Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

Ю. А. Кашлев, Неравновесная статистическая термодинамика двух диссипативных процессов в твердых телах. Энергетические потери каналированных частиц в области низких скоростей и поглощение ультразвука электронами проводимости, *ТМФ*, 2004, том 138, номер 1, 144–156

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf10>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением

<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 35.173.137.237

26 апреля 2023 г., 13:01:29

**НЕРАВНОВЕСНАЯ СТАТИСТИЧЕСКАЯ
ТЕРМОДИНАМИКА ДВУХ ДИССИПАТИВНЫХ
ПРОЦЕССОВ В ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ.
ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ ПОТЕРИ КАНАЛИРОВАННЫХ
ЧАСТИЦ В ОБЛАСТИ НИЗКИХ СКОРОСТЕЙ
И ПОГЛОЩЕНИЕ УЛЬТРАЗВУКА
ЭЛЕКТРОНАМИ ПРОВОДИМОСТИ**

Методами неравновесной статистической термодинамики исследованы два диссипативных процесса в твердых телах. Получены электронные энергетические потери частиц, движущихся в режиме плоскостного каналирования, и коэффициент поглощения звука в металлах в условиях примесного рассеяния электронов. С использованием осцилляторной модели проанализирован вклад эффекта увлечения электронов подвижным рассеивающим центром в полную диссипируемую энергию. Исследованы частотная и температурная зависимости энергетических потерь, а также зависимость коэффициента поглощения от волнового вектора звука.

Ключевые слова: каналированная частица, хаотическая частица, пик электронных возбуждений, эффект увлечения рассеивающим центром, энергетические потери.

**1. ОСЦИЛЛЯТОР КАК МОДЕЛЬ ПРИМЕСИ В
МЕТАЛЛЕ, КОЛЕБЛЮЩЕЙСЯ В АКУСТИЧЕСКОМ
ПОЛЕ. УНИТАРНОЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЕ**

Осциллятор, который колеблется в электронном газе, может рассматриваться как модель быстрой частицы, движущейся в металле в режиме плоскостного каналирования [1]. Вместе с тем он может использоваться в качестве модели примесного межузельного атома в решетке металла, колеблющегося под воздействием внешнего акустического поля [2]. Обычно в обоих случаях взаимодействие осциллятора с кристаллом описывается на основе гамильтониана, линейного по смещению. Однако, как будет показано ниже, линейное приближение не применимо при анализе диссипативных процессов в условиях каналирования, а также в условиях поглощения энергии звуковых волн. Подход,

*Институт металлургии и материаловедения им. А. А. Байкова, РАН, Москва, Россия

позволяющий выйти за рамки линейной аппроксимации, и предлагается в данной работе.

Начнем с рассмотрения колебаний примеси. Полный гамильтониан системы в отсутствие акустического поля, $H = H_e + H_{\text{int}}$, включает H_e – гамильтониан свободных электронов и H_{int} – оператор взаимодействия электронов с примесными центрами. В расчете на один рассеивающий центр имеем

$$H_{\text{int}} = \sum_{\mathbf{k}} \tilde{U}_{im}(k) \rho_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_m}, \quad (1a)$$

где

$$\rho_{\mathbf{k}} = V^{-1/2} \sum_{\mathbf{k}'} \tilde{a}_{\mathbf{k}' - \mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}'}$$

– фурье-компонента флуктуации плотности электронов, $\mathbf{R}_m$ – радиус-вектор примеси, $\tilde{U}_{im}$ – экранированный потенциал примеси, V – объем, $\tilde{a}_{\mathbf{k}}^\dagger$ и $a_{\mathbf{k}}$ – операторы, удовлетворяющие перестановочным соотношениям Ферми. Нами использована система единиц, в которой $\hbar = k_B = 1$.

Предположим, что на систему в x' -направлении падают продольные звуковые волны с частотой ω_0 и волновым вектором $\mathbf{q}_0$. В модели жестких ионов потенциал, создаваемый m -й примесью, зависит от смещения примеси под влиянием волны $\mathbf{u}_m$, так что в неподвижной x' -системе координат гамильтониан взаимодействия имеет вид

$$\tilde{H}_{\text{int}} = \sum_{\mathbf{k}} \tilde{U}_{im}(k) \rho_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_m + \mathbf{u}_m)}. \quad (1b)$$

Принимая во внимание формулы (1a) и (1b), для системы во внешнем поле получаем

$$\tilde{H} = H + H', \quad H' = \tilde{H}_{\text{int}} - H_{\text{int}},$$

где гамильтониан H' полностью обусловлен колебаниями примесного центра.

Энергию, теряемую волной в единицу времени, определим как среднюю скорость возрастания энергии электронов под влиянием внешнего поля

$$N_e Q_{im} = \text{Re}\{\text{Sp}(\rho(t) \dot{H})\}, \quad \dot{H} = -i[H, H']. \quad (2)$$

Здесь $[A, B] = AB - BA$, N_e – плотность электронов, $\rho(t) = \rho_e + \Delta\rho(t)$ – статистический оператор, который удовлетворяет уравнению

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(t) = -i[\tilde{H}, \rho(t)] \quad (3a)$$

и начальному условию

$$\rho(t)|_{t=-\infty} = \rho_e = (\text{Sp } e^{-\beta_1 H})^{-1} e^{-\beta_1 H}, \quad (3b)$$

где $\beta_1 = 1/T_1$, T_1 – температура электронов. Предположим, что отклонение системы электронов от состояния равновесия, вызванное слабым звуковым полем, является

