Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

Л. А. Зайцева, Термодинамическая энергия полуограниченных твердых тел с двумерным газом горячих электронов вблизи поверхности, *ТМФ*, 2001, том 127, номер 2, 336–352

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf461>

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: 54.147.182.235

26 апреля 2023 г., 18:21:38

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКАЯ ЭНЕРГИЯ ПОЛУОГРАНИЧЕННЫХ ТВЕРДЫХ ТЕЛ С ДВУМЕРНЫМ ГАЗОМ ГОРЯЧИХ ЭЛЕКТРОНОВ ВБЛИЗИ ПОВЕРХНОСТИ

Получены выражения для термодинамической энергии полуограниченных твердых тел различной ширины с тонким слоем горячих вырожденных электронов вблизи свободной поверхности. Показано, что в тонких пленках этой энергией является энергия возбуждения горячих электронов, в толстых пленках – неравновесная энергия рэлеевских волн, в больших образцах – равновесная энергия объемных фононов. Все расчеты проводились с помощью диаграммной техники Келдыша.

1. ВВЕДЕНИЕ

Предметом исследования в данной работе являются полуограниченные кристаллы с тонким слоем горячих вырожденных электронов вблизи свободной поверхности. Такие системы реализуются в полупроводниковых приборах. Это могут быть, например, полупроводники с гетеропереходами (при контакте двух различных по химическому составу образцов) или с инверсионными слоями (с повышенной концентрацией неосновных носителей тока вблизи границы с металлом).

Термодинамической энергией кристалла является часть его полной средней энергии, зависящая от температуры [1]. В рассматриваемых образцах она определяется энергией фононов и энергией возбуждения электронов с учетом электрон-фононного взаимодействия. Не зависящая от температуры часть полной средней энергии представляет собой энергию нулевых колебаний решетки и энергию вырождения электронов¹⁾.

Электроны принято называть горячими, если их средняя энергия больше средней энергии электронов в состоянии равновесия с решеткой. У электронов, нагретых лазером или током, в результате электрон-электронного взаимодействия может установиться

¹⁾ При температуре среды T ниже температуры Дебая Θ эти энергии соответственно больше энергии фононов и энергии возбуждения электронов. Однако такие важнейшие макрохарактеристики веществ, как, например, теплоемкость, определяются их термодинамической энергией.

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

ся температура T_e выше температуры среды T [2]. При этом система (горячие электроны плюс фононы) в целом остается определенное время неравновесной.

Тонкий слой электронов можно считать двумерным, если его толщина $d \lesssim l$, где l — характерная длина волны фононов. Расстоянием слоя электронов от поверхности z_0 можно пренебречь, если $z_0 \lesssim l$. Как известно, при $T_e < \mu$, где μ — энергия Ферми, электроны вырождены и представляют собой почти идеальный газ.

Существенное различие в акустических свойствах контактирующих веществ или плохой механический контакт затрудняют прохождение акустических фононов через границу раздела. Компоненты тензора напряжений на такой поверхности по нормали к ней можно считать равными нулю. Определенную так поверхность принято называть свободной [3]. В данной работе будут рассматриваться полуограниченные кристаллы различного размера. При этом предполагается, что поверхность, противоположная свободной, у больших образцов удалена на бесконечность. Это означает, что их размер $L_z \gg l$. В пленках с толщинами $L_z^0 \lesssim l$ вторая поверхность плотно контактирует с акустически согласованной средой. Размеры $L_x, L_y \gg l$ в образцах с любым L_z .

Надежных расчетов неравновесных макрохарактеристик ограниченных кристаллов не так много. Наличие поверхности у неравновесной системы значительно усложняет такие расчеты. Это связано с присутствием вблизи свободной поверхности рэлеевских волн [3], [4]. Кроме того, существующие наряду с ними объемные волны частично меняют свою поляризацию при отражении от такой поверхности. Термодинамические характеристики равновесных полуограниченных кристаллов различной толщины (например, теплоемкость, средняя энергия) вычислялись ранее [5]–[7]. Получены формулы для термодинамической энергии неограниченных образцов с равномерно распределенными в объеме горячими электронами [8]. Более многочисленны расчеты кинетических характеристик горячих электронов, которые определяются интегралом столкновений в кинетическом уравнении для электронной функции распределения. Так, в работе [9] вычислены мощности потерь (температура релаксации энергии и температуры) горячих электронов, равномерно распределенных в объеме неограниченного образца вследствие их рассеяния на деформационном потенциале решетки. В работе [10] найдены условия, при которых температура релаксации энергии двумерного газа горячих электронов из-за такого же рассеяния значительно снижен вблизи свободной поверхности полуограниченного кристалла.

В данной работе вычисляется полная средняя колебательная энергия полуограниченных кристаллов различной толщины с двумерным газом горячих электронов вблизи свободной поверхности. Вычисления проводятся, как и в работах [7], [8], методом диаграммной техники Келдыша [11], [12]. В рассматриваемом случае важно, что функции Келдыша квадратичны по смещениям. Это избавляет от необходимости следить за эволюцией векторов смещений при отражении от границ, как это обычно делается [5], [6]. Вблизи поверхности векторы поляризации объемных волн теряют строгую ориентацию относительно направлений своих волновых векторов. В этой ситуации вектор смещений среды может быть представлен в виде линейной комбинации продольных (l) и поперечных (t) смещений. Их удельный вклад в общий вектор смещений определяется граничными условиями к уравнениям движения упругой среды [3]. Техника Келды-

ша [11], [12] применима к неограниченным средам. В данной работе получены функции Келдыша свободных фононов в полуограниченных кристаллах. С этой целью используются функции Грина уравнений движения упругой среды с учетом обрыва упругих констант на поверхности ($z = 0$) и затухания решений при $z \rightarrow \infty$. Эти функции были получены в работе [13], где с их помощью вычислялось затухание рэлеевских волн на шероховатостях свободной поверхности. Функции Келдыша свободных электронов в слое будут представлены в виде произведения двумерных функций Келдыша и модельных функций от переменных z , введенных в работе [10]. Потенциал взаимодействия фононов с электронами будем считать деформационным.

