Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

Л. А. Зайцева, Затухание рэлеевских волн из-за рассеяния на стационарных дефектах, *ТМФ*, 2005, том 143, номер 2, 241–257

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf1813>

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: 35.174.16.151

26 апреля 2023 г., 09:21:54

© 2005 г.

Л. А. Зайцева*

ЗАТУХАНИЕ РЭЛЕЕВСКИХ ВОЛН ИЗ-ЗА РАССЕЯНИЯ НА СТАЦИОНАРНЫХ ДЕФЕКТАХ

Получены выражения для ширин энергетического спектра рэлеевских волн, обусловленной их рассеянием на точечных и масштабных дефектах поверхности, а также на краевых дислокациях с выходом на поверхность и канавках случайной решетки в плоскости поверхности. Расчеты пригодны при малой плотности дефектов. При определенных условиях имеется совпадение с результатами работ других авторов, изучавших рассеяние рэлеевских волн на точечных дефектах и канавках случайной решетки. В расчетах используется диаграммная техника Келдыша, модифицированная для случая полуограниченной среды.

Ключевые слова: рэлеевские волны, свободная поверхность, ширина энергетического спектра, время жизни R -фонона, диаграммная техника Келдыша.

1. ВВЕДЕНИЕ

Рэлеевские волны (R -волны, R -фооны), как известно (см. [1]), распространяются вдоль поверхности полуограниченного образца, свободной от напряжений. В глубине вещества они затухают на расстоянии $z \sim 1/q = l$, где l — длина волны, q — ее импульс.

В данной работе вычислено затухание во времени, в течение которого R -фоон сохраняет импульс $\mathbf{q}$. В квантовой механике время затухания — это время жизни частицы τ в данном квазистационарном состоянии. Соответственно, вероятность распада данного состояния равна τ^{-1} , поскольку квадрат модуля волновых функций частицы затухает во времени как $\exp(-t/\tau)$ [2]. Ширина энергетического спектра, следовательно, характеризуется величиной $(2\tau)^{-1}$. Здесь будут рассмотрены случаи затухания R -фоонов, обусловленного рассеянием на стационарных дефектах поверхности.

Ширину энергетического спектра, связанную с временем жизни R -фоона с импульсом $\mathbf{q}$, определим согласно [3] из мнимой части знаменателя полной запаздывающей функции Грина $D_{\alpha\beta}^R$ в $(\omega, \mathbf{q}, z)$ -представлении, где $\mathbf{q} = \{q_x, q_y\}$, а $\alpha, \beta = x, y, z$ — поляризационные индексы. Использование смешанного представления вызвано полуограниченностью образца, обусловившей его неоднородность в z -направлении.

* Институт химической физики им. Н. Н. Семенова РАН, Москва, Россия.
E-mail: zaitseva@center.chph.ras.ru

Для получения $D_{\alpha\beta}^R$ воспользуемся диаграммной техникой Келдыша [4]. Согласно этой технике полная запаздывающая функция Грина фононов $D_{\alpha\beta}^R$ может быть выражена через разность их причинной и вневременной функций Келдыша. Эти функции в отличие от $D_{\alpha\beta}^R$ разлагаются в ряды по гамильтониану взаимодействия фононов и зависят от функций Келдыша свободных фононов $D_{\alpha\beta}^{ij}$. Выражение для $D_{\alpha\beta}^R$ в конечном счете определяется лишь запаздывающими функциями $D_{\alpha\beta}^R$, благодаря связи функций $D_{\alpha\beta}^{ij}$ друг с другом и с $D_{\alpha\beta}^R$ в любом представлении и в любом приближении [4]. Как и в случае неограниченных сред в частотно-импульсном представлении [3], запаздывающие функции Грина свободных фононов в полуограниченной среде в $(\omega, \mathbf{q}, z)$ -представлении получаются при замене ω на $\omega + i\delta$, где $\delta \rightarrow 0$, в функциях Грина – решениях уравнений движения этой среды [5], [6]. Такие функции для изотропной упругой полуограниченной среды были вычислены в работе [7] с использованием обрыва упругих констант вне ее поверхности. Рассматривать кристалл в виде непрерывной упругой среды возможно лишь в длинноволновом пределе, когда $l \gg a_0$, где a_0 – постоянная решетки.

В данной работе вычисляются ширины спектров длинноволновых R -фононов, обусловленные их рассеянием на точечных дефектах поверхности и макровключениях в нее с размерами в плоскости поверхности, соответственно, $r_d \lesssim l$ и $r_D \gtrsim l$. Также рассмотрено рассеяние R -фононов на линейных дефектах (канавках случайной решетки), лежащих на поверхности [8], и на краевых дислокациях, перпендикулярных ей. Заметим, что дефекты могут быть трехмерными, однако рассеяние на них происходит в практически двумерном слое $z \sim l$ вблизи поверхности, где еще существует R -фонон. Примем, что вводимая здесь плотность числа случайно расположенных дефектов мала, т.е. среднее расстояние между ними $d > l$ [9]. Разнообразие дефектов будет учтено в модельных гамильтонианах их взаимодействия с R -фононами.

Расчеты затухания R -волн на двумерных шероховатостях поверхности (точечных дефектах) изотропных кристаллов весьма многочисленны (см., например, [7]–[13]). Также вычислялось ранее затухание R -волн из-за рассеяния на одномерных дефектах поверхности таких кристаллов (канавках случайной решетки), в частности, в работах [8], [14]. В основном, обратное время затухания, определяемое из мнимой части дисперсионного уравнения, зависит от q^5 и q^4 при рассеянии, соответственно, на точечных шероховатостях и линейных дефектах. Хотя встречаются и другие зависимости времени затухания от импульса и другие его определения. Так, в [7] временем затухания считается время изменения излучательной энергии R -волны из-за рассеяния на шероховатостях поверхности. Используется также интеграл столкновений кинетического уравнения, с помощью которого время затухания связывают с временем релаксации функции распределения R -волны к ее равновесному значению. Техника таких вычислений приведена в [15], [16] при расчетах рассеяния объемных волн на точечных примесях и дислокациях.

Вычисления затухания R -волн, определяемого шириной энергетического спектра в дисперсионных уравнениях, отличаются также способом учета дефектности поверхности. В работе [12] и некоторых других дефект характеризуется изменением локальной поверхностной плотности вещества, входящей в гамильтониан взаимодействия. В [7], [8],

[14] и прочих работах вводится профиль дефекта в граничные условия к уравнениям движения упругой среды. Во всех случаях полуограниченность образцов обеспечивается обрывом составляющей напряженности, нормальной к поверхности. Во многих работах случайность распределения дефектов описывается функцией Гаусса. Полезность такого введения будет обсуждена далее.

Общим для всех рассмотренных работ является вывод дисперсионного соотношения с помощью уравнений для смещений – векторных величин. Эти интегральные уравнения линейны по функциям Грина (решениям уравнений движения упругой среды), но весьма громоздки. Относительный вклад поверхностных, продольных и поперечных объемных волн в общее смещение определяется их поведением на свободной поверхности [1]. Разделение всех решеточных волн вблизи поверхности, испытавших рассеяние, вообще носит условный характер, так как соответствующие им смещения зависят от обеих скоростей звука c_t и c_l , поперечных и продольных [7]. Поэтому даже без учета гауссовой функции распределения дефектов нахождение ширины энергетических уровней из уравнений для смещений требует численных расчетов. Отметим, что в работе [13] дисперсионное соотношение с учетом рассеяния R -фонона на шероховатостях поверхности вычислялось из интегрального уравнения типа уравнения Дайсона для “средней” функции Грина. Ввиду краткости изложения трудно оценить полученные в [13] результаты.