достаточно малым и в уравнении (3а) можно ограничиться членами, линейными по возмущению. Тогда для вычисления диссипативной функции (2) казалось бы достаточно в $\tilde{H}_{\text{int}}$ (16) учесть линейный член. Однако анализ показывает [2], что ограничиться в $\tilde{H}_{\text{int}}$ линейным членом по u (индекс m в дальнейшем опускается) возможно только при условии

$$u \ll a_{\text{TF}}, \quad (4)$$

где a_{TF} – эффективный радиус экранирования Томаса–Ферми. Поскольку радиус a_{TF} в металлах является величиной того же порядка, что и смещение u , условие (4) не выполняется. Для того чтобы обойти эту трудность, перейдем в систему координат x , фиксированную относительно решетки, которая колеблется под воздействием звукового поля. Естественным, что в x -системе координат рассеивающий центр не участвует в движении, обусловленном волной, и гамильтониан взаимодействия электронов с примесью имеет тот же вид, что и в отсутствие поля. Трансформация координат достигается путем унитарного преобразования оператора взаимодействия

$$e^{-iS} \tilde{H}_{\text{int}} e^{iS} = H_{\text{int}}. \quad (5)$$

Здесь

$$S = -\sqrt{V} m_e v_{-\mathbf{q}_0} u, \\ v_{\mathbf{q}_0} = V^{-1/2} \frac{1}{m_e q_0} \sum_{\mathbf{k}} \left[(\mathbf{k} \mathbf{q}_0) - \frac{1}{2} q_0^2 \right] a_{\mathbf{k}-\mathbf{q}_0}^\dagger a_{\mathbf{k}}$$

– фурье-компонента оператора скорости электрона, m_e – масса электрона.

Используя инвариантность шпура относительно унитарного преобразования, выполним трансформацию координат в (2). Поскольку внешнее поле является слабым, выражение $N_e Q_{im}$ разложим в ряд по степеням u и в этом разложении сохраним члены второго порядка по u . Представив $\rho^S(t) = e^{-iS} \rho(t) e^{iS}$ в виде $\rho_e + \delta\rho_S(t)$, получаем

$$\text{Sp}(\rho(t) \dot{H}) = \langle [H_{\text{int}}, S], H \rangle_S + \langle [[H_{\text{int}}, S], H], S \rangle, \quad (6)$$

где $\langle L \rangle = \text{Sp}(\rho L)$, $\langle L \rangle_S = \text{Sp}(\delta\rho_S L)$.

На основании уравнения движения (3а) после трансформации координат находим точное уравнение, которому удовлетворяет добавка $\delta\rho_S(t)$,

$$\frac{\partial}{\partial t} \delta\rho_S(t) = -i[H, \delta\rho_S(t)] - i[H_S, \rho] - i[H_S, \delta\rho_S(t)], \quad (7a)$$

где

$$H_S = i[H_e, S] + \frac{\partial S}{\partial t}. \quad (7b)$$

Начальное условие для $\delta\rho_S(t)$ записывается в виде

$$\delta\rho_S(t)|_{t=-\infty} = 0.$$

В результате перехода в x -систему координат задача вычисления поглощенной энергии волны сводится к вычислению шпура (6) с использованием уравнения (7) и условия для $\delta\rho_S(t)$. Применяя теорию неравновесных процессов [3], найдем $\delta\rho_S(t)$. Затем, зная $\delta\rho_S(t)$, вычислим среднее значение в полном соответствии с [3],

$$\langle L \rangle_S = \text{Sp}\{\delta\rho_S(t)L\} = \int_{-\infty}^{+\infty} dt' \langle \langle L(t); H_S(t') \rangle \rangle, \quad (8)$$

где

$$\langle \langle L(t); H_S(t') \rangle \rangle = -i\Theta(t-t')\langle [L(t), H_S(t')] \rangle$$

— двухвременная запаздывающая функция Грина. Теперь с помощью фурье-компонент функций Грина запишем общий вид поглощенной энергии (6),

$$N_e Q_{im} = \frac{1}{2} \text{Re} \left(\mathbf{F} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t}^* \right), \quad (9a)$$

где

$$\mathbf{F} = 2\pi \langle \langle f_{\mathbf{q}_0} | f_{-\mathbf{q}_0} \rangle \rangle_{\omega_0} \mathbf{u} \quad (9b)$$

— сила, приложенная к электронам со стороны рассеивающего центра, $f_{\mathbf{q}_0} = -i[m_e v_{\mathbf{q}_0}, H_{\text{int}}]$ — фурье-компонента флуктуационной составляющей оператора силы. Так что величина $N_e Q_{im}$ (9a) равна работе, которую в единицу времени (в единице объема) совершает рассеивающий центр, движущийся во внешнем звуковом поле со скоростью $d\mathbf{u}/dt$.

2. МОДЕЛЬ ОСЦИЛЛЯТОРА И УНИТАРНОЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЕ В ТЕОРИИ КАНАЛИРОВАНИЯ

Воздействие регулярной решетки на быстрые частицы в условиях их коррелированных столкновений с атомами плоскости (y, z) , образующей стенку плоскостного канала, описывается с помощью эффективного потенциала $U_p(x')$. В потенциальной яме $U_p(x')$ имеется s_0 подбарьерных уровней, которые соответствуют состояниям каналированных частиц (КЧ), совершающих направленное движение вдоль стенки канала в z -направлении. Вершина потенциального барьера ямы — уровень ε_{s_0} . Если $U_p(x')$ — гармонический потенциал [1], то движение КЧ представляет собой суперпозицию осцилляций в x' -направлении около положения равновесия с частотой Ω и равномерного движения точки равновесия со скоростью v_0 в z -направлении. Выделяя поперечное относительно стенки канала движение, будем рассматривать КЧ в сопровождающей системе координат (естественно, термодинамические параметры не зависят от выбора системы координат). Середину между двумя плоскостями, образующими канал, обозначим через x'_c . Тогда гамильтониан взаимодействия КЧ с электронами (рассматриваются только одночастичные возбуждения) записывается в виде

$$\tilde{H}_{\text{int}}^{(1)} = \sum_{\mathbf{k}} U_p(k) \rho_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\tilde{\mathbf{R}}},$$

где $\tilde{\mathbf{R}} = \{(x'_c + h(x'_c)), \tilde{\mathbf{r}}\}$, $h \equiv h(x'_c)$ – смещение КЧ, $\tilde{\mathbf{r}}$ – двумерный радиус-вектор КЧ в плоскости (y, z) .