Существенно, что техника Келдыша применима для расчета макрохарактеристик неравновесных систем при любых температурах подсистем, включая нулевые. Это позволяет выделить из полной средней энергии кристалла с горячими электронами термодинамическую энергию. Как показано в [8], термодинамической энергией неограниченного образца с распределенными в объеме горячими электронами при $T < T_e \ll \Theta$ является неравновесная энергия фононов. Вследствие нагрева части фононов до температуры T_e из-за деформационного взаимодействия с горячими электронами эта энергия зависит от T_e и T . При $T_e \gg T$ неравновесная энергия фононов оказывается больше энергии свободных фононов, зависящей от T . При малой плотности электронов неравновесная энергия фононов превышает также энергию возбуждения электронов. В данной работе найден относительный вклад неравновесной энергии пространственных и поверхностных волн в полную среднюю энергию полуограниченных кристаллов различной толщины со слоем горячих электронов вблизи свободной поверхности.

2. ПОЛНАЯ СРЕДНЯЯ КОЛЕБАТЕЛЬНАЯ ЭНЕРГИЯ ПОЛУОГРАНИЧЕННОГО КРИСТАЛЛА СО СЛОЕМ ГОРЯЧИХ ЭЛЕКТРОНОВ

Выразим полную среднюю колебательную энергию решетки изолированного кристалла через удвоенную кинетическую энергию [14] по формуле [8]

$$E = i \int d\mathbf{r} \frac{\partial^2}{\partial t \partial t_1} \text{Sp } D_{\alpha\beta}^{-+}(X, X_1)|_{X_1=X}, \quad (1)$$

где

$$D_{\alpha\beta}^{-+}(X, X_1) = -i\rho \langle \hat{U}_\beta(X_1) \hat{U}_\alpha(X) \rangle \quad (2)$$

— вневременная функция Келдыша [11], [12]. В соотношениях (1), (2) ρ — плотность вещества, $X = (\mathbf{r}, t)$, оператор смещений $\hat{U}_\alpha(X)$ точек среды с координатой $\mathbf{r}$ в направлении α учитывает полуограниченность образца и взаимодействие фононов с горячими электронами. Угловые скобки в (2) подразумевают усреднение по числам заполнения электронов и фононов и по их распределениям Гиббса. Ограничимся в $D_{\alpha\beta}^{-+}$ первыми исчезающими членами разложения в ряд по деформационному гамильтониану взаимодействия

$$\hat{H}(t) = \lambda \int d\mathbf{r} \psi^+(X) \nabla \hat{\mathbf{u}}(X) \psi(X), \quad (3)$$

где λ – константа деформационного взаимодействия в кристаллах кубической симметрии, ψ^+ , ψ – вторично квантованные операторы электронного поля, $\hat{\mathbf{u}}$ – операторы свободных смещений полуограниченной решетки.

Полуограниченная среда в направлении z неоднородна. Решения уравнений движения такой среды в виде функций Грина получены в [13] в смешанном $\omega, \mathbf{q}, z$ -представлении, где ω – частота, а $\mathbf{q} = \{q_x, q_y\}$ – двумерный импульс. Заметим, что в частотном представлении переход от функций Грина к запаздывающим функциям Грина осуществляется простой заменой ω на $\omega + i\delta$, где $\delta \rightarrow 0$ [14]. Известно [11], [12], что функции Келдыша свободных частиц связаны с запаздывающими (R) и опережающими (A) функциями Грина через распределения Планка и Ферми только в частотно-импульсном представлении. Существенно при этом, что распределение Планка

$$n(\omega) = \left[\exp\left(\frac{\omega}{T}\right) - 1 \right]^{-1} \quad (4)$$

зависит только от частоты ω . Поэтому вышеупомянутые связи функций Келдыша с функциями Грина справедливы и в смешанном представлении [10].

Выразим энергию (1) через функцию $D_{\alpha\beta}^{-+}(\omega, \mathbf{q}, z, z_1)$. После соответствующих преобразований Фурье получаем, что

$$E = \frac{L_x L_y}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \omega^2 \int d\mathbf{q} \int_0^L dz D^{-+}(\omega, \mathbf{q}, z), \quad (5)$$

$$D^{-+} = \mathcal{D}^{-+} + \Delta \mathcal{D}^{-+}, \quad (6)$$

где $D^{-+}(\omega, \mathbf{q}, z) = \text{Sp } D_{\alpha\beta}^{-+}(\omega, \mathbf{q}, z, z_1)|_{z_1=z}$ и

$$\mathcal{D}_{\alpha\beta}^{-+}(\omega, \mathbf{q}, z, z_1) = 2n(\omega) \text{Im } \mathcal{D}_{\alpha\beta}^{\text{R}}(\omega, \mathbf{q}, z, z_1) \quad (7)$$

– вневременная функция Келдыша свободных фононов в полуограниченном пространстве. Энергия свободных акустических колебаний решетки E_{av} , определяемая формулой (5) с функцией (7), вычислена в работе [7]. Выражения для E_{av} приведены в приложении (формулы (П.13)–(П.16)). Поправка ΔE к E_{av} определяется функцией

$$\begin{aligned} \Delta \mathcal{D}_{\alpha\beta}^{-+}(\omega, \mathbf{q}, z) &= \frac{i\lambda^2}{(2\pi)^3 \rho} \text{Sp} \sum_{\gamma, \delta} \sum_{i, j} (-1)^{\delta_{ij}} \int_0^L dz_1 |\psi(z_1)|^2 \int_0^L dz_2 |\psi(z_2)|^2 \times \\ &\times \hat{q}_\gamma \hat{q}_\delta \mathcal{D}_{\alpha\gamma}^{-i}(\omega, \mathbf{q}, z, z_1) \Pi^{ij}(\omega, \mathbf{q}, z_1, z_2) \mathcal{D}_{\delta\beta}^{j+}(\omega, \mathbf{q}, z_2, z). \end{aligned} \quad (8)$$