Преимущество использованных здесь функций Келдыша и связанных с ними полных запаздывающих функций Грина заключается в том, что они квадратичны по смещениям. Это избавляет от утомительного слежения за эволюцией векторов смещения решеточных колебаний при их отражении от поверхности с рассеянием на дефектах. Кроме того, как уже упоминалось, функции $D_{\alpha\beta}^R$ определяются через запаздывающие функции Грина свободных фононов, связанные с функциями Грина, известные из [7]. Существенно, что в системе координат, где ось $x||\mathbf{q}$ [9], объемные и рэлеевские функции Грина $d_{\alpha\beta}(\omega, q, z, z_1)$ из [7] четко разделены по интервалам значений q . Так, от импульсов в интервале $0 \leq q \leq \omega/c_l$ зависят $d_{\alpha\beta}$, связанные как с продольными, так и с поперечными волнами. Импульсами $\omega/c_l \leq q \leq \omega/c_t$ обусловлены лишь $d_{\alpha\beta}$, содержащие поперечные и затухающие при $z \rightarrow \infty$ продольные волны. Функции $d_{\alpha\beta}$ целиком определяются затухающими поперечными и продольными волнами, если $\omega/c_t \leq q \leq \infty$. Кроме того, в выбранной системе координат функции Грина содержат меньшее число составляющих по поляризационным индексам, чем в произвольной системе, и зависят от модуля вектора $\mathbf{q}$, что существенно упрощает расчеты. В функциях Грина рэлеевских фононов, локализованных в приповерхностном слое $z \gtrsim l$, можно принять $z = z_1 = 0$. В результате функции $d_{\alpha\beta}^R(\omega, q, 0)$ являются алгебраическими функциями от ω и q .

Термин “ R -фононы” обусловлен тем, что знаменатели запаздывающих функций Грина $d_{\alpha\beta}^R(\omega, q, z, z_1)$, как и функций $D_{\alpha\beta}^R(\omega, \mathbf{q}, z, z_1)$, могут быть записаны в виде, соответствующем знаменателям запаздывающих функций Грина свободных объемных фононов в неограниченном пространстве в частотно-импульсном представлении [5], [6], [17]. Функции Келдыша свободных фононов в полуограниченной среде $D_{\alpha\beta}^{ij}(\omega, \mathbf{q}, z, z_1)$ можно связать с запаздывающими функциями Грина $D_{\alpha\beta}^R(\omega, \mathbf{q}, z, z_1)$ с помощью функции распределения Планка, зависящей только от частоты ω , так же, как это сделано с функ-

пиями Келдыша свободных фононов в неограниченных средах в работах [4], [18].

Ширины энергетических спектров, соответствующие мнимой части полной обратной запаздывающей функции Грина, определяемой через функции Келдыша, вычислялись в работах автора [17]–[19]. В них получены ширины спектров продольных фононов в объеме, обусловленные их рассеянием на микро- и макропримесях и ферми-электронах [18], а также на бальмановских электронах [19]. В работе [17] вычислены времена жизни R -фононов, ограниченные рассеянием на приповерхностных слоях бальмановских и ферми-электронов. При вычислении ширин спектров R -фононов, связанных с их рассеянием на двумерных и линейных дефектах поверхности, используются некоторые данные из этих работ.

2. СВЯЗЬ ШИРИНЫ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО СПЕКТРА РЭЛЕЕВСКИХ ФОНОНОВ С ЗАПАЗДЫВАЮЩИМИ ФУНКЦИЯМИ ГРИНА

Выразим ширину энергетического спектра R -фононов аналогично работам [18], [17] через запаздывающую функцию Грина свободных фононов $\mathcal{D}_{\alpha\beta}^R$ и поправку к ней

$$\Delta \mathcal{D}_{\alpha\beta}^R = D_{\alpha\beta}^R - \mathcal{D}_{\alpha\beta}^R,$$

связанную в рассматриваемом случае с рассеянием R -фононов на дефектах. Используем при этом следы функций $D^R = \text{Sp } \mathcal{D}_{\alpha\beta}^R$ и $\Delta D^R = \text{Sp } \Delta \mathcal{D}_{\alpha\beta}^R$. Разложим функцию $(D^R)^{-1}$ в ряд по величине $\Delta D^R / D^R$ [3]. Оставляя два члена ряда, получим

$$(D^R)^{-1} \simeq (D^R)^{-1} - \Delta D^R (D^R)^{-2}. \quad (1)$$

Как будет показано в дальнейшем, функцию D^R можно представить в виде

$$D^R(\omega, \mathbf{q}, z, z_1) = \frac{a(\omega, q, z, z_1)}{\eta}, \quad (2)$$

где

$$\eta = (cq)^{-2}[(cq)^2 - (\omega + i\delta)^2], \quad (3)$$

c – скорость рэлеевских волн. Учет взаимодействия R -фононов с дефектами решетки в полных функциях Грина в виде (1) сводится согласно [3] к появлению в энергетическом спектре поправки к частоте $\Delta\omega$ и конечной ширины $1/2\tau \ll \omega$. Переход от $\mathcal{D}^R$ к D^R заключается в замене в (3) $\delta \rightarrow 0$ на $1/2\tau$, если пренебречь $\Delta\omega \ll \omega$. Тогда

$$D^R(\omega, \mathbf{q}, z, z_1) \simeq \frac{a(\omega, q, z, z_1)(cq)^2}{(cq)^2 - \omega^2 - i\omega/\tau}. \quad (4)$$

Функцию $\tau(\omega, q, z, z_1) \gg 1/\omega$ вычислим, положив $\omega^2 = (cq)^2$, при $z = z_1 = 0$, имея в виду локализацию рэлеевских волн на расстояниях от поверхности $z \sim l$ [17]. Подставив формулы (2) и (4) в выражение (1), получаем, что

$$\frac{1}{\tau(q)} = a(q)cq \text{Im} \frac{\Delta \mathcal{D}^R(\omega, \mathbf{q}, 0)}{[\mathcal{D}^R(\omega, \mathbf{q}, 0)]^2}, \quad (5)$$

где зависимость функций $\mathcal{D}^R$, $\Delta\mathcal{D}^R$ от ω сохраняется лишь в их знаменателях.

Запаздывающие функции Грина $\mathcal{D}^R$ получим из решений уравнений движения упругой полугораниченной среды в $(\omega, \mathbf{q}, z)$ -представлении путем замены в них ω на $\omega + i\delta$ [3]. Эти решения были получены в [7] из следующих уравнений для изотропной среды:

$$\sum_{\gamma} \hat{L}_{\alpha\gamma}(X) \mathcal{D}_{\gamma\beta}(X, X_1) = \delta_{\alpha\beta} \delta(\mathbf{R} - \mathbf{R}_1) \delta(t - t_1), \quad (6)$$

где $X = \{\mathbf{R}, t\}$, $\mathbf{R} = \{x, y, z\} = \{\mathbf{r}, z\}$,

$$\hat{L}_{\alpha\gamma}(X) = -\delta_{\alpha\gamma} \frac{\partial^2}{\partial t^2} + \frac{1}{\rho} \sum_{\beta, \delta} \left(\frac{\partial}{\partial R_{\beta}} C_{\alpha\beta\gamma\delta}(z) \frac{\partial}{\partial R_{\delta}} + C_{\alpha\beta\gamma\delta}(z) \frac{\partial^2}{\partial R_{\beta} \partial R_{\delta}} \right),$$

с граничным условием

$$C_{\alpha\beta\gamma\delta}(z) = C_{\alpha\beta\gamma\delta} \Theta(z), \quad (7)$$

где $\Theta(z)$ – ступенчатая функция Хэвисайда. Это граничное условие при $z < 0$ обеспечивает равенство нулю нормальной составляющей тензора напряжений $\sigma_{\alpha z} = C_{\alpha z\gamma\delta} u_{\gamma\delta}$, где $u_{\gamma\delta}$ – тензор деформаций [1]. Вторым граничным условием для уравнения (6) является условие экспоненциального затухания решений уравнений (6) в $(\omega, \mathbf{q}, z)$ -представлении при $z \rightarrow \infty$ [7].

