая формулировка задач на поперечную релаксацию фононов	367
§ 47. Поглощение звука в гелии II при низких температурах	375
§ 48. Расплывание пучка фононов в гелии II	379
§ 49. Пределы применимости теории поперечной релаксации	392

Гуревич Вадим Львович
КИНЕТИКА ФОНОННЫХ СИСТЕМ

М., 1980 г., 400 стр. с илл.

Редактор В. П. Белоусов
Техн. редактор С. Я. Шкляр
Корректор Л. С. Сомова
ИБ № 11504

Сдано в набор 16.08.79. Подписано к печати 19.03.80. Т-01193. Бумага 84×108^{1/32}. Тип. № 1. Обыкновенная гарнитура. Высокая печать. Условн. печ. л. 21. Уч.-изд. л. 20,46. Тираж 3000 экз. Заказ № 660. Цена книги 3 р. 30 к.

Издательство «Наука»

Главная редакция физико-математической литературы
117071, Москва, В-71, Ленинский проспект, 15

4-я типография издательства «Наука»
630077, Новосибирск, 77, Станиславского, 25