Здесь при $\gamma, \delta = x, y, z$, $\nu = x, y$, $i, j = +, -$ учтено, что

$$\sum_{\gamma} \mathcal{D}_{\alpha\gamma}^{-i} = \sum_{\nu} -iq_{\nu} \mathcal{D}_{\alpha\nu}^{-i} + \frac{\partial}{\partial z_1} \mathcal{D}_{\alpha z}^{-i}, \quad \sum_{\beta} \mathcal{D}_{\beta\delta}^{j+} = \sum_{\nu} iq_{\nu} \mathcal{D}_{\nu\delta}^{j+} + \frac{\partial}{\partial z_2} \mathcal{D}_{z\delta}^{j+}. \quad (9)$$

Поляризационные части в (8) имеют вид

$$\Pi^{ij}(\omega, \mathbf{q}) = \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \int d\mathbf{p} G^{ij}(\varepsilon, \mathbf{p}) G^{ji}(\varepsilon - \omega, \mathbf{p} - \mathbf{q}), \quad (10)$$

где ε – энергия, а $\mathbf{p} = \{p_x, p_y\}$ – двумерный импульс электронов. Функции $G^{ij}(\varepsilon, \mathbf{p})$ формально совпадают с выражениями для трехмерных электронных функций Келдыша в работе [12] (формулы (П.1), (П.2) в приложении). Функции $|\psi(z_1)|^2$ в формуле (8) характеризуют распределение электронов в слое в направлении, перпендикулярном поверхности [10].

Поправка $\Delta\mathcal{D}^{-+}(\omega, \mathbf{q}, z)$, как и в работе [8], может быть записана через запаздывающие $\mathcal{D}_{\alpha\beta}^R$ и опережающие $\mathcal{D}_{\alpha\beta}^A$ функции Грина с помощью известных соотношений [11], [12]

$$\begin{aligned} \sum_{i,j} \mathcal{D}_{\alpha\beta}^{ij} (-1)^{\delta_{ij}} &= 0, & \sum_{i,j} \Pi^{ij} (-1)^{\delta_{ij}} &= 0, \\ \mathcal{D}_{\alpha\beta}^R &= \mathcal{D}_{\alpha\beta}^{--} - \mathcal{D}_{\alpha\beta}^{+-}, & \mathcal{D}_{\alpha\beta}^A &= \mathcal{D}_{\alpha\beta}^{--} - \mathcal{D}_{\alpha\beta}^{+-}. \end{aligned} \quad (11)$$

Функцию $\Delta\mathcal{D}^{-+}(\omega, \mathbf{q}, z)$ удобно представить в виде суммы $\Delta\tilde{\mathcal{D}}^{-+} + \Delta\overline{\mathcal{D}}^{-+}$, используя формулы (7) и (П.5), (П.6) для Π^{ij} , где

$$\Delta\tilde{\mathcal{D}}_{\alpha\beta}^{-+} = -\frac{2i\lambda^2 I_2}{(2\pi)^3 \rho} (n_e - n) \sum_{\gamma, \delta} \int_0^L dz_1 |\psi(z_1)|^2 \int_0^L dz_2 |\psi(z_2)|^2 \text{Sp } \hat{q}_\gamma \hat{q}_\delta \mathcal{D}_{\alpha\gamma}^R \mathcal{D}_{\delta\beta}^A, \quad (12)$$

$$\begin{aligned} \Delta\overline{\mathcal{D}}_{\alpha\beta}^{-+} &= -\frac{i\lambda^2}{(2\pi)^3 \rho} n \sum_{\gamma, \delta} \int_0^L dz_1 |\psi(z_1)|^2 \int_0^L dz_2 |\psi(z_2)|^2 \times \\ &\times \text{Sp } \hat{q}_\gamma \hat{q}_\delta [iI_1 (\mathcal{D}_{\alpha\gamma}^R \mathcal{D}_{\delta\beta}^R - \mathcal{D}_{\alpha\gamma}^A \mathcal{D}_{\delta\beta}^A) + I_2 (\mathcal{D}_{\alpha\gamma}^R \mathcal{D}_{\delta\beta}^R + \mathcal{D}_{\alpha\gamma}^A \mathcal{D}_{\delta\beta}^A)]. \end{aligned} \quad (13)$$

Поправка $\Delta\tilde{\mathcal{D}}^{-+}$ определяет неравновесную энергию решетки, связанную с избытком среднего числа фононов $n_e = n(T_e)$, разогретых электронами до температуры T_e , над числом фононов n с температурой среды T . Энергия, зависящая от $\Delta\overline{\mathcal{D}}^{-+}$, содержит поправку к энергии свободных фононов, оставшихся холодными после взаимодействия с электронами, а также, как будет видно из дальнейшего, поправку к энергии нулевых колебаний решетки.

Для того чтобы вычислить энергию E с помощью формул (5)–(7) и (11)–(13), необходимо задать функции $|\psi(z)|^2$ и $\mathcal{D}_{\alpha\beta}^{R,A}$ в явном виде.

3. ЗАПАЗДЫВАЮЩИЕ И ОПЕРЕЖАЮЩИЕ ФУНКЦИИ ГРИНА СВОБОДНЫХ АКУСТИЧЕСКИХ ФОНОНОВ В ПОЛУОГРАНИЧЕННОЙ СРЕДЕ

Функции Грина, вычисленные в работе [13], являются решениями системы уравнений движения упругой среды

$$\sum_{\gamma} \hat{L}_{\alpha\gamma}(X) \mathcal{D}_{\gamma\beta}(X, X_1) = \delta_{\alpha\beta} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1) \delta(t - t_1). \quad (14)$$

Здесь лагранжиан $\hat{L}_{\alpha\gamma}(X)$ имеет вид

$$\hat{L}_{\alpha\gamma}(X) = \delta_{\alpha\gamma} \frac{\partial^2}{\partial t^2} + \frac{1}{\rho} \sum_{\beta, \delta} \left(\frac{\partial}{\partial r_\beta} C_{\alpha\beta\gamma\delta}(z) \frac{\partial}{\partial r_\delta} + C_{\alpha\beta\gamma\delta}(z) \frac{\partial^2}{\partial r_\beta \partial r_\delta} \right), \quad (15)$$

где $C_{\alpha\beta\gamma\delta}(z)$ – модули упругости. Одним граничным условием к уравнениям (14) в работе [13] является условие

$$C_{\alpha\beta\gamma\delta}(z) = C_{\alpha\beta\gamma\delta}\Theta(z) \quad (16)$$

с функцией включения $\Theta(z)$ равной 1 при $z \geq 0$ и 0 при $z < 0$. Для кубических кристаллов модули упругости выражаются через c_t и c_l – скорости t - и l -волн. Условие (16) означает, что вне образца со свободной поверхностью скорости звука пренебрежимо малы. Второе граничное условие к уравнениям (14) обусловлено в работе [13] затуханием их решений, запаздывающих во времени, при $z \rightarrow \infty$.