Если выполняется условие (4), которое в данном случае имеет вид $h \ll a_{\text{TF}}$, то для $\tilde{H}_{\text{int}}^{(1)}$ допустима линейная аппроксимация. Однако максимальное отклонение КЧ может достигать четверти ширины канала $a_0/4$, где a_0 – постоянная решетки, тогда как радиус экранирования $a_{\text{TF}} \sim (0.05 \div 0.1)a_0$. Видно, что линейное приближение не применимо. Поэтому, как и в предыдущем случае (5), будем использовать унитарное преобразование

$$e^{-iS_{\mathbf{q}}} \tilde{H}_{\text{int}}^{(1)} e^{iS_{\mathbf{q}}} = H_{\text{int}}^{(1)}, \quad (10)$$

где

$$H_{\text{int}}^{(1)} = \sum_{\mathbf{k}} U_{\text{p}}(k) \rho_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}}, \quad S_{\mathbf{q}} = -\sqrt{V} m_e v_{-\mathbf{q}} h.$$

По аналогии с выводом уравнения (6) получаем диссипативную функцию КЧ, зависящую от переданного импульса $\mathbf{q}$,

$$N_e \tilde{Q}_{\text{p}}(\mathbf{q}) = \text{Re} \left\{ \langle [H_{\text{int}}^{(1)}, S_{\mathbf{q}}], H_1 \rangle_1^S + i \langle [[H_{\text{int}}^{(1)}, S_{\mathbf{q}}], H_1], S_{\mathbf{q}} \rangle_1 \right\}. \quad (11)$$

Здесь $H_1 = H_e + H_{\text{int}}^{(1)}$ – полный гамильтониан электронов в (подвижной) x -системе координат, ρ_1 – квазиравновесное распределение электронов,

$$\rho_1^S(t) = e^{-iS_{\mathbf{q}}} \rho_1(t) e^{iS_{\mathbf{q}}} = \rho_1 + \delta \rho_1^S(t), \quad \langle L \rangle_1 = \text{Sp}(\rho_1 L), \quad \langle L \rangle_1^S = \text{Sp}(\delta \rho_1^S L).$$

В той же последовательности, что при выводе (8), вычислим $\delta \rho_1^S$ и выразим $\langle L \rangle_1^S$ через функцию Грина

$$\langle \langle \tilde{f}_{\mathbf{q}}(t); \tilde{f}_{-\mathbf{q}} \rangle \rangle = -i \Theta(t) \langle [\tilde{f}_{\mathbf{q}}(t), \tilde{f}_{-\mathbf{q}}] \rangle_1,$$

где

$$\tilde{f}_{\mathbf{q}} = -i[m_e v_{\mathbf{q}}, H_{\text{int}}^{(1)}] = i \frac{1}{q} \sum_{\mathbf{q}'} (\mathbf{q}\mathbf{q}') U_{\text{p}}(q') e^{i\mathbf{q}'\mathbf{R}} \rho_{\mathbf{q}'+\mathbf{q}}. \quad (12)$$

В результате преобразований уравнение (11) можно представить либо в виде (9), либо в виде, аналогичном (9),

$$N_e \tilde{Q}_{\text{p}}(\mathbf{q}) = -\pi \Omega \text{Im} \langle \langle \tilde{f}_{\mathbf{q}} | \tilde{f}_{-\mathbf{q}} \rangle \rangle_{\Omega} |h|^2. \quad (13)$$

Далее проинтегрируем выражение (13) по $d\mathbf{q}$ с учетом соотношения (12) и законов сохранения энергии и импульса. При записи этих законов следует учитывать движение точки равновесия осциллятора со скоростью v_0 . Тогда в широком интервале скоростей v_0 энергетические потери КЧ, обусловленные близкими столкновениями КЧ с валентными электронами, принимают вид

$$\begin{aligned} N_e \left(-\frac{dE}{dt} \right)_V &= -\frac{V}{8\pi^2} \Omega^2 |h|^2 \int d\mathbf{q} \text{Im} \langle \langle \tilde{f}_{\mathbf{q}} | \tilde{f}_{-\mathbf{q}} \rangle \rangle_{\Omega} \delta((\mathbf{q}\mathbf{v}_0) - \Omega) = \\ &= -(2\pi)^{-2} V v_0 \Omega |h|^2 \int dq q^3 \text{Im} \langle \langle \tilde{f}_q | \tilde{f}_{-q} \rangle \rangle_{\Omega} \left| \int_0^{\infty} dt e^{-i\Omega t} j_1(qv_0 t) \right|, \end{aligned}$$

где $j_1(x)$ – цилиндрическая функция Бесселя. Поскольку для валентных электронов всегда принимается однородное пространственное распределение, мы не будем учитывать их различия с электронами проводимости. Ограничиваясь случаем малых скоростей v_0 и малых передач импульса при столкновениях, выполним интегрирование по dt ,

$$\left| \int_0^\infty dt e^{-i\Omega t} j_1(qv_0 t) \right| = \frac{1}{3} \frac{qv_0}{\Omega^2}.$$

Принимая во внимание полученный результат, запишем потери в виде

$$\left(-\frac{dE}{dt} \right)_V = -\frac{1}{12\pi^2} V v_0^2 \frac{1}{N_e} \int dq q^4 \text{Im} \langle \tilde{f}_q | \tilde{f}_{-q} \rangle_\Omega \frac{1}{\Omega} |h|^2. \quad (14)$$

Как следует из формул (9) и (14), энергия, диссипируемая электронной системой, выражается через фурье-компоненту запаздывающей функции Грина, включающей либо фурье-компоненту силы f_{q_0} , либо $\tilde{f}_q$ (12). Этот результат имеет много общего с соответствующим выражением теории движения посторонних частиц в равновесной среде [4], в которой кинетический коэффициент, т.е. коэффициент трения, связан с корреляционной функцией межмолекулярных сил, полученной в рамках микроскопической теории.

3. КВАЗИРАВНОВЕСНОЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ЭЛЕКТРОНОВ

При прохождении высокоэнергетических частиц в кристаллах воздействию подвергаются не только отдельные электроны, но и большие группы электронов, расположенных вблизи траектории этих частиц. Локальное возбуждение такой группы имеет сходство с мгновенным нагреванием ограниченного объема электронного газа (локальное нагревание). Поэтому пик электронных возбуждений можно также рассматривать и как пик электронной температуры [5], [6]. Поскольку в задаче каналирования геометрия пика особой роли не играет, будем считать, что пик возбуждений имеет традиционную цилиндрическую симметрию [5]. В дальнейшем рассматривается цилиндр радиуса $r_s \sim h$ с однородным распределением квазitemпературы вдоль оси цилиндра, причем его ось ориентирована в z -направлении.

Перейдем к обсуждению некоторых аспектов корреляции флуктуаций в рассматриваемой системе. Согласно соотношению (12) флуктуационная составляющая силы $\tilde{f}_q$ связана с флуктуациями плотности электронного газа, которые, в свою очередь, являются когерентными флуктуациями среды. Когерентные флуктуации имеют конечное время жизни τ_ρ , так что частица, движущаяся в области пика возбуждений, испытывает воздействие силы либо в течение времени τ_ρ , либо в течение меньшего времени, если скорости v_0 достаточно высоки. Разделим пик электронных возбуждений на идентичные блоки когерентных областей. В соответствии с [6] будем считать, что продольные (вдоль оси цилиндра) размеры блоков определяются длиной когерентных флуктуаций. Ясно, что флуктуации в пространственно-разделенных блоках являются некоррелированными, поскольку они ограничены объемом блока. А флуктуации внутри одного и того же блока на неперекрывающихся интервалах времени сравнительно большой длительности Δt являются также некоррелированными, если $\Delta t > \tau_\rho$. Поэтому временное

развитие флуктуаций соответствует стохастическому случаю и только в этом случае можно применять метод двухвременных функций Грина, в которые входят флуктуации сил (12).

Будем считать, что внутри блока, в котором в данный момент находится КЧ, устанавливается распределение возбужденных электронов с локальной квазitemпературой $T_s(\mathbf{r}')$ и локальным квазихимическим потенциалом $\mu_1(\mathbf{r}')$; согласно [7] это распределение пропорционально гиббсовскому фактору

$$\exp\left\{-\frac{1}{T_s(\mathbf{r}')} \left[\int_{\Delta V} d\mathbf{r}'' E(\mathbf{r}'') - \mu_1(\mathbf{r}') \int_{\Delta V} d\mathbf{r}'' n_e(\mathbf{r}'') \right]\right\}.$$

Здесь $E(\mathbf{r}'')$ – плотность энергии электронов, $n_e(\mathbf{r}'')$ – локальная плотность электронов, ΔV – объем блока когерентных областей, который является макроскопически малым, но содержит достаточно большое число электронов. Как и флуктуации, распределения в пространственно-разделенных блоках статистически независимы, поскольку они ограничены объемом ΔV . В этом случае, перемножая гиббсовские факторы [7], получаем квазиравновесное распределение электронов вдоль траектории КЧ

$$\rho_1 = \frac{1}{\tilde{Q}_1} \exp\left\{-\int d\mathbf{r}' \frac{1}{T_s(\mathbf{r}')} [E(\mathbf{r}') - \mu_1(\mathbf{r}') n_e(\mathbf{r}')] \right\}, \quad (15)$$

где функционал $\tilde{Q}_1$ от локальных параметров $T_s(\mathbf{r}')$, $\mu_1(\mathbf{r}')$ является аналогом статистической суммы для большого канонического ансамбля Гиббса.

Усредним квазitemпературу электронов в центральной зоне электронных возбуждений $r_\perp \leq r_s$ в плоскости, перпендикулярной оси цилиндрического пика. Тогда в соответствии с [8] усредненную квазitemпературу можно определить соотношением

$$T_s = T_1 + \frac{\pi r_s^2 n_\perp^{(e)}}{F_{21}}. \quad (16)$$

Из (16) следует, что $T_s \rightarrow T_1$ при $r_s \rightarrow 0$. В формуле (16) $1/F_{21}$ – поперечная квазitemпература КЧ [9], $r_\perp$ и $n_\perp^{(e)}$ – соответственно расстояние до оси пика и плотность электронов в плоскости, перпендикулярной оси. По аналогии с усредненной квазitemпературой можно ввести усредненный в поперечной плоскости квазихимический потенциал $\bar{\mu}_1$. Имея T_s и $\bar{\mu}_1$, на основе (15) находим квазиравновесное распределение “горячих” электронов в цилиндре радиуса r_s ,

$$\rho_1 = \frac{1}{\tilde{Q}_1} \exp\left\{-\frac{1}{T_s} (H_1 - \bar{\mu}_1 N_1)\right\}. \quad (17)$$

В формулу (17) вошли величины

$$H_1 = \int d\mathbf{r}' E(r'), \quad N_1 = \int d\mathbf{r}' n_e(\mathbf{r}').$$