Функции Грина в [7] были получены в системе координат, где ось $x \parallel \mathbf{q}$ [9]. Они связаны с функциями Грина в произвольной системе координат формулой

$$d_{\alpha\beta}(\omega, q, z, z_1) = \sum_{\gamma\delta} S_{\alpha\gamma}(\mathbf{q}) \mathcal{D}_{\gamma\delta}(\omega, \mathbf{q}, z, z_1) S_{\delta\beta}^{-1}(\mathbf{q}), \quad (8)$$

где

$$S(\mathbf{q}) = \frac{1}{q} \begin{pmatrix} q_x & q_y & 0 \\ -q_y & q_x & 0 \\ 0 & 0 & q \end{pmatrix}.$$

Функции $d_{\alpha\beta}$ не зависят от направления вектора $\mathbf{q}$ и равны нулю при $\alpha \neq \beta = y$. Выпишем их свойства, используемые в дальнейшем:

$$d_{\alpha\beta}(\omega, q, z, z_1) = (-1)^{1+\delta_{\alpha\beta}} d_{\beta\alpha}(\omega, q, z_1, z), \quad (9)$$

$$q \left[1 - 2 \left(\frac{c_t}{c_l} \right)^2 \right] d_{\beta x}(\omega, q, z, 0) + i \frac{\partial}{\partial z_1} d_{\beta z}(\omega, q, z, z_1) \Big|_{z_1=0} = 0. \quad (10)$$

Важно, что в отличие от объемных рэлеевские функции $d_{\alpha\beta}(\omega, q, z, z_1)$ при $\alpha \neq y$, $\beta \neq y$ содержат члены, имеющие полюс при $\eta_R = 0$, если $\omega^2 = (cq)^2$ [7]. Для наглядности приведем здесь запаздывающие функции при $\beta = x, z$, как и в (10):

$$\begin{aligned} d_{\beta\beta}^R(\omega, q, z, z) &\simeq - \frac{a_1^{\beta} \exp(-2qz) + a_2^{\beta} \exp(-2\nu qz) + a_3^{\beta} \exp[-(1+\nu)qz]}{2c^2 q \eta_R}, \\ d_{\beta x}^R(\omega, q, z, 0) &\simeq - \frac{b_1^{\beta} \exp(-qz) + b_2^{\beta} \exp(-\nu qz)}{2c^2 q \eta_R}, \end{aligned} \quad (11)$$

где $\omega^2 = (cq)^2$ в числителях, а коэффициенты при экспонентах, известные из [7], [6], [17], зависят от параметра

$$\nu^2 = 1 - \left(\frac{c}{c_t}\right)^2 \ll 1. \quad (12)$$

В (11) и далее в функциях $d_{\alpha\beta}^R$ отброшены те слагаемые (вместе с функцией d_{yy}), которые не содержат η_R в знаменателях, и используются отношения $c/c_1 \ll 1$ и $c \lesssim c_t$ [1].

Разложим функцию η_R по малой разности $[(cq)^2 - \omega^2]/(cq)^2$. Тогда

$$\eta_R = 4 \left\{ \left[1 - \left(\frac{\omega}{c_t q} \right)^2 \right] \left[1 - \left(\frac{\omega}{c_1 q} \right)^2 \right] \right\}^{1/2} - \left[\left(\frac{\omega + i\delta}{c_t q} \right)^2 - 2 \right]^2 \simeq R\eta, \quad (13)$$

где η определяется формулой (3) и согласно [6], [5]

$$\begin{aligned} R &= \left. \frac{d\eta}{d(\omega/cq)^2} \right|_{\omega^2=(cq)^2} = \\ &= 2 \left(\frac{c}{c_t} \right)^2 \left\{ \left[\left(\frac{c}{c_t} \right)^2 - 2 \right]^3 + 4 \left[\left(\frac{c_t}{c_1} \right)^2 - 2 \left(\frac{c}{c_t} \right)^2 + 1 \right] \right\} \left[\left(\frac{c}{c_t} \right)^2 - 2 \right]^{-2}. \end{aligned} \quad (14)$$

Приравняв нулю неразложенную функцию η_R из (13) при $\omega^2 = (cq)^2$, получим уравнение для скорости рэлеевской волны c через c_t , c_1 , в точности совпадающее с соответствующим уравнением, приведенным в [1].

При $z = z_1 = 0$ функции $d_{\alpha\beta}^R(\omega, q, 0)$ в формулах (11), необходимые для дальнейших расчетов, имеют вид [7], [17]

$$d_{xx}^R(\omega, q, 0) = \frac{-\alpha_1}{Rc^2q\eta}, \quad d_{zz}^R(\omega, q, 0) = \frac{-\alpha_1}{\nu Rc^2q\eta}, \quad d_{zx}^R(\omega, q, 0) = \frac{i\alpha_2}{Rc^2q\eta}, \quad (15)$$

где

$$\alpha_1 = \frac{1 - 3\nu + 6\nu^2}{2}, \quad \alpha_2 = 1 - 2\nu. \quad (16)$$

С учетом преобразования (8) и формул (15) функция $\mathcal{D}^R(\omega, \mathbf{q}, 0) = \text{Sp } d_{\alpha\beta}^R(\omega, q, 0) = d^R(\omega, q, 0)$ выражается формулой (2), в которой следует положить

$$a(\omega, q, z, z_1) = a(q) = \frac{-\alpha}{Rc^2q}, \quad \alpha = \alpha_1 \left(1 + \frac{1}{\nu} \right). \quad (17)$$

Для того чтобы найти функции $\Delta \mathcal{D}^R$, входящие в формулу (5) для τ , необходимо задать вид гамильтонианов взаимодействия R -фононов с дефектами.

3. ГАМИЛЬТониАНЫ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ РЭЛЕЕВСКИХ ФОНОНОВ С ДЕФЕКТАМИ

Представим микроскопические нарушения поверхности изотропной решетки в виде точечных примесей с размерами

$$R_d \ll a_0 \ll l = \frac{1}{q}, \quad (18)$$

где $R_d = \{r_d, z_d\}$. В первом приближении по смещениям полуограниченной решетки $\mathbf{u}_d$, вызванным наличием в ней дефектов (дефектным смещениям [15]), гамильтониан взаимодействия, как и для неограниченной решетки [18], может быть задан формулами

$$H_d(t) = \sum_a \int d\mathbf{R} \varpi_d(\mathbf{R} - \mathbf{R}_a) (\nabla \mathbf{u}(\mathbf{R}, t))^2, \quad (19)$$

$$\varpi_d(\mathbf{R} - \mathbf{R}_a) = \frac{d^3 V_d(\mathbf{R} - \mathbf{R}_a)}{d\mathbf{R}^3} \nabla \mathbf{u}_d(\mathbf{R} - \mathbf{R}_a),$$

где суммирование производится по координате точечного дефекта $\mathbf{R}_a$. Здесь в обобщенном парном потенциале взаимодействия $V(\mathbf{R} - \mathbf{R}_a)$ учитывается переход к текущим координатам $\mathbf{R} = \{\mathbf{r}, z\}$ от координат центра ячейки (непрерывность среды) и переход к нормальным смещениям решетки $\mathbf{u}(\mathbf{R}, t)$ от смещений атомов в ячейке [15], [20]. При этом $\varpi_d \simeq \mathcal{E}/a_0^3$ по порядку величины, что соответствует изменению энергии ячейки из-за дефекта на величину атомной энергии $\mathcal{E}$ при смещении примерно на постоянную решетки a_0 [16]. Считается, что примеси статические и расположены хаотично, из-за чего дефектным смещениям не приписываются частоты и поляризационные индексы в отличие от нормальных смещений.

Разложение потенциала $V_d(\mathbf{R} - \mathbf{R}_a)$ в (19) производится по деформациям решетки вида $\nabla \mathbf{U}(\mathbf{R}, \mathbf{R}_a, t) = \nabla \mathbf{u}(\mathbf{R}, t) + \nabla \mathbf{u}_d(\mathbf{R} - \mathbf{R}_a)$ вместо смещений. Таким образом исключается синфазное движение решетки (ее параллельный перенос при $\mathbf{q} \rightarrow 0$ [16]). Действительно, $\partial \mathbf{u} / \partial \mathbf{r} \sim \mathbf{q} \mathbf{u}$ и $\partial \mathbf{u} / \partial z \sim q \mathbf{u}$ согласно (11), а $q \ll 1/r_d$ вследствие ограничений (18).

Гамильтониан взаимодействия R -фононов с макропримесями с размерами

$$R_D \gtrsim l \gg a_0 \quad (20)$$

может быть записан непосредственно через смещения $\mathbf{u}(\mathbf{R}, t)$ и $\mathbf{u}_D(\mathbf{R}, t)$:

$$H_D(t) = \sum_a \int d\mathbf{R} \varpi_D(\mathbf{R} - \mathbf{R}_a) (\mathbf{u}(\mathbf{R}, t))^2, \quad (21)$$

$$\varpi_D(\mathbf{R} - \mathbf{R}_a) = \frac{d^3 V_D(\mathbf{R} - \mathbf{R}_a)}{d\mathbf{R}^3 a_0^3} \mathbf{u}_D(\mathbf{R} - \mathbf{R}_a).$$

В этом случае импульс $q \gtrsim 1/R_D$, и потому исключено синфазное движение.