Решения уравнений (14) получены в работе [13] в $\omega, \mathbf{q}, z$ -представлении и в системе координат, где ось x совпадает с направлением $\mathbf{q}$. Эти функции связаны с функцией $\mathcal{D}_{\alpha\beta}(\omega, \mathbf{q}, z, z_1)$ формулой

$$d_{\alpha\beta}(\omega, q, z, z_1) = \sum_{\gamma\delta} S_{\alpha\gamma}(\mathbf{q}) \mathcal{D}_{\gamma\delta}(\omega, \mathbf{q}, z, z_1) S_{\delta\beta}^{-1}(\mathbf{q}), \quad (17)$$

где матрица перехода имеет вид

$$S(\mathbf{q}) = \frac{1}{q} \begin{pmatrix} q_x & q_y & 0 \\ -q_y & q_x & 0 \\ 0 & 0 & q \end{pmatrix}. \quad (18)$$

Следствием преобразования (17) является независимость $d_{\alpha\beta}$ от направления вектора $\mathbf{q}$ и равенство $d_{\alpha\beta} = 0$ с $\alpha, \beta = y$ при $\alpha \neq \beta$. Отметим здесь, что функции $d_{\alpha\beta}(\omega, q, z, z_1)$ из работы [13] обладают следующим свойством по отношению к перестановкам α, β и z, z_1 :

$$d_{\alpha\beta}(\omega, q, z, z_1) = (-1)^{\delta_{\alpha\beta}+1} d_{\beta\alpha}(\omega, q, z_1, z). \quad (19)$$

Запаздывание колебаний решетки во времени можно учесть непосредственно в решениях уравнения (14) в $\omega, \mathbf{q}, z$ -представлении, заменив в них ω на $\omega + i\delta$, где $\delta \rightarrow 0$ [14]. Переход от функций $d_{\alpha\beta}^A$ к функциям $d_{\alpha\beta}^R$ в $\omega, \mathbf{q}, z$ -представлении не сводится к простой замене $\omega + i\delta$ на $\omega - i\delta$, а затрагивает поляризационные индексы α, β и координаты z, z_1 . По определению [12] имеем

$$\mathcal{D}_{\alpha\beta}^A(X, X_1) = \mathcal{D}_{\beta\alpha}^R(X_1, X). \quad (20)$$

Подвергнув (20) преобразованию Фурье и используя (17), получаем, что

$$d_{\alpha\beta}^A(\omega, q, z, z_1) = d_{\beta\alpha}^{R*}(\omega, q, z_1, z). \quad (21)$$

С учетом (19) это соотношение записывается в виде

$$d_{\alpha\beta}^A(\omega, q, z, z_1) = (-1)^{\delta_{\alpha\beta}+1} d_{\alpha\beta}^{R*}(\omega, q, z, z_1). \quad (22)$$

В явном виде функции $d_{\alpha\beta}(\omega, q, z, z_1)$ весьма громоздки. Для дальнейшего использования они взяты из работы [13] при $z_1 = z$ (см. приложение). Существенно, что функции $d_{\alpha\beta}(\omega, q, z, z_1)$ различны в трех областях q -пространства. Индексами $v = l, t, R$ в (П.7)–(П.10) и далее обозначена принадлежность этих функций к одной из трех областей q . При $0 \leq q \leq \omega/c_l$ функция $d_{\alpha\beta}$ состоит из продольных и поперечных расходящихся волн. В интервале $\omega/c_l \leq q \leq \omega/c_t$ в $d_{\alpha\beta}$ остаются лишь t -волны, а l -волны затухают при $z \rightarrow \infty$. При $\omega/c_t \leq q \leq \infty$ и $z \rightarrow \infty$ затухают обе объемные волны. Однако, как будет видно из дальнейшего, в области с такими q образуются рэлеевские поверхностные волны [3], [4], [13].

4. ЭНЕРГИЯ КОЛЕБАНИЙ ПОЛУОГРАНИЧЕННОЙ РЕШЕТКИ, ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ С ДВУМЕРНЫМ ГАЗОМ ПРИПОВЕРХНОСТНЫХ ГОРЯЧИХ ЭЛЕКТРОНОВ

Функция распределения электронов в двумерном слое с толщиной $d \lesssim l$, лежащем вблизи поверхности на расстоянии $z_0 \lesssim l$, может быть записана в виде

$$|\psi(z)|^2 = \delta(z). \quad (23)$$

После интегрирования выражений (12), (13) по dz_1 и dz_2 с функцией $|\psi(z_{1,2})|^2$ из (23) величина $\Delta\mathcal{D}^{-+}$ зависит от функций $\mathcal{D}_{\alpha\gamma}^{R,A}(\omega, \mathbf{q}, z, z_1)$ и $\mathcal{D}_{\delta\beta}^{R,A}(\omega, \mathbf{q}, z_2, z)$ при $z_1 = z_2 = 0$. Заметим теперь, что эти функции входят в $\Delta\mathcal{D}^{-+}$ в виде характерных произведений

$$\begin{aligned} \sum_{\gamma, \delta} \hat{q}_\gamma \hat{q}_\delta \mathcal{D}_{\alpha\gamma}^n \mathcal{D}_{\delta\beta}^k &= \left(q d_{xx}^n + i \frac{\partial d_{xz}^n}{\partial z_1} \right) \left(q d_{xx}^k + i \frac{\partial d_{xz}^k}{\partial z_2} \right) - \\ &- \left(q d_{zx}^n + i \frac{\partial d_{zz}^n}{\partial z_1} \right) \left(q d_{zx}^k + i \frac{\partial d_{zz}^k}{\partial z_2} \right), \end{aligned} \quad (24)$$