4. ДИССИПАТИВНЫЕ ФУНКЦИИ В УСЛОВИЯХ РАССЕЯНИЯ ОДНОЧАСТИЧНЫХ ВОЗБУЖДЕНИЙ ЭЛЕКТРОННОГО ГАЗА НА ОСЦИЛЛЯТОРЕ

4.1. Нормальный металл при низких температурах. Колебания примеси. Мнимую часть функции Грина сила–сила, вошедшую в (9б), запишем с точностью до величины второго порядка по потенциалу рассеяния, используя определение $f_{\mathbf{q}_0}$,

$$\text{Im}\langle\langle f_{\mathbf{q}_0} | f_{-\mathbf{q}_0} \rangle\rangle_{\omega_0} = q_0^{-2} \sum_{q'} (\mathbf{q}_0 \mathbf{q}')^2 |\tilde{U}_{im}(q')|^2 \text{Im}\langle\langle \rho_{\mathbf{q}'+\mathbf{q}_0} | \rho_{-\mathbf{q}'-\mathbf{q}_0} \rangle\rangle_{\omega_0}^{(0)}. \quad (18)$$

В формуле (18) $\langle\langle \rho_{\mathbf{q}} | \rho_{-\mathbf{q}} \rangle\rangle_{\omega}^{(0)}$ – фурье-компонента функции Грина плотность–плотность нулевого порядка, в которой усреднение выполняется по равновесному распределению вырожденного электронного газа.

Как известно [2], при температурах $T_1 < 20^\circ \text{ К}$ поглощение энергии ультразвука в металлах происходит только за счет взаимодействия волн с валентными электронами. Именно этот случай и будет рассматриваться в дальнейшем. В широкой области ультразвуковых волн, $\omega_0 \sim (10^6 \div 10^8) \text{ с}^{-1}$, выполняются два условия: $\omega_0 \ll q_0 v_F$, $q_0 \ll K_F$, где $k_F = m_e v_F$ – импульс Ферми. Учитывая эти условия, в (18) достаточно сохранить член, пропорциональный ω_0 ,

$$\text{Im}\langle\langle \tilde{f}_{q_0} | \tilde{f}_{-q_0} \rangle\rangle_{\omega_0} = \frac{1}{V} \frac{\omega_0}{2} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\partial n(\varepsilon_k)}{\partial \varepsilon_k} I_1(\mathbf{k}, \mathbf{q}_0), \quad n(\varepsilon_k) = \langle a_k^\dagger a_k \rangle, \quad (19)$$

где

$$I_1(\mathbf{k}, \mathbf{q}_0) = \frac{1}{V} q_0^{-2} \sum_{\mathbf{k}'} [(\mathbf{q}_0 \mathbf{k}') - (\mathbf{q}_0 \mathbf{k})]^2 |\tilde{U}_{im}(|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|)|^2 \delta(\varepsilon_k - \varepsilon_{k'}).$$

В импульсном пространстве введем две сферические системы координат. Ось одной из них направлена вдоль вектора $\mathbf{q}_0$, в этой системе координаты вектора $\mathbf{k}$ обозначим (k, ϑ, φ) , а координаты вектора $\mathbf{k}'$ обозначим $(k', \vartheta', \varphi')$. Ось второй системы направлена вдоль вектора $\mathbf{k}$, и координатами $\mathbf{k}'$ в этой системе являются $(k', \Theta, \tilde{\varphi})$. Используя вторую координатную систему, выполним в выражении $I_1(\mathbf{k}, q_0)$ интегрирование по dk' и $d\tilde{\varphi}$. Получим

$$\begin{aligned} I_1(k) = N(0) k_F^2 \Big\{ & \frac{1}{3} (1 + P_2(\cos \vartheta)) \int_{-1}^1 d \cos \Theta |\tilde{U}_{im}(\Theta)|^2 + \\ & + \frac{1}{3} P_2(\cos \vartheta) \int_{-1}^1 d \cos \Theta |\tilde{U}_{im}(\Theta)|^2 P_2(\cos \Theta) - \\ & - \frac{1}{3} (2P_2(\cos \vartheta) + 1) \int_{-1}^1 d \cos \Theta |\tilde{U}_{im}(\Theta)|^2 P_1(\cos \Theta) \Big\}, \end{aligned}$$

где $N(0)$ – плотность числа электронных состояний вблизи поверхности Ферми, $P_i(\cos \Theta)$, $i = 1, 2$, – полином Лежандра. Принимая во внимание явный вид $I_1(k)$ и ортогональность полиномов Лежандра, вычислим функцию Грина (19) в пределе $T_1 \rightarrow 0$,

$$\text{Im}\langle\langle f_{q_0} | f_{-q_0} \rangle\rangle_{\omega_0} = -\pi\omega_0 N_e \frac{1}{k_F} N(0) \frac{1}{\tau_{\text{tr}}}, \quad (20a)$$

$$\frac{1}{\tau_{\text{tr}}} = \frac{1}{2} N(0) \int d\tilde{\vartheta} |\tilde{U}_{im}(\Theta)|^2 (1 - \cos \Theta), \quad (20б)$$

$$\tilde{U}_{im}(\Theta) = U_{im}(\Theta) \left\{ 1 + \frac{1}{\pi} \left(a_{\text{TF}} 2k_F \sin \frac{\Theta}{2} \right)^{-2} \right\}^{-1}. \quad (20в)$$

Здесь $d\tilde{\vartheta} = 2\pi \sin \Theta d\Theta$, Θ – угол упругого рассеяния электронов в подвижной системе координат. Кроме того, при записи потенциала примесного атома (20в) мы ограничились учетом статического экранирования в приближении хаотических фаз, поскольку $\omega_0 \ll q_0 v_F$.