Рассмотрим двумерные макропримеси, искажающие лишь поверхность, т.е. примеси с размерами

$$r_P \gtrsim l \gg a_0, \quad z_P \ll l. \quad (22)$$

При этих условиях в H_P должны войти составляющие u_x, u_y и $\partial u_z / \partial z \sim q u_z$, см. (11). Однако в длинноволновом пределе $q a_0 \ll 1$ производные смещений вносят меньший вклад в $\Delta \mathcal{D}^R(\omega, \mathbf{q}, z)$, чем сами смещения. Поэтому модельный гамильтониан взаимодействия R -фононов с плоскими макропримесями можно задать равенствами

$$\begin{aligned} H_P(t) &= \sum_{\mathbf{r}_a} \int d\mathbf{R} \varpi_P(\mathbf{R} - \mathbf{R}_a) (u_\mu(\mathbf{R}, t))^2, \\ \varpi_P(\mathbf{R} - \mathbf{R}_a) &= \frac{d^3 V_P(\mathbf{R} - \mathbf{R}_a)}{d\mathbf{R}^3 a_0^2} \mathbf{u}_P(\mathbf{r} - \mathbf{r}_a) \delta(z - z_a) \delta_{z_a 0}, \end{aligned} \quad (23)$$

где $\mu = x, y$ в отличие от $u_\alpha(\mathbf{R}, t)$ из (21), где $\alpha = x, y, z$.

Представление силовых коэффициентов в виде

$$\varpi_s(\mathbf{R} - \mathbf{R}_a) = \varpi_s(\mathbf{r} - \mathbf{r}_a) \delta(z) \delta_{z_a 0} \quad (24)$$

носит более общий характер, чем учет двумерности дефекта (индекс $s = d, D, P, \perp, \parallel$ задает тип дефекта). Это соотношение определяет взаимодействие R -фононов, локализованных на поверхности, с дефектами поверхности или с частью дефекта, выходящей на поверхность. В связи с этим в формулах (19) для H_d и (21) для H_D следует воспользоваться выражением (24) для силовых коэффициентов и $\sum_{\mathbf{r}_a}$ вместо $\sum_{\mathbf{R}_a}$. В гамильтониане (19) и других, содержащих деформации, в $\nabla \mathbf{u}(\mathbf{R}, t)$ нельзя полагать $z = 0$, пока не вычислены производные по этой переменной. В гамильтонианах, связанных с макродефектами, в смещениях $u_\mu(\mathbf{R}, t)$ удобно оставить z для общности дальнейших расчетов, поскольку с помощью $\delta(z)$ -функции в (24) эта переменная своевременно исчезнет.

Зададим теперь вид гамильтонианов взаимодействия R -фононов с линейными дефектами. Краевые дислокации с выходом на поверхность с размерами

$$r_\perp \ll a_0 \ll l, \quad z_\perp \sim L_z \gg l \quad (25)$$

сохраняют трансляционную инвариантность решетки вдоль направления z и в плоскости поверхности, где представляют собой точечные дефекты. Следовательно, гамильтониан взаимодействия $H_\perp(t)$ имеет вид (19). В рассеянии участвует лишь часть дислокации $z_\perp \rightarrow 0$, и это учитывает формула (24). Видим, что

$$\begin{aligned} H_\perp(t) &= \sum_{\mathbf{r}_a} \int d\mathbf{R} \varpi_\perp(\mathbf{R} - \mathbf{R}_a) (\nabla \mathbf{u}(\mathbf{R}, t))^2, \\ \varpi_\perp(\mathbf{R} - \mathbf{R}_a) &= \frac{d^3 V_\perp(\mathbf{R} - \mathbf{R}_a)}{d\mathbf{R}^3} \nabla \mathbf{u}_\perp(\mathbf{R} - \mathbf{R}_a). \end{aligned} \quad (26)$$

Рассмотрим линейные дефекты, лежащие на поверхности, например, вдоль оси x (канавки случайной решетки [10]). Размеры таких дефектов

$$y_{\parallel}, z_{\parallel} \ll a_0 \ll l, \quad x_{\parallel} \sim L_x \gg l. \quad (27)$$

Здесь, как и в случае точечных дефектов на поверхности, сохраняется трансляционная симметрия вдоль всех осей, что требует исключения соответствующего синфазного движения решетки. Поэтому гамильтониан взаимодействия задается формулами

$$\begin{aligned} H_{\parallel}(t) &= \sum_{y_a} \int d\mathbf{R} \varpi_{\parallel}(\mathbf{R} - \mathbf{R}_a) (\nabla \mathbf{u}(\mathbf{R}, t))^2, \\ \varpi_{\parallel}(\mathbf{R} - \mathbf{R}_a) &= \frac{d^3 V_{\parallel}(\mathbf{R} - \mathbf{R}_a)}{d\mathbf{R}^3} \nabla \mathbf{u}_{\parallel}(\mathbf{R} - \mathbf{R}_a) a_0 \delta(x - x_a), \end{aligned} \quad (28)$$

где $\varpi_{\parallel}(\mathbf{R} - \mathbf{R}_a)$ и $\varpi_{\parallel}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_a) = \varpi_{\parallel}(y - y_a) \delta(x - x_a)$ связаны формулой (24).

4. ПОЛНАЯ ЗАПАЗДЫВАЮЩАЯ ФУНКЦИЯ ГРИНА РЭЛЕЕВСКИХ ФОНОНОВ

Полная запаздывающая функция Грина $D^{\mathbf{R}}(X, X_1)$ может быть записана в виде [4]

$$D_{\alpha\beta}^{\mathbf{R}} = D_{\alpha\beta}^{--} - D_{\alpha\beta}^{-+}. \quad (29)$$

Здесь

$$D_{\alpha\beta}^{--}(X, X_1) = \begin{cases} -i\rho \langle \hat{U}_{\beta}(X) \hat{U}_{\alpha}(X_1) \rangle, & t > t_1 \\ -i\rho \langle \hat{U}_{\beta}(X_1) \hat{U}_{\alpha}(X) \rangle, & t < t_1 \end{cases}, \quad D_{\alpha\beta}^{-+}(X, X_1) = -i\rho \langle \hat{U}_{\beta}(X_1) \hat{U}_{\alpha}(X) \rangle$$

суть, соответственно, полные причинная и вневременная функции Келдыша, $\langle \cdot \rangle$ означает усреднение по распределению Гиббса и числу частиц. Эти функции разложимы в ряды по $H_s(t)$. Ограничившись вторым порядком в этих разложениях и используя известные из [4] связи функций $\mathcal{D}_{\alpha\beta}^{ij}$ друг с другом и с $\mathcal{D}_{\alpha\beta}^{\mathbf{R}}$, получаем, что [18]

$$\begin{aligned} D^{\mathbf{R}}(X, X_1) &= \mathcal{D}^{\mathbf{R}}(X, X_1) + \\ &+ \frac{1}{\rho} \text{Sp} \sum_a \int dX' \varpi_s(\mathbf{R} - \mathbf{R}_a) \hat{\nabla}_{\gamma} \mathcal{D}_{\alpha\gamma}^{\mathbf{R}}(X, X') \hat{\nabla}_{\delta} \mathcal{D}_{\delta\beta}^{\mathbf{R}}(X', X_1) + \\ &+ \frac{1}{\rho^2} \text{Sp} \sum_{a,b} \int dX' \int dX'_1 \hat{\nabla}_{\gamma} \mathcal{D}_{\alpha\gamma}^{\mathbf{R}}(X, X') \varpi_s(\mathbf{R}' - \mathbf{R}_a) \times \\ &\times \hat{\nabla}_{\delta} \hat{\nabla}_{\varepsilon} \mathcal{D}_{\delta\varepsilon}^{\mathbf{R}}(X', X'_1) \varpi_s(\mathbf{R}'_1 - \mathbf{R}_b) \hat{\nabla}_{\sigma} \mathcal{D}_{\sigma\beta}^{\mathbf{R}}(X'_1, X_1). \end{aligned} \quad (30)$$

Здесь суммирование по положению дефекта $\mathbf{R}_a$ соответствует суммам в гамильтонианах H_s с учетом ϖ_s из формул (24), (28). В (30) предполагается также суммирование по повторяющимся поляризационным индексам. Символы $\hat{\nabla}_{\gamma}$ таковы, что

$$\hat{\nabla}_{\gamma} \hat{\nabla}_{\delta} = \begin{cases} \frac{\partial^2}{\partial R'_{\gamma} \partial R'_{\delta}}, & s = d, \perp, \parallel, \\ \delta_{\gamma\delta}, & s = D, P, \end{cases} \quad (31)$$

где для $s = P$ индексы $\gamma, \delta = x, y$.