где $d_{\alpha\beta}^n = d_{\alpha\beta}^n(\omega, q, z, z_1)$, $d_{\alpha\beta}^k = d_{\alpha\beta}^k(\omega, q, z, z_2)$ с $n, k = R, A$. При выводе (24) использовалось преобразование, обратное (17), и свойство функций $d_{\alpha\beta}(\omega, q, z, z_1)$ относительно перестановок α, β и z, z_1 (19). Выражения (24) при $z_1 = z_2 = 0$ можно значительно упростить, если воспользоваться следующими соотношениями [13]:

$$\begin{aligned} q \left[1 - 2 \left(\frac{c_t}{c_l} \right)^2 \right] d_{xx}(\omega, q, z, 0) + i \frac{\partial}{\partial z_1} d_{xz}(\omega, q, z, z_1) \Big|_{z_1=0} &= 0, \\ q \left[1 - 2 \left(\frac{c_t}{c_l} \right)^2 \right] d_{zx}(\omega, q, z, 0) + i \frac{\partial}{\partial z_1} d_{zz}(\omega, q, z, z_1) \Big|_{z_1=0} &= 0. \end{aligned} \quad (25)$$

Отметим, что функции $d_{\alpha\beta}$ из работы [13], как и формулы (25), неприменимы при $(c_t/c_l)^2 = 1/2$. Такое предельно большое отношение скоростей c_t и c_l характеризует малореальные кристаллы с отсутствием поперечного сжатия при наличии продольного [3].

Теперь функция $\Delta \mathcal{D}^{-+}$, определяемая формулами (12), (13), с учетом связи функций $d_{\alpha\beta}^A$ с $d_{\alpha\beta}^R$ (22) и соотношений (24), (25) записывается в более компактной форме,

$$\Delta \tilde{\mathcal{D}}_v^{-+}(\omega, \mathbf{q}, z) = -\frac{2i\lambda^2 I_2}{(2\pi)^3 \rho} (n_e - n) \Delta_{vz}^0, \quad (26)$$

$$\Delta \overline{\mathcal{D}}_v^{-+}(\omega, \mathbf{q}, z) = -\frac{i\lambda^2}{(2\pi)^3 \rho} n (I_2 \Delta_{vz}^+ + I_1 \Delta_{vz}^-), \quad (27)$$

где Δ_{vz}^i – безразмерные функции с $i = 0, -, +$, равные при $\alpha = x, z$

$$\Delta_{vz}^0 = 4c_t^4 q^2 \sum_{\alpha} |d_{\alpha x, v}^R|^2, \quad (28)$$

$$\Delta_{vz}^{+, -} = 2c_t^4 q^2 \sum_{\alpha} (-1)^{\delta_{\alpha z}} [(d_{\alpha x, v}^R)^2 \pm (d_{\alpha x, v}^{R*})^2]. \quad (29)$$

Энергия $\Delta E = \Delta \tilde{E} + \Delta \overline{E}$, записанная с помощью формул (5), (6) и (26)–(29), принимает вид

$$\Delta \tilde{E} = \sum_v \Delta \tilde{E}^v = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \omega^3 [n_e(\omega) - n(\omega)] \sum_v A_v^+ \varphi_v^0(\omega), \quad (30)$$

$$\Delta \overline{E} = \sum_v \Delta \overline{E}^v = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \omega^3 n(\omega) \sum_v \sum_j A_v^j \varphi_v^j(\omega), \quad (31)$$

где $j = +, -, a$

$$A_v^+ = \frac{A_v^-}{\sqrt{2}} \left(\frac{mc_v^2}{\mu} \right)^{\frac{1}{2}}, \quad A_v^- = \frac{L_x L_y \lambda^2 m}{4\pi^3 \rho c_1^4 c_v}. \quad (32)$$

Функции φ_v^i в (30), (31), определенные через переменные

$$\zeta = \frac{qc_v}{\omega}, \quad (33)$$

имеют вид

$$\varphi_v^{0,+} = \int_a^b d\zeta \Delta_v^{0,+}(\zeta, \omega), \quad (34)$$

$$\varphi_v^- = -i \int_a^b d\zeta \zeta \Delta_v^-(\zeta, \omega), \quad (35)$$

где

$$a = \begin{cases} 0, & v = l, \\ \frac{c_t}{c_l}, & v = t, \\ \frac{c_R}{c_l}, & v = R, \end{cases} \quad b = \begin{cases} 1, & v = l, t, \\ \infty, & v = R. \end{cases}$$

Функции Δ_v^i в (34), (35) связаны с функциями (28) и (29) формулой

$$\Delta_v^i = \frac{\omega}{c_v} \int_0^L dz \Delta_{vz}^i(\omega, \zeta). \quad (36)$$

В переменных ζ зависимость Δ_v^i от ω определяется интегралом (см. (28), (29), (П.7)–(П.11))

$$\frac{\omega}{c_v} \int_0^L dz \exp \left[(\pm a_s - \beta_s) \frac{\zeta z \omega}{c_s} \right] = \begin{cases} \frac{c_s(\beta_s \mp i a_s)}{c_v \zeta (a_s^2 + \beta_s^2)}, & L = L_z, \\ \frac{L_z^0 \omega}{c_v}, & L = L_z^0, \end{cases} \quad (37)$$

где $a_s = \alpha_t \pm \alpha_l$, α_s при $s = l, t$. В (37) $L_z \gg c_s/\omega$, $L_z^0 \lesssim c_s/\omega$. Имея это в виду, можно показать, что при $L = L_z$

$$\varphi_v^0 = \varphi_v + \frac{\bar{\varphi}_s L_z \omega}{c_s}, \quad \frac{d\varphi_s^j}{d\omega} = 0, \quad (38)$$

где $d\varphi_s/d\omega = d\bar{\varphi}_s/d\omega = 0$. При $L = L_z^0$

$$\varphi_v^i = \frac{\bar{\varphi}_v^i L_z^0 \omega}{c_v}, \quad (39)$$

где $d\bar{\varphi}_s^i/d\omega = 0$. Функции φ_R , $\bar{\varphi}_R$, φ_R^i содержат ω только в знаменателе, о чем будет сказано в дальнейшем.