Итак, подставляя соотношения (20a)–(20в) в (9), находим искомую диссипативную функцию

$$Q_{im} = \frac{1}{2} m_e \omega_0^2 |u|^2 \frac{1}{\tau_{\text{tr}}}. \quad (21)$$

Характерно, что в соотношение (21) входит только квадрат амплитуды смещения $|u|^2$, тогда как локальное смещение $u(x', t)$ отсутствует. Это типично для нелокальной теории диссипативных процессов, в которой длина свободного пробега $l_e = v_F \tau_{\text{tr}}$ много больше длины пространственной неоднородности $1/q_0$. В пределе малой плотности рассеивающих центров условие $q_0 l_e \gg 1$ выполняется.

4.2. Каналирование частиц со скоростью $v_0 < v_F$. Высокие квазitemпературы пика электронных возбуждений. Вычислим функцию Грина, вошедшую в формулу (14), с точностью до величин второго порядка. Будем использовать выражение (18), предварительно заменив в нем $\omega_0 \rightarrow \Omega$ и $\mathbf{q}_0 \rightarrow \mathbf{q}$, где $\mathbf{q}$ – переданный импульс. Сделаем два замечания. Во-первых, в отличие от (20в), где диэлектрическая проницаемость записана в приближении хаотических фаз, в случае каналирования частиц со скоростью $v_0 < v_F$ роль экранирующего фактора играет величина [10]

$$\left\{ 1 - 2\pi^2 \nu(q) \langle\langle \rho_q | \rho_{-q} \rangle\rangle_{\Omega}^{(0)} \right\}^{-1},$$

где $\nu(q) = (4\pi e^2 / q^2) \chi(q)$ – эффективный потенциал и

$$\chi(q) = 1 - \frac{q^2}{2} (q^2 + k_F^2)^{-1}.$$

Во-вторых, до сих пор мы фактически учитывали только динамические эффекты столкновений. Однако для анализа температурных факторов при больших значениях квазitemпературы (16) необходимо учесть и кинетические эффекты взаимодействия, что приведет к перенормировке энергетического спектра электронов. Согласно теореме о “жесткой” зоне [11] возмущение, которое вносит КЧ, приводит к сдвигу параболической

зоны как целого на величину ε_c . В результате перенормированная энергия принимает вид $\tilde{\varepsilon}_k = \varepsilon_k + \varepsilon_c$, где $\varepsilon_c = \text{const}$ – край полосы.

Итак, учитывая экранировку при $v_0 < v_F$, перенормированную энергию электрона и распределение (17), в той же последовательности, что и при выводе формулы (20), вычислим функцию Грина сила–сила. Находим

$$\text{Im}\langle\langle\tilde{f}_q | \tilde{f}_{-q}\rangle\rangle_\Omega = \frac{\pi}{2} N_e \frac{1}{\sqrt{2k_F^2 + q^2}} N(0) \Omega \frac{1}{\tau_p} \{1 - 2\pi^2 \nu(q) \langle\langle\rho_q | \rho_{-q}\rangle\rangle_\Omega^{(0)}\}^{-2} \tilde{I}(T_s), \quad (22a)$$

где

$$\frac{1}{\tau_p} = \frac{1}{2} N(0) \int d\vartheta |U_p(\Theta)|^2 (1 - \cos \Theta), \quad (22b)$$

$$\tilde{I}(T_s) = \frac{1}{\Omega} \int_{\varepsilon_c}^{\infty} d\tilde{\varepsilon}_k [\tilde{n}(\tilde{\varepsilon}_k + \Omega) - \tilde{n}(\tilde{\varepsilon}_k)], \quad \tilde{n}(\tilde{\varepsilon}_k) = \tilde{\lambda} e^{-\tilde{\varepsilon}_k/T_s}, \quad (22в)$$

$\tilde{\lambda}$ – абсолютная активность “горячих” электронов, которая определяется из условия нормировки.

Подставим (22a) в выражение для энергетических потерь (14), затем в полученном выражении проинтегрируем по dq с использованием следующих приближений. Ограничимся рассмотрением металлов с высокой плотностью электронов, когда $e^2/(\pi v_F) < 1$. Будем пренебрегать эффектом отставания экранирующего облака от КЧ, т.е. отбросим малый вклад мнимой части функции Грина плотность–плотность, вошедшей в экранирующий фактор. Далее представим $\tilde{I}(T_s)$ (22в) в виде ряда по степеням Ω и, ограничиваясь высокотемпературным случаем $T_s \gg \Omega$, отбросим в этом разложении величины порядка Ω/T_s . Наконец, упрощая геометрию задачи, будем считать, что характерный объем плоскостного канала равен $2la_0^2$, где l – полуширина канала. Итак, в результате интегрирования находим

$$\left(-\frac{dE}{dt}\right)_V = v_0^2 N_e Q_p \frac{1}{\Omega^2} \left[\ln\left(C_1 \frac{e^2}{v_F}\right) - \frac{4}{\pi} \frac{e^2}{v_F} \right] \xi l \tilde{n}(\varepsilon_c), \quad (23)$$

где

$$Q_p = \frac{1}{2} m_e \Omega^2 |h|^2 \frac{1}{\tau_p},$$

$N_e Q_p$ – диссипативная функция осциллятора, колеблющегося в электронном газе с частотой Ω и амплитудой h (ср. с (21)), $\xi = C_2 (a_0/a_{TF})^2$. В этой формуле C_1 и C_2 – численные коэффициенты, полученные в нашем расчете и равные соответственно 43 и $1.6 \cdot 10^{-2}$.