Запишем равенство (30) в $(\omega, \mathbf{q}, z)$ -представлении. В преобразовании Фурье, применяемом для сплошной среды, необходимо учесть ее неоднородность из-за наличия поверхности и дефектов [3], [18]. Тогда

$$D_{\alpha\beta}^R(X, X_1) = \frac{1}{(2\pi)^5} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \int d\mathbf{q} \int d\mathbf{q}_1 D_{\alpha\beta}^R(\omega, \mathbf{q}, \mathbf{q}_1, z, z_1) e^{i[\mathbf{q}\mathbf{r} - \mathbf{q}_1\mathbf{r}_1 - \omega(t-t_1)]}. \quad (32)$$

Функция Грина свободных фононов в этом случае записывается в виде

$$\mathcal{D}_{\alpha\beta}^R(\omega, \mathbf{q}, \mathbf{q}_1, z, z_1) = (2\pi)^2 \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}_1) \mathcal{D}_{\alpha\beta}^R(\omega, \mathbf{q}, z, z_1). \quad (33)$$

Заменив в формуле (32) функции D^R на $\mathcal{D}^R$ и подставив в нее (33), получаем обычное преобразование Фурье для $\mathcal{D}_{\alpha\beta}^R(X, X_1)$ в двумерной однородной среде.

Преобразование Фурье для всех силовых коэффициентов с учетом (24) может быть записано в единой форме

$$\varpi_s(\mathbf{r} - \mathbf{r}_a) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\mathbf{p} \varpi_s(\mathbf{p}) f_s e^{i\mathbf{p}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_a)}, \quad (34)$$

где

$$f_s = \begin{cases} 1, & s = d, D, P, \perp, \\ 2\pi\delta(p_x), & s = \parallel. \end{cases} \quad (35)$$

Функция $f_{\parallel}$ оставляет разложение (34) двумерным и не зависящим от x, x_a , поскольку R -фонон “не замечает” нарушений вдоль канавок случайной решетки.

Предположим, что дефекты независимы, т.е. концентрация их мала. В этом случае расстояние между ними $d > l$. Тогда суммирование по положению дефектов в (30) можно заменить интегрированием по положению одного дефекта, умноженному на плотность их числа, которая задается формулой $n_v = N_v/L_x L_y$ для $v = d, D, P, \perp$ или $n_{\parallel} = N_{\parallel}/L_y$, где $N_v, N_{\parallel}$ – общее число дефектов в образце [3], [18]. В результате получаем

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{r}_a} \varpi_v(\mathbf{p}) e^{-i\mathbf{p}\mathbf{r}_a} &= n_v \int d\mathbf{r} \varpi_v(\mathbf{p}) e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}} = (2\pi)^2 n_v \varpi_v(0) \delta(\mathbf{p}), \\ \sum_{y_a} \varpi_{\parallel}(p_y) e^{-ip_y y_a} &= n_{\parallel} \int dy \varpi_{\parallel}(p_y) e^{ip_y y} = 2\pi n_{\parallel} \varpi_{\parallel}(0) \delta(p_y). \end{aligned} \quad (36)$$

Формулы (34)–(36) объединяются в одну в виде

$$\sum_{\mathbf{r}_a} \varpi_s(\mathbf{r} - \mathbf{r}_a) = n_s \varpi_s(0). \quad (37)$$

Двойные суммы вносят в (30) наибольший вклад $\sim n_s$ при $\mathbf{r}_b = \mathbf{r}_a$. Используя разложение Фурье (34) и преобразовав $\sum_{a,b} = \sum_a$ в интегралы вида (36), получаем, что

$$\sum_{\mathbf{r}_a} \varpi_s(\mathbf{r} - \mathbf{r}_a) \varpi_s(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_a) = \frac{n_s}{(2\pi)^2} \int d\mathbf{p} \int d\mathbf{p}' \varpi_s(\mathbf{p}) \varpi_s(-\mathbf{p}) f_s \delta(\mathbf{p} + \mathbf{p}') e^{i\mathbf{p}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \quad (38)$$

где $\delta(p_y + p'_y)\delta(p'_x) = \delta(\mathbf{p} + \mathbf{p}')$ и f_s определяется формулой (35).

Подставим в выражение (30) для $D^R(X, X_1)$ формулы (32), (33), (37), (38). После стандартных вычислений полная запаздывающая функция Грина принимает вид

$$\text{Sp } \Delta \mathcal{D}_{\alpha\beta}^R(\omega, \mathbf{q}, \mathbf{q}_1, z, z_1) = (2\pi)^2 \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}_1) \Delta \mathcal{D}^R(\omega, \mathbf{q}, z, z_1).$$

Вклад от линейного по ϖ_s члена в $\Delta \mathcal{D}^R / (\mathcal{D}^R)^2$ действителен. Поэтому он определяет $\Delta\omega$, а не $1/\tau$. Квадратичная по ϖ_s поправка к $\mathcal{D}^R(\omega, \mathbf{q}, 0)$ равна

$$\begin{aligned} \Delta \mathcal{D}_s^R(\omega, \mathbf{q}, 0) &= \frac{n_s}{(2\pi)^2 \rho^2} \text{Sp} \int d\mathbf{q}' \varpi_s^2(|\mathbf{q} - \mathbf{q}'|) f_s \int_0^{L_z} dz' \delta(z') \int_0^{L_z} dz'_1 \delta(z'_1) \times \\ &\times \hat{q}_\gamma \mathcal{D}_{\alpha\gamma}^R(\omega, \mathbf{q}, 0, z') \hat{q}_\delta \hat{q}_\varepsilon \mathcal{D}_{\delta\varepsilon}^R(\omega, \mathbf{q}', z', z'_1) \hat{q}_\sigma \mathcal{D}_{\sigma\beta}^R(\omega, \mathbf{q}, z'_1, 0). \end{aligned} \quad (39)$$

Здесь согласно определениям (31) операторы $\hat{q}_\alpha$ удовлетворяют соотношениям

$$\begin{aligned} \sum_\gamma \hat{q}_\gamma \mathcal{D}_{\alpha\gamma}^R &= \sum_\nu -iq_\nu \mathcal{D}_{\alpha\nu}^R + \frac{\partial}{\partial z'} \mathcal{D}_{\alpha z}^R, \\ \sum_\delta \hat{q}_\delta \mathcal{D}_{\delta\varepsilon}^R &= \sum_\nu iq_\nu \mathcal{D}_{\nu\varepsilon}^R + \frac{\partial}{\partial z'_1} \mathcal{D}_{z\varepsilon}^R, \quad s = d, \perp, \parallel, \\ \hat{q}_\gamma \hat{q}_\delta &= \delta_{\gamma\delta}, \quad \hat{q}_\varepsilon \hat{q}_\sigma = \delta_{\varepsilon\sigma}, \quad s = D, P, \end{aligned} \quad (40)$$

где индексы ν , равно как и $\gamma, \delta, \varepsilon, \sigma$ при $s = D, P$, принимают значения x, y согласно (23), (31).