5. ЭНЕРГИЯ ОБЪЕМНЫХ КОЛЕБАНИЙ ПОЛУОГРАНИЧЕННОЙ РЕШЕТКИ С ГОРЯЧИМИ ЭЛЕКТРОНАМИ ВБЛИЗИ ЕЕ ПОВЕРХНОСТИ

Выделим из выражений (30) и (31) суммарную энергию объемных t - и l -волн ΔE^b . Перейдем в выражении для ΔE^b к интегрированию по положительным частотам, используя тождество

$$n(-\omega) \equiv -n(\omega) - 1. \quad (40)$$

После простых преобразований с учетом зависимости φ_s^j от ω в виде (38) получаем, что ΔE^b равна сумме энергий

$$\Delta \tilde{E}^b = 2 \int_0^\infty d\omega \omega^3 n_e(\omega) \sum_s A_s^+ \varphi_s, \quad (41)$$

$$\Delta E_T^b = 2 \int_0^\infty d\omega \omega^3 n(\omega) \sum_s A_s^- \varphi_s^-, \quad (42)$$

$$\Delta E_0^b = \int_0^\infty d\omega \omega^3 \sum_s A_s^- \varphi_s^-. \quad (43)$$

Переход к $\omega > 0$ позволил выделить из $\Delta \bar{E}^b$ энергию нулевых колебаний ΔE_0^b . В (41)–(43) учтено, что $c_t \ll c_l$. При этом условии все функции φ_s , $\bar{\varphi}_s$, φ_s^j и $\bar{\varphi}_s^i$ являются фактически числами. Принимая во внимание, что $A_s^+/A_s^- \sim (mc_s^2/\mu)^{1/2} \ll 1$, в (42), (43) опущены члены, пропорциональные $A_s^+ \varphi_s^+$. По этой же причине в $\Delta \tilde{E}^b$ не надо учитывать слагаемые $n A_s^+ \varphi_s$, поскольку они гораздо меньше слагаемых $n A_s^- \varphi_s^-$ из ΔE_T^b .

Выражения для φ_s , φ_s^- довольно громоздки. Естественно, что $\varphi_1, \varphi_1^- \rightarrow 0$ при $c_t/c_l \rightarrow 0$. Значения $\varphi_t \simeq 0.8$ и $\varphi_t^- \simeq 1$ получены в результате численных расчетов. При этом величина φ_t определялась главными членами в $\Delta_t \sim \sum_{\alpha} |a_{\alpha x, t}^1|^2$. При вычислении φ_t^- пришлось учитывать произведения коэффициентов $a_{\alpha x, t}^s$ со всеми значениями s, α . Из сказанного следует, что неравновесная энергия объемных фононов $\Delta \tilde{E}^b$ зависит только от затухающих продольных фононов с импульсами в интервале $\omega/c_l \leq q \leq \omega/c_t$. В формировании энергий ΔE_T^b и ΔE_0^b участвуют колебания обеих поляризаций с импульсами в том же интервале q . Подставив значения φ_t, φ_t^- в (41)–(43), получаем, что

$$\Delta \tilde{E}^b = \frac{2\pi}{45} L_x L_y \frac{A}{p_F c_l^3} T_e^4, \quad (44)$$

$$\Delta E_T^b = \frac{\pi}{30} L_x L_y \frac{A}{m c_t c_l^3} T^4, \quad (45)$$

$$\Delta E_0^b = \frac{1}{16\pi^3} L_x L_y \frac{A}{m c_t c_l^3} \Theta^4, \quad (46)$$

где $p_F = \sqrt{2m\mu}$ и

$$A = \frac{\lambda^2 m^2}{\rho c_l \hbar} \quad (47)$$

– безразмерный параметр.

Формулы (44)–(46) справедливы при условии $L_z \gg c_l/\omega$ – наибольшем параметре длины в согласии с (37), где $\omega \sim T_e, T$ и Θ , поскольку интегралы (41)–(43) набираются соответственно при указанных значениях частот.

Рассмотрим пленки с толщинами $L_z^0 \lesssim c_s/\omega$ с одной свободной поверхностью и другой, вполне проницаемой для фононов. Как уже упоминалось (см. (39)), в этом случае $\varphi_s^i \sim L_z^0 \omega / c_s$. В результате перехода к $\omega > 0$ в формулах (30) и (31) для ΔE^{b0} не равной нулю остается лишь энергия нулевых колебаний

$$\Delta E_0^{b0} = \frac{-1}{2\pi \cdot 10^2} L_x L_y L_z^0 \frac{A}{m c_t^2 c_l^3} \Theta^5. \quad (48)$$

Эта энергия сформирована волнами обеих поляризаций в том же интервале q , что и энергия больших образцов ΔE^b . Численные расчеты привели к значениям $\bar{\varphi}_t \simeq -0.1$. Таким образом, термодинамическая энергия пленок с толщинами $L_z^0 \lesssim c_s/T$ может определяться или энергией рэлеевских волн, зависящей от температуры, или энергией возбуждения горячих электронов.

6. НЕРАВНОВЕСНАЯ ЭНЕРГИЯ ПОВЕРХНОСТНЫХ ВОЛН

Энергия $\Delta E^R = \Delta \tilde{E}^R + \Delta \bar{E}^R$ определяется формулами (30)–(36) с $v = R$. Появление полюсов в функциях $d_{\alpha\beta, R}^R(\omega, q, z, z_1)$ свидетельствует о наличии поверхностных волн (R-фононов) с импульсами q в интервале $\omega/c_t \leq q \leq \infty$. Равенство нулю знаменателя этих функций (см. (П.9)–(П.11), [13]), а именно,

$$\eta_R = 4\beta_t \beta_l - \gamma^2 = 0, \quad (49)$$

совпадает с уравнением из работы [3], определяющим скорость рэлеевских волн c_R при $\omega = c_R q$. Представим знаменатель функции $d_{\alpha\beta,R}^R$ в виде, аналогичном знаменателю запаздывающей функции Грина объемных акустических фононов в неограниченном (двумерном) q -пространстве. Для этого разложим η_R в ряд по $[(c_R q)^2 - (\omega + i\delta)^2]/(c_R q)^2$ (в работе [13] функция Грина $d_{\alpha\beta,R}^{-1}$ уравнения (14) разложена в ряд по $(c_R q - \omega)/c_R q$). В переменных $\zeta = qc_R/\omega$ функция η_R имеет вид

$$\eta_R = R[\zeta^2 - (1 + i\delta\omega^{-1})^2]\zeta^{-2} = R\eta\zeta^{-2}, \quad (50)$$