Представляет интерес сравнить диссипацию энергии КЧ в условиях рассеяния одночастичных (локальных) возбуждений электронного газа и коллективных (нелокальных) возбуждений. Рассеянием плазмонов на КЧ обусловлены поляризационные потери. Поскольку плазменные колебания не локализованы, поляризационные потери не зависят ни от ориентации пучка частиц относительно кристаллографических плоскостей,

ни от вида траектории. Общий вид поляризационных потерь был получен в работе [12] на основе уравнения баланса энергии. Имеем

$$\left(-\frac{dE}{dt}\right)_{\text{pol}} = -2\pi \sum_{\mathbf{q}} \int_0^\infty d\omega \omega |U_{\text{p}}(q)|^2 \text{Im} \langle \rho_{\mathbf{q}} | \rho_{-\mathbf{q}} \rangle_{\omega}^{(0)} \delta((\mathbf{q}\mathbf{v}_0) - \omega),$$

что при $v_0 < v_{\text{F}}$ после интегрирования по $d\omega$ и суммирования по q дает

$$\left(-\frac{dE}{dt}\right)_{\text{pol}} = -\frac{8\pi}{3} Z_1^2 e^4 v_0^2 \int dq \left[\frac{d}{d\omega} \text{Im} \langle \rho_{\mathbf{q}} | \rho_{-\mathbf{q}} \rangle_{\omega}^{(0)} \right] \Big|_{\omega=0} \simeq v_0^2 \frac{2}{3\pi} (Z_1 e^2 m_e)^2 \ln \frac{v_0}{v_{\text{F}}}. \quad (24)$$

Здесь $Z_1 e$ – заряд КЧ, $\omega_{\text{pl}}/v_0 < q < \omega_{\text{pl}}/v_{\text{F}}$, ω_{pl} – энергия плазмона. Усреднение в функции Грина в формуле (24) выполняется по распределению фракции электронов с температурой решетки T_1 , причем окончательное выражение записано в приближении, где полностью отброшены температурные поправки, т.е. в пределе $T_1 \rightarrow 0$. Если потери (23) включают характеристики направленного пучка частиц Ω и h , то в (24) они не вошли. Поэтому поляризационные потери (24) в равной мере относятся и к частицам направленного пучка, т.е. к КЧ, и к частицам хаотического пучка.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

5.1. Эффект увлечения электронов подвижными рассеивающими центрами. В локальной теории поглощения звука, когда $q_0 l_e < 1$, о сдвиге распределения электронов (в импульсном пространстве) под воздействием волны принято говорить как об эффекте увлечения электронов подвижным рассеивающим центром [13]. Этот сдвиг в полуклассической теории [13] связывается с действием на электронный газ силового поля $\sim m_e \omega_0 \tau^{-1} u(x', t)$. Вариант нелокальной теории диссипативных процессов, когда $q_0 l_e \gg 1$, предложен в данной работе. В ней сила, действующая со стороны колеблющейся примеси на электроны, выражается через функцию Грина (9б), (20а) $F \sim m_e \omega_0 \tau_{\text{tr}}^{-1} u$. То же в теории каналирования (13), (22), где сила, действующая со стороны КЧ, равна

$$\tilde{F} = 2\pi \text{Im} \langle \tilde{f}_{\mathbf{q}} | \tilde{f}_{-\mathbf{q}} \rangle_{\Omega} h \sim m_e \Omega \frac{1}{\tau_{\text{p}}} h.$$

Соответственно обе энергии $N_e Q_{im}$ (9а) и $N_e \tilde{Q}_{\text{p}}(q)$ (13) обусловлены колебаниями рассеивающих центров и представляют собой вклад эффекта увлечения электронов подвижными центрами рассеяния в полную диссипируемую энергию. Отметим, что метод функций Грина в сочетании с унитарным преобразованием (5), (10) позволяет вычислять энергию, теряемую за счет увлечения электронов, с любой степенью точности. Однако, как показали оценки, в нелокальной теории достаточно ограничиться первым членом (21), (23).

5.2. Частотная зависимость энергетических потерь КЧ. В качестве минимального значения $|h|^2$ можно принять квазиклассическое выражение для квадрата расстояния до точки поворота осциллятора $|h|^2 = l^2 (\Omega/\varepsilon_{S_0})$. Такой выбор, с одной стороны, исключает из рассмотрения переходы КЧ с отражающего уровня потенциальной

ямы U_p , с другой – дает значения h , удовлетворительно согласующиеся с минимальной наблюдаемой амплитудой КЧ [14], [15]. Следовательно, в квазиклассическом приближении $|h|^2 \sim \Omega$. Что касается квантово-механического определения, то в этом случае отклонение осциллятора пропорционально матричному элементу смещения,

$$h \sim \langle s | \delta x | s + 1 \rangle \sim (2m\Omega)^{-1/2}, \quad (25)$$

где m – масса КЧ. Так что в гармоническом приближении, когда $\Omega^2 \sim 1/m$, мы снова получаем $|h|^2 \sim \Omega$.

Полные электронные энергетические потери КЧ помимо вклада эффекта увлечения (23) включают поляризационные потери (24), так что с учетом соотношения (25) $|h|^2 \sim \Omega$ имеем

$$\left(-\frac{dE}{dt} \right)_{\text{pol}} + \left(-\frac{dE}{dt} \right)_V = \tilde{\alpha} + \tilde{\beta}\Omega, \quad (26)$$

где $\tilde{\alpha}$ и $\tilde{\beta}$ – величины, не зависящие от частоты Ω . В рамках эмпирического подхода частотная зависимость (26) была получена в работе [15], однако теоретического объяснения она не получила. Поэтому данное нами доказательство прямой пропорциональности энергетических потерь КЧ частоте их колебания в канале Ω , на наш взгляд, может представлять существенный интерес.