Выразим $\Delta \mathcal{D}_s^R(\omega, \mathbf{q}, 0)$ через функции $d_{\alpha\beta}^R(\omega, q, 0)$ из (15), (16). Для этого воспользуемся связью (8) функций $\mathcal{D}_{\alpha\beta}^R(\omega, \mathbf{q}, z, z_1)$ с функциями $d_{\alpha\beta}^R(\omega, q, z, z_1)$. Для микродефектов с $m = d, \perp, \parallel$ произведение операторов $\hat{q}_\alpha$, определяемых формулами (40), и функций $\mathcal{D}_{\alpha\beta}^R(\omega, \mathbf{q}, z, z_1)$ можно привести к простому виду с помощью функций

$$\begin{aligned} S_1 &= \hat{q}_\delta \hat{q}_\varepsilon \mathcal{D}_{\delta\varepsilon}^R(\omega, \mathbf{q}', z', z'_1) = \\ &= q' \left[q' d_{xx}^R(\omega, q', z', z'_1) + i \frac{\partial}{\partial z'_1} d_{xz}^R(\omega, q', z', z'_1) \right] - \\ &\quad - i \frac{\partial}{\partial z'} \left[q' d_{zx}^R(\omega, q', z', z'_1) + i \frac{\partial}{\partial z'_1} d_{zz}^R(\omega, q', z', z'_1) \right], \\ S_2 &= \hat{q}_\gamma \mathcal{D}_{\alpha\gamma}^R(\omega, \mathbf{q}, 0, z') \hat{q}_\sigma \mathcal{D}_{\sigma\alpha}^R(\omega, \mathbf{q}, z'_1, 0) = \\ &= \sum_\beta (-1)^{\delta\beta z} \left[q d_{\beta x}^R(\omega, q, 0, z') + i \frac{\partial}{\partial z'} d_{\beta z}^R(\omega, q, 0, z') \right] \times \\ &\quad \times \left[q d_{\beta x}^R(\omega, q, 0, z'_1) + i \frac{\partial}{\partial z'_1} d_{\beta z}^R(\omega, q, 0, z'_1) \right]. \end{aligned} \quad (41)$$

В S_2 , как и в (10), $\beta = x, z$ и применялось правило (9) относительно перестановок z'_1, z и σ, α в функциях $d_{\alpha\sigma}^R(\omega, q, z, z'_1)$. Теперь, учитывая в (39) наличие $\delta(z')$, $\delta(z'_1)$, с помощью соотношения (10) упростим выражения в квадратных скобках. В S_1 равенство (10) используем при $z'_1 = 0$, а также при $z' = 0$ после перестановок (9) в $d_{zx}^R(\omega, q', z', 0)$. В результате получаем

$$S_m = S_1 S_2 = 2^4 \left(\frac{c_t}{c_l} \right)^8 q^2 q'^2 \{ [d_{xx}^R(\omega, q, 0)]^2 - [d_{zx}^R(\omega, q, 0)]^2 \} d_{xx}^R(\omega, q', 0). \quad (42)$$

Произведения функций $\mathcal{D}_{\alpha\beta}^R$ и операторов $\hat{q}_\alpha$ в (39) для макропримесей с использованием определений (40) равны

$$\begin{aligned} S_D &= \mathcal{D}_{\alpha\gamma}^R(\omega, \mathbf{q}, 0) \mathcal{D}_{\gamma\sigma}^R(\omega, \mathbf{q}', 0) \mathcal{D}_{\sigma\alpha}^R(\omega, \mathbf{q}, 0) = \\ &= d_{xx}^R(\omega, q', 0) [d_{xx}^R(\omega, q, 0)]^2 + d_{zz}^R(\omega, q', 0) [d_{zz}^R(\omega, q, 0)]^2 - \\ &\quad - d_{zx}^R(\omega, q, 0) [d_{xx}^R(\omega, q', 0) d_{zx}^R(\omega, q, 0) + 2 d_{zx}^R(\omega, q', 0) d_{xx}^R(\omega, q, 0)], \\ S_P &= \mathcal{D}_{\alpha\mu}^R(\omega, \mathbf{q}, 0) \mathcal{D}_{\mu\nu}^R(\omega, \mathbf{q}', 0) \mathcal{D}_{\nu\alpha}^R(\omega, \mathbf{q}, 0) = \\ &= \frac{(q'_x q_x + q'_y q_y)^2}{q'^2 q^2} d_{xx}^R(\omega, q', 0) \{ [d_{xx}^R(\omega, q, 0)]^2 - [d_{zx}^R(\omega, q, 0, z')]^2 \}. \end{aligned} \quad (43)$$

В этих формулах мы пренебрегли функциями $d_{yy}^R(\omega, q, 0)$, не содержащими согласно [7] величину η в знаменателе. По повторяющимся поляризационным индексам в (41)–(43) производится суммирование, в S_P индексы $\mu, \nu = x, y$.

Воспользуемся явным видом (15), (17) функций $d_{\alpha\beta}^R$ в формулах (42), (43). Тогда функции S_s , $s = m, D, P$, $m = d, \perp, \parallel$, можно записать в единой форме:

$$S_s = \frac{-A_s(q, q')}{(Rc^2)^3 q' q^2 \eta(q') \eta^2(q)}, \quad (44)$$

где

$$\begin{aligned} A_m &= \beta_m q'^2 q^2, \quad A_{D,P} = \beta_{D,P}, \\ \beta_m &= 16 \left(\frac{c_t}{c_l} \right)^8 \beta, \quad \beta_D = \frac{\alpha_1(\alpha_1^2 + 3\nu^2)}{\nu^3}, \quad \beta_P = \beta \cos^2 \theta, \quad \beta = \alpha_1(\alpha_1^2 + \alpha_2^2), \end{aligned} \quad (45)$$

θ – угол между векторами $\mathbf{q}'$ и $\mathbf{q}$, что следует из (43), а $\alpha_{1,2}, \nu$ определяются формулами (16) и (12).

Подставим значения S_s в виде (44) в формулу (39). В результате получаем, что

$$\Delta \mathcal{D}_s^R(\omega, \mathbf{q}, 0) = \frac{-n_s}{(2\pi)^2 \rho^2 (Rc^2)^3 q^2 \eta^2(q)} \int_{q_t}^{\infty} d\mathbf{q}' \frac{\varpi_s^2(|\mathbf{q} - \mathbf{q}'|) A_s f_s}{q' \eta(q')}, \quad (46)$$

где $q_t = \omega/c_t$ – импульс поперечного фонона, наименьший из импульсов R -фононов [7].

Перейдем к вычислению $\Delta \mathcal{D}_s^R(\omega, \mathbf{q}, 0)$ и $1/\tau_s$ с конкретными силовыми коэффициентами $\varpi_s(|\mathbf{q} - \mathbf{q}'|)$ рассматриваемых дефектов.

5. ШИРИНЫ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО СПЕКТРА РЭЛЕЕВСКИХ ФОНОНОВ

Зададим зависимости силовых коэффициентов от импульса $\mathbf{p} = \mathbf{q} - \mathbf{q}'$, передаваемого дефекту. В [15] приведены зависимости от $\mathbf{p}$ точечных и дислокационных дефектных смещений в объеме в предположении дальнего действия, более сильного у дислокаций. Так, следуя [15], для точечных примесей в плоскости поверхности получаем также $\mathbf{p}\mathbf{u}_d = \text{const}$. Для краевой дислокации с выходом на поверхность и вектором Бюргерса, ориентированным вдоль оси x , величина $\mathbf{p}\mathbf{u}_\perp \sim \sin \psi / p$, где $\sin \psi = p_y / p$. Здесь, как и в [15], [16], [20], мы считаем, что производные от потенциалов взаимодействия V_s слабо меняются с координатами. Выпишем используемые в дальнейшем значения $\varpi_s(p)$:

$$\varpi_n(p) = \varpi_n, \quad \varpi_\perp(p) = \frac{\varpi_\perp \sin \psi}{p}, \quad \varpi'_\parallel(p) = \frac{\varpi'_\parallel}{p_y}, \quad (47)$$

где $n = d, D, P, \parallel$. Здесь представлены силовые коэффициенты канавок случайной решетки как с дальним действием $\varpi'_\parallel(p)$, характерным для краевых дислокаций, так и в виде констант $\varpi_\parallel$. Силовые коэффициенты макродефектов в (47) считаются постоянными, как это принято для трехмерных макродефектов. Такое предположение приводит к классическому значению времени релаксации функции распределения объемных фононов, не зависящему от q [15], и такой же независимости их времени жизни [18].

Вычислим функции $\Delta \mathcal{D}_s^R(\omega, \mathbf{q}, 0)$, получаемые из (46) с использованием ϖ_s из (47) и S_s из (44). Отметим, что комплексные величины $\eta^2(q)$ в $\Delta \mathcal{D}_s^R$ (46) и в $[\mathcal{D}^R]^2$ (см. формулу (2)) взаимно сокращаются в формулах (5) для $1/\tau_s$. Поэтому, вычисляя в (46) интегралы по dq' , следует интересоваться лишь мнимой частью подынтегральных функций, связанной с $1/\eta(q')$ (величина η задается формулой (3)), и равной $i(\pi/2)cq'\delta(cq' - \omega)$.