где коэффициент

$$R = 2\left(\frac{c_R}{c_t}\right)^2 \left\{ \left[\left(\frac{c_R}{c_t}\right)^2 - 2 \right]^3 + 4 \left[\left(\frac{c_t}{c_l}\right)^2 - 2\left(\frac{c_R}{c_l}\right)^2 + 1 \right] \right\} \left[\left(\frac{c_R}{c_t}\right)^2 - 2 \right]^{-2}. \quad (51)$$

Перейдем в формулах (30), (31) для ΔE^R к интегрированию по $\omega > 0$. Для больших образцов с размерами $L_z \gg c_R/\omega$ функции φ_R^j , φ_R , $\bar{\varphi}_R$, согласно формулам (34), (35), (П.7)–(П.11), (28), (29), (38) и (50), содержат ω только в $\eta(\omega)$. Следовательно, φ_R , $\bar{\varphi}_R$, φ_R^+ – четные, а φ_R^- – нечетная функции ω . После соответствующих преобразований энергия рэлеевских волн становится равной сумме энергий

$$\Delta \tilde{E}^R = 2A_R^+ \int_0^\infty d\omega \omega^3 [n_e(\omega) - n(\omega)] \varphi_R(\omega), \quad (52)$$

$$\Delta E_T^R = 2A_R^+ \int_0^\infty d\omega \omega^3 n(\omega) \varphi_R^+(\omega), \quad (53)$$

$$\Delta E_0^R = \int_0^\Theta d\omega \omega^3 [A_R^+ \varphi_R^+ - A_R^- \varphi_R^-]. \quad (54)$$

Интегралы φ_R , φ_R^j могут быть приведены к виду

$$\begin{aligned} \varphi_R &= \frac{1}{R^2} \int_{-\infty}^\infty d\zeta \frac{f(\zeta)}{|\eta(\zeta)|^2}, \\ \varphi_R^+ &= \frac{1}{2R^2} \int_{-\infty}^\infty d\zeta f(\zeta) \left[\frac{1}{\eta^2(\zeta)} + \frac{1}{\eta^{*2}(\zeta)} \right], \\ \varphi_R^- &= -\frac{i}{2R^2} \int_0^\infty d\xi f(\xi) \left[\frac{1}{\eta^2(\xi)} - \frac{1}{\eta^{*2}(\xi)} \right], \end{aligned} \quad (55)$$

где $\xi = \zeta^2$, а $\eta(\zeta)$, $\eta(\xi)$ определяются формулой (50) при $\omega > 0$. В функциях $f(\zeta)$, $f(\xi)$ достаточно учесть главные члены, пропорциональные $|a_{zx,R}^t|^2 \beta_t^{-1}$, $(a_{zx,R}^t)^2 \beta_t^{-1} \sim \nu^{-1}$, где

$$\nu^2 = 1 - \left(\frac{c_R}{c_t} \right)^2 \ll 1. \quad (56)$$

В этом приближении

$$f(\zeta) = \frac{(2\zeta^2 - 1 + \nu^2)^2}{(\zeta^2 - 1 + \nu^2)^{\frac{1}{2}}}. \quad (57)$$

Дополнительная область интегрирования $-c_R/c_t \leq \zeta \leq c_R/c_t$, включенная в φ_R , φ_R^+ , и область $0 \leq \xi \leq (c_R/c_t)^2$, добавленная в φ_R^- (см. (34), (35)), не повлияют на величины φ_R , φ_R^j с полюсами, лежащими вне этих областей. В результате интегралы (55) могут быть вычислены стандартным способом с помощью теоремы о вычетах. Они равны

$$\varphi_R = \frac{\pi\omega}{R^2\delta}f(1) = \frac{\pi\omega}{R^2\nu\delta}, \quad \varphi_R^+ = 0, \quad \varphi_R^- = \frac{2\pi}{R^2} \frac{\partial f(\xi)}{\partial \xi} \Big|_{\xi=1} = \frac{\pi(8\nu^2 - 1)}{\nu^3 R^2}. \quad (58)$$

Как видно из (58), $\varphi_R \rightarrow \infty$ при $\delta \rightarrow 0$. Эта расходимость возникла в φ_R от интегрирования членов, содержащих в знаменателе $(\zeta \mp 1 \mp i\delta/\omega)(\zeta \mp 1 \pm i\delta/\omega)$. Как и в работе [8], она может быть устранена заменой δ на конечную величину $1/2\tau_R$. Физический смысл $\tau_R = \tau_R(q)$ – время жизни рэлеевских фононов в состоянии с импульсом $\mathbf{q}$. Величина $1/2\tau_R$ характеризует ширину спектра R-фононов. Степень зависимости $1/\tau_R$ от q^n , где n – целое число, определяется механизмами рассеяния R-фононов на каких-либо других частицах (например, примесях, шероховатостях поверхности, объемных фононах). Неравенство $\tau_R\omega \gg 1$ является условием существования R-волны в виде стационарной частицы [14]. Его выполнение позволяет использовать в φ_R функции $\tau_R(\zeta\omega/c_R)$ при $|\zeta| = 1$. В данной работе мы не будем конкретизировать вид τ_R . Выделим лишь из τ_R частоту ω по формуле

$$\tau_R(\omega/c_R) = \tau_R(\Theta)(\Theta/\omega)^n. \quad (59)$$

Подставив $1/2\tau_R$ из (59) вместо δ в φ_R и использовав φ_R , φ_R^j из (58) в формулах (52)–(54), получаем

$$\Delta \tilde{E}^R = \frac{\Gamma(5-n)\zeta(5-n)L_x L_y A}{\pi p_F R^2 c_1^3 \nu} \tau(\Theta) \Theta^n (T_e^{5-n} - T^{5-n}), \quad (60)$$

$$\Delta E_T^R = 0, \quad (61)$$

$$\Delta E_0^R = \frac{L_x L_y A (-8\nu + 1)}{16\pi^2 R^2 \nu^3 m c_R c_1^3} \Theta^4. \quad (62)$$