5.3. Температурная зависимость энергетических потерь КЧ. Поскольку частота релаксации поперечного импульса КЧ значительно больше частоты релаксации поперечной энергии, передача энергии от КЧ к термостату происходит настолько медленно, что подсистема КЧ “разогревается” до очень высоких температур [9]. В частности, для частиц с энергиями порядка несколько МэВ поперечная квазitemпература оценивается как $1/F_{21} \sim 1$ эВ [9]. Принимая во внимание, что характерный энергетический параметр КЧ Ω по порядку величины равен 10^{-2} эВ, находим $1/F_{21} \gg \Omega$. С учетом (16) это дает $T_s \gg \Omega$ и условие высокотемпературного предела, использованного при выводе (23), выполняется.

Известно, что поперечная квазitemпература КЧ $1/F_{21}$ пропорциональна температуре термостата [9]. Отсюда следует, что квазitemпература пика электронных возбуждений T_s (16) также пропорциональна T_1 , поэтому T_s можно интерпретировать как перенормированную температуру решетки. Отметим, что при выводе (23) мы использовали T_s как параметр, характеризующий статистическую заселенность уровней ямы U_p . Более ранние теории энергетических потерь КЧ основаны на чисто механическом подходе, другими словами, в приближении постоянной функции распределения КЧ $\tilde{n}(\varepsilon_k) = \text{const}$, что согласно нашей работе достигается в пределе $T_s \rightarrow \infty$. Если для простоты абсолютную активность $\tilde{\lambda}$ аппроксимировать ее предельным значением ($\tilde{\lambda} = 1$ при $T_s \rightarrow \infty$), то зависимость потерь (23) от квазitemпературы T_s соответствует аррениусовской кинетике процессов, происходящих в сильно неравновесных системах с заметным отрывом температуры одной из подсистем. А именно,

$$\left(-\frac{dE}{dt} \right)_V \sim e^{-\varepsilon_c/T_s}. \quad (27)$$

Обобщение аррениусовской кинетики на случай сильно неравновесных, так называемых нетермических систем, рассмотрено в работе [16]. Отметим, что температурная зависимость, аналогичная (27), характерна для кинетических коэффициентов ряда других диссипативных процессов в системах, включающих тепловой пик [5], [8], [17].

5.4. Зависимость коэффициента поглощения ультразвука от волнового вектора. Коэффициент поглощения ультразвука в кристалле выражается формулой $\alpha = N_e Q / (v_s E_s)$, где $E_s = (1/2) \rho_a \omega_0^2 |u|^2$ — плотность энергии падающей волны, ρ_a — удельный вес кристалла, v_s — скорость звука. Чтобы получить полную диссипируемую энергию $N_e Q$, необходимо к вкладу столкновительной диссипации (21) прибавить вклад бесстолкновительной диссипации. Последняя обусловлена прямым поглощением энергии электронами, движущимися в фазе с волной, и определяет коэффициент поглощения в чистом металле [13] $\alpha^{(0)} = \pi N_e m_e q_0 v_F / (6 \rho_a v_s)$. С учетом (21) при $q_0 l_e \gg 1$ имеем

$$\alpha = \alpha^{(0)} \left[1 + \frac{6}{\pi} (q_0 l_e)^{-1} \right]. \quad (28)$$

Согласно (28) величина $\alpha / \alpha^{(0)}$ монотонно уменьшается с ростом q_0 . Таким образом, зависимость $\alpha / \alpha^{(0)}$ от q_0 в области коротковолнового ультразвука, $q_0 l_e \gg 1$, совершенно иная, чем в области длинных волн, $q_0 l_e < 1$, где $\alpha / \alpha^{(0)}$ увеличивается с ростом q_0 [13].

Список литературы

- [1] *F. Abel, G. Amsel, M. Brunet, C. Cohen, A. L'Hoir.* Phys. Rev. B. 1976. V. 13. № 3. P. 993.
- [2] *Y. Nagaoka.* Prog. Theor. Phys. 1961. V. 26. № 5. P. 590.
- [3] *Д. Н. Зубарев.* Неравновесная статистическая термодинамика. М.: Наука, 1971.
- [4] *A. Suddaby, P. Gray.* Prog. Phys. Soc. 1960. V. 75. № 481. P. 109.
- [5] *F. Seitz, J. S. Koehler.* Solid State Phys. 1956. V. 2. P. 305.
- [6] *M. Rahman.* Phys. Rev. B. 1995. V. 52. № 5. P. 3383.
- [7] *H. Mori.* Phys. Rev. 1958. V. 112. № 6. P. 1829.
- [8] *M. W. Thompson, R. S. Nelson.* Phil. Mag. 1962. V. 7. № 84. P. 2015.
- [9] *Yu. A. Kashlev.* Phys. Stat. Sol. B. 1995. V. 190. P. 379.
- [10] *M. Kitagawa, Y. H. Ohtsuki.* Phys. Rev. B. 1973. V. 8. P. 3117.
- [11] *Ч. Куттель.* Квантовая теория твердых тел. М.: Наука, 1967.
- [12] *Ю. А. Кашлев.* ТМФ. 1979. Т. 41. № 1. С. 89.
- [13] *A. B. Pippard.* Phil. Mag. 1955. V. 46. № 4. P. 1104.
- [14] *S. Datz, C. D. Moak, T. S. Noggle, B. R. Appleton, H. O. Lutz.* Phys. Rev. 1969. V. 179. № 2. P. 315.
- [15] *M. T. Robinson.* Phys. Rev. B. 1971. V. 4. № 5. P. 1461.
- [16] *В. Штиллер.* Уравнение Аррениуса и неравновесная кинетика. М.: Мир, 2000.
- [17] *Ю. А. Кашлев.* ТМФ. 2002. Т. 130. № 1. С. 131.

Поступила в редакцию 16.I.2003 г.,
после доработки 11.III.2003 г.