Выражение для $\Delta \mathcal{D}_d^R(\omega, \mathbf{q}, 0)$ в результате принимает вид

$$\Delta \mathcal{D}_d^R(\omega, \mathbf{q}, 0) = 4Bn_d\varpi_d^2q^3, \quad B = \frac{-i\beta}{\rho^2(Rc^2)^3\eta^2(q)}\left(\frac{c_t}{c_l}\right)^8. \quad (48)$$

Функции $\Delta \mathcal{D}_M^R(\omega, \mathbf{q}, 0)$, где $M = D, P$, вычисленные по формуле (46), задаются выражениями

$$\Delta \mathcal{D}_M^R(\omega, \mathbf{q}, 0) = \frac{B_M n_M \varpi_M^2}{q}, \quad B_M = \frac{-i}{4\rho^2(Rc^2)^3\eta^2(q)}\left(\beta_D, \frac{\beta}{2}\right). \quad (49)$$

Здесь в формуле для B_M следует использовать множитель $\beta_D, \beta/2$ при $M = D, P$, соответственно. В случае рассеяния R -фонона на дислокациях для $\Delta \mathcal{D}_\perp^R(\omega, \mathbf{q}, 0)$ получаем выражение

$$\Delta \mathcal{D}_\perp^R(\omega, \mathbf{q}, 0) = \frac{2Bn_\perp\varpi_\perp^2}{\pi} \int_{q_t}^\infty dq' q'^3 \delta\left(q' - \frac{\omega}{c}\right) \int_0^\pi d\theta \frac{\cos^2(\varphi + \theta/2)}{q^2 + q'^2 - 2qq' \cos \theta}, \quad (50)$$

где B определяется формулой (48). В (50) использована связь между углами в треугольнике, образованном векторами $\mathbf{q}'$, $\mathbf{p}$, $\mathbf{q}$. В нем φ – угол между $\mathbf{q}$ и осью x , угол θ

заключен между $\mathbf{q}'$ и $\mathbf{q}$, а $\psi = (\pi - \theta)/2 - \varphi$ — угол между $\mathbf{p}$ и осью x согласно определениям (45) и (47).

При $q = q' = \omega/c$ интеграл по $d\theta$ в (50) расходится при $\theta \rightarrow 0$. Следовательно, надо определить минимальный угол $\theta_0 \neq 0$, обеспечивающий рассеяние R -фонона с конечным уширением спектра. Свяжем q_t (нижний предел интегрирования по dq') с θ_0 . Заметим, что в равнобедренном треугольнике со сторонами, равными $q' = q$ и p , биссектриса угла θ равна $q_t = q'_{\min} = q_{\min}$. Следовательно, на нулевой угол рассеиваются только поперечные фононы, что видно из равенства $q \cos \theta/2 = q_t$. Найдем наименьший угол, при котором это равенство еще выполняется. Он равен $\theta_0 = [8(1 - c/c_t)]^{1/2} \simeq 2\nu$, где $\nu^2 \simeq 2(1 - c/c_t)$ при $c \lesssim c_t$, согласно (12).

Минимальный угол рассеяния также можно попытаться вычислить из условия отсутствия корреляции между дислокациями со средним расстоянием между ними $d \gtrsim 1/p$. Из этого условия следует, что при $q = q'$ в знаменателе подынтегральной функции в (50) $p = 2q \sin \theta/2 \gtrsim 1/d$. Тогда $\theta_0 \gtrsim 1/qd$, где $qd > 1$ при малой плотности $n_{\perp}$.

Если дислокации заряжены, то можно учесть экранировку дальнего действия поля дефектного смещения заряженными частицами в образце, введя в (50) замену $p^2 \mapsto p^2 + \kappa^2$, где κ — обратный радиус экранирования [3]. Выбор θ_0 , т.е. механизма, ограничивающего рассеяние R -фононов на малые углы, определяется конкуренцией между тремя величинами:

$$\theta_0 = \max\left(2\nu, \frac{1}{qd}, \frac{\kappa}{q}\right). \quad (51)$$

Отметим здесь, что расходимость вероятности рассеяния на краевых дислокациях при $\theta \rightarrow 0$ характерна также для объемных волн [15].

Усредним теперь $\Delta\mathcal{D}_{\perp}^R$ по углам падения φ . В результате из (50) получаем

$$\Delta\mathcal{D}_{\perp}^R(\omega, \mathbf{q}, 0) = B\pi^{-1}n_{\perp}\varpi_{\perp}^2 q \min\left(\frac{1}{2\nu}, \frac{q}{\kappa}, qd\right). \quad (52)$$

При рассеянии R -фонона на канавках случайной решетки для $\Delta\mathcal{D}_{\parallel}^R$ также требуется усреднение по углам падения φ , так как этот угол входит в $f_{\parallel} = \delta(p_x)$ из (35) и в $\varpi'_{\parallel}(p_y) = \varpi'_{\parallel}/p_y$ из (47). В результате получаем, что

$$\begin{aligned} \Delta\mathcal{D}'_{\parallel}^R(\omega, \mathbf{q}, 0) &= \\ &= \frac{Bn'_{\parallel}\varpi_{\parallel}^{\prime 2}}{4\pi^2} \int_{q_t}^{\infty} dq' \delta\left(q' - \frac{\omega}{c}\right) \int_0^{\pi} d\varphi \int_{\theta_0}^{\pi} d\theta \frac{\delta[\sin(\varphi + \theta/2)]}{\sin^3(\theta/2) \cos^2(\varphi + \theta/2)}, \\ \Delta\mathcal{D}_{\parallel}^R(\omega, \mathbf{q}, 0) &= \\ &= \frac{Bn_{\parallel}\varpi_{\parallel}^2 q^2}{\pi^2} \int_{q_t}^{\infty} dq' \delta\left(q' - \frac{\omega}{c}\right) \int_0^{\pi} d\varphi \int_{\theta_0}^{\pi} d\theta \frac{\delta[\sin(\varphi + \theta/2)]}{\sin(\theta/2)}. \end{aligned} \quad (53)$$

Здесь использованы соотношения $p_x = p \cos \psi = p \sin(\varphi + \theta/2)$, $p_y = p \sin \psi = p \cos(\varphi + \theta/2)$, где $p = 2q \sin(\theta/2)$ при $q = q'$. В формулах (53) в качестве нижнего предела интеграла по $d\theta$ введен угол θ_0 , определяемый (51), чтобы устранить расходимость при $\theta \rightarrow 0$.

В результате функции (53) принимают окончательный вид

$$\begin{aligned}\Delta\mathcal{D}'^R(\omega, \mathbf{q}, 0) &= B\pi^{-2}n'_\parallel\varpi'^2_\parallel \min\left[\frac{1}{4\nu^2}, (qd)^2, \left(\frac{q}{\kappa}\right)^2\right], \\ \Delta\mathcal{D}^R(\omega, \mathbf{q}, 0) &= 2B\pi^{-2}n_\parallel\varpi^2_\parallel q^2 \ln 4 \min\left(\frac{1}{2\nu}, qd, \frac{q}{\kappa}\right).\end{aligned}\quad (54)$$

Ширины энергетического спектра R -фононов, обусловленные их рассеянием на всех рассматриваемых здесь дефектах, можно записать в общем виде. Подставим в формулу (5) для $1/\tau$ значения $\mathcal{D}^R$ из (2), (17) и $\Delta\mathcal{D}^R_s$ из (48), (49), (52), (54). Тогда

$$(\tau_s)^{-1} = C_s n_s \varpi_s^2 q^n, \quad (55)$$

где ϖ_s — силовые константы из (47), а коэффициенты C_s задаются формулами

$$\begin{aligned}C_D &= \frac{\beta_D}{4\alpha(\rho R)^2 c^3}, & C_P &= \frac{\beta}{8\alpha(\rho R)^2 c^3}, & (n=1); \\ C_d &= 32C_P \left(\frac{c_t}{c_l}\right)^8, & (n=5); & & C_\perp &= \frac{C_d}{8\pi\nu}, & (n=3); \\ C'_\parallel &= \frac{C_d}{32\pi^2\nu^2}, & (n=2); & & C_\parallel &= \frac{C_d}{4\pi^2 \ln 1/\nu}, & (n=4),\end{aligned}\quad (56)$$

где β_D, β определены в (45), а ν, R , соответственно, в (12), (14). Здесь формулы для $C_\perp, C_\parallel, C'_\parallel$ верны при условии, что $1/2\nu < q/\kappa, qd$. Если q/κ или $qd < 1/2\nu$, то $1/\tau_\perp$ и $1/\tau'_\parallel$ имеют порядок q^4 . Влиянием рассеяния на малые углы в $1/\tau_\parallel \sim q^4$ можно пренебречь, так как логарифм — слабо меняющаяся функция своих аргументов.

6. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Сопоставим выражения для $(2\tau_s)^{-1}$ из (55), (56) со значениями ширин энергетического спектра рэлеевских волн, вычисленными другими авторами и полученными в экспериментах.

Ширина $(2\tau_d)^{-1} \sim q^5$, связанная с рассеянием R -фонона на точечных дефектах поверхности изотропных кристаллов, вычислена самыми различными методами во многих работах, например в [8], [9], [11]–[14]. Зависимость $(2\tau_\parallel)^{-1} \sim q^4$, обусловленная рассеянием R -фононов на канавках случайной решетки, найдена в работах [8], [10] (см. также ссылки из [10]). Этот результат соответствует поведению $(\tau_\parallel)^{-1}$ из (55) и (56) с постоянными силовыми коэффициентами. В некоторых цитированных работах не используют плотность числа дефектов n_s , а усредняют вводимые там функции профиля дефектов по их расположению с помощью функции распределения Гаусса $\sim \exp[-(dq)^2]$. Она призвана обеспечить уменьшение τ^{-1} с увеличением d . Приведенные в этой работе зависимости $\tau_d^{-1}, \tau_\parallel^{-1}$ от q вычислены в пределе $dq \ll 1$, т.е. при малых расстояниях между дефектами. Однако усреднение по положению примесей в виде (36), (38), где суммирование заменяется усреднением по всему пространству, умноженному на число

дефектов, допустимо, если $dq > 1$ [9], [3], [16]. В результате τ_s^{-1} имеет порядок величины n_s , меньшей соответствующей плотности основного вещества. Уменьшение ширины спектра с увеличением d при таком подходе обеспечено малостью n_s . При выполнении соотношения $dq \sim 1$ справедлива оценка $\exp[-(dq)^2] \lesssim 1$ и возможно качественное совпадение величин τ_d^{-1} , $\tau_{\parallel}^{-1}$, вычисленных различными способами.

Для ширин спектров R -фоонов $\tau_{D,P}^{-1} \sim q$, $\tau_{\perp}^{-1} \sim q^3$, $(\tau'_{\parallel})^{-1} \sim q^2$, связанных с их рассеянием на макропримесях, краевых дислокациях с выходом на поверхность и канавках случайной решетки в плоскости поверхности с дальним действием не удалось найти работ для сопоставления.

Рассеяние R -фоонов на плоских макродефектах можно рассматривать как рассеяние на плоской гладкой поверхности, если устремить расстояние между ними к нулю, т.е. положить $dq \ll 1$. В этом случае в выражении для τ_P^{-1} надо заменить суммирование по непрерывному положению примесей на интеграл по всей поверхности. В результате плотность дефектов не входит в выражение для ширины спектра, а линейная зависимость от q сохраняется. Зависимость $\tau^{-1} \sim q$ для ширины спектра рэлеевской волны при ее отражении от плоской поверхности наблюдалась в экспериментах с дюралюминием в [21] и в цитируемых там более ранних работах.

Разброс экспериментальных точек в [21] при измерении затухания R -фоонов на точечных дефектах поверхности велик во всем диапазоне значений dq . Разброс остается большим при рассеянии на линейных дефектах поверхности при $dq > 1$ и менее заметен при $dq \lesssim 1$, где зависимость $\tau_{\parallel}^{-1}$ от q почти квадратична.

Понижение зависимости уширения спектра R -фоонов от q при $d \gg 1/q$ можно связать с вмешательством их рассеяния на поверхности. В этом случае вклад $\tau_{d,\parallel}^{-1}$ в общее уширение спектра падает из-за уменьшения плотности дефектов, оставаясь существенным при $d \gtrsim 1/q$. Если $d \sim a_0 \ll 1/q$, то плотность дефектов сопоставима с плотностью поверхности основной решетки. Тогда уширение спектра R -фоонов должно быть линейно по q и связано только с их рассеянием на плоской поверхности такого образца.

7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе вычислены ширины энергетического спектра поверхностных рэлеевских волн $(2\tau_s)^{-1}$ в полуограниченных образцах с пятью видами дефектов поверхности решетки: точечными, где $\tau_d^{-1} \sim q^5$; масштабными трехмерными (D) и плоскими (P) с зависимостью $\tau_{D,P}^{-1} \sim q$; краевыми дислокациями с выходом на поверхность, где $\tau_{\perp}^{-1} \sim q^3$; канавками случайной решетки на поверхности с $\tau_{\parallel}^{-1} \sim q^4$, и $(\tau'_{\parallel})^{-1} \sim q^2$, соответственно, с постоянными силовыми константами и с учетом в них дальнего действия, как у дислокаций. При этом плотность дефектов полагалась малой, т.е. считалось, что расстояние между ними больше длины поверхностной волны l . Ввиду локализации рэлеевских волн вблизи поверхности на расстояниях $z \sim l$, у взаимодействующих с ними трехмерных дефектов учитывались лишь двумерные поверхностные части.

Все результаты получены с помощью диаграммной техники Келдыша [4] с изменениями, обусловленными полуограниченностью среды [5], [6], [17]. Единая формула для τ_s^{-1} содержит запаздывающие функции Грина свободных рэлеевских фоонов и поправ-

ки к ним, связанные с рассеянием рэлеевских волн на дефектах различных видов. Гамильтонианы взаимодействия рэлеевских волн с дефектами моделировались с учетом трансляционной инвариантности решетки, нарушаемой или сохраняемой в конкретных направлениях рассматриваемыми здесь дефектами.

Благодарности. Выражаю свою признательность А. С. Простневу за внимание к работе. Это исследование поддерживалось Российским фондом фундаментальных исследований (проект № 02-03-32170).

Список литературы

- [1] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. Теория упругости. М.: Наука, 1987.
- [2] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. Квантовая механика. М.: Наука, 1974.
- [3] А. А. Абрикосов, Л. П. Горьков, И. Е. Дзялошинский. Методы квантовой теории поля в статистической физике. М.: Наука, 1962.
- [4] Л. В. Келдыш. ЖЭТФ. 1964. Т. 47. С. 1515; Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский. Физическая кинетика. М.: Наука, 1979.
- [5] Л. А. Зайцева. ТМФ. 2001. Т. 127. № 2. С. 336.
- [6] Л. А. Зайцева. Хим. физика. 2000. Т. 19. № 5. С. 3.
- [7] A. A. Maradudin, D. L. Mills. Ann. Phys. 1976. V. 100. P. 262.
- [8] X. Huang, A. A. Maradudin. Phys. Rev. B. 1987. V. 36. № 15. P. 7827.
- [9] R. G. Steg, P. G. Klemens. Phys. Rev. Lett. 1970. V. 24. P. 381.
- [10] В. В. Косачев, Ю. Н. Гандурин. ФТТ. 2003. Т. 45. № 2. С. 369.
- [11] Е. И. Урзаков, Л. А. Фальковский. ЖЭТФ. 1972. Т. 63. № 6(12). С. 2297.
- [12] T. Nakayama, T. Sakuma. J. Appl. Phys. 1975. V. 46. P. 2445.
- [13] В. В. Крылов, В. Е. Лямов. ЖТФ. 1979. Т. 49. № 11. С. 2514.
- [14] В. В. Косачев, Ю. Н. Гандурин. ФТТ. 2003. Т. 45. № 9. С. 1722.
- [15] Б. М. Мозилевский, А. Ф. Чудновский. Теплопроводность полупроводников. М.: Наука, 1972.
- [16] В. Л. Гуревич. Кинетика фононных систем. М.: Наука, 1980.
- [17] Л. А. Зайцева. ТМФ. 2004. Т. 139. № 2. С. 338.
- [18] Л. А. Зайцева. ТМФ. 1998. Т. 115. № 2. С. 289.
- [19] Л. А. Зайцева. Хим. физика. 2004. Т. 23. № 6. С. 69.
- [20] В. Л. Бонч-Бруевич, С. Г. Калашиников. Физика полупроводников. М.: Наука, 1977.
- [21] M. De Billy, G. Quentin, E. Varon. J. Appl. Phys. 1987. V. 61. № 6. P. 2140.

Поступила в редакцию 27.VII.2004 г.