Здесь A определяется формулой (47), $\Gamma(k)$, $\zeta(k)$ – соответственно гамма- и дзета-функции. Степень n в $\Delta \tilde{E}^R$ ограничена неравенством $n < 4$. При $n \geq 4$ $\Delta \tilde{E}^R \rightarrow \infty$ и простая замена δ на $1/2\tau_R$ непригодна. Для обеспечения сходимости $\Delta \tilde{E}^R$ в этом случае требуется суммирование $1/\tau_R$ с шириной спектра, зависящей от q в степени $n < 4$, т.е. связанной с другим механизмом рассеяния R-волны [8].

В пленках с толщинами $L_z \lesssim c_R/\omega$ функции φ_R^i выражаются формулой (39), где $\bar{\varphi}_R^0$, $\bar{\varphi}_R^+$ – четные, а $\bar{\varphi}_R^-$ – нечетная функции ω . После перехода в формулах (30), (31) с $v = R$ к интегрированию по $\omega > 0$ с учетом тождества (40) получаем, что

$$\Delta \tilde{E}^{R0} = 0, \quad (63)$$

$$\Delta E_T^{R0} = \frac{2L_z^0 A_R^-}{c_R} \int_0^\infty d\omega \omega^4 n(\omega) \bar{\varphi}_R^-(\omega), \quad (64)$$

$$\Delta E_0^{R0} = \frac{L_z^0}{c_R} \int_0^\Theta d\omega \omega^4 [A_R^- \bar{\varphi}_R^- - A_R^+ \bar{\varphi}_R^+]. \quad (65)$$

Функции $\bar{\varphi}_R^j$, где $j = +, -$, могут быть записаны в виде (55) с заменой $f(\zeta)$ на

$$f_0 = (2\zeta^2 - 1 + \nu^2)^2. \quad (66)$$

Функции $f_0(\zeta)$ и $f_0(\xi = \zeta^2)$ при $c_R \lesssim c_t \ll c_l$ учитывают лишь главные члены в $\Delta_R^j \sim (a_{zx})^2 \beta_t^2 \sim 1$. Интегралы $\bar{\varphi}_R^j$, вычисленные с помощью теоремы о вычетах, равны

$$\bar{\varphi}_R^+ = 0, \quad \bar{\varphi}_R^- = \frac{2\pi}{R^2} \frac{\partial f_0(\xi)}{\partial \xi} \Big|_{\xi=1} = \frac{4\pi}{R^2}. \quad (67)$$

Подставив (67) в (64), (65), получаем

$$\Delta E_T^{R0} = \frac{3 \cdot 2^4 L_x L_y L_z^0 A}{\pi^2 R^2 m c_R^2 c_l^3} T^5, \quad (68)$$

$$\Delta E_0^{R0} = \frac{L_x L_y L_z^0 A}{5\pi^2 R^2 m c_R^2 c_l^3} \Theta^5. \quad (69)$$

Энергию тонкой пленки ΔE_T^{R0} , представленную формулой (69), можно рассматривать как поправку к энергии свободных рэлеевских фононов в приповерхностном слое толщиной $z \lesssim c_R/T$. Равенство $\Delta \tilde{E}^{R0} = 0$ при $z \lesssim c_R/T_e$ означает, что рэлеевские фононы в этой области не нагреваются до температуры T_e . Поправки к энергии свободных нулевых рэлеевских колебаний существуют на любых расстояниях от поверхности. При этом $\Delta E_0^R \sim \Delta E_0^{R0}$, если $z \sim c_R/\nu\Theta$.

7. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Полная средняя энергия полуограниченного кристалла с приповерхностным слоем горячих электронов представляет собой сумму колебательной энергии решетки (5) и энергии слоя горячих электронов

$$E_{av,e} = E_{av} + \Delta E + E^e + \Delta E^e. \quad (70)$$

Здесь

$$E_{av} = \tilde{E}^b + \tilde{E}^R + E_0^b + E_0^R \quad (71)$$

— энергия свободных колебаний полуограниченной решетки. Эта энергия вычислена в [7] для образцов различной толщины и приведена ниже в приложении (формулы (П.13)–(П.16)). Энергия свободных электронов

$$E^e = \tilde{E}^e + E_0^e, \quad (72)$$

где $\tilde{E}^e$ — энергия возбуждения, а E_0^e — энергия вырождения этих электронов в двумерном слое. Она вычислена в приложении ((П.17), (П.18)). В (70) можно пренебречь ΔE^e — поправкой к E^e , поскольку обе эти энергии зависят от T_e . Полная средняя колебательная энергия полуограниченной решетки ΔE имеет вид

$$\Delta E = \Delta \tilde{E}^b + \Delta \tilde{E}^R + \Delta E_T^b + \Delta E_T^R + \Delta E_0^b + \Delta E_0^R. \quad (73)$$

Полученные для ΔE формулы верны при условии, что $\Delta E \ll E_{\text{ав}}$. При $T \ll T_e \ll \Theta$ в суммах (71) и (73) наибольшими являются энергии нулевых колебаний. Из формул (П.14), (П.16), (46), (48), (62) и (69) видно, что в толстых образцах $E_0^b \gg E_0^R$ и $|\Delta E_0^b| > \Delta E_0^R$, а в пленках $E_0^{R0} \gtrsim E_0^{b0}$ и $|\Delta E_0^{b0}| \gg \Delta E_0^{R0}$. Следовательно, условиями применимости формул ΔE , полученных в данной работе, являются неравенства

$$\frac{|\Delta E_0^b|}{E_0^b} \sim \frac{A}{mc_1 L_z} \left(\frac{c_t}{c_1} \right)^2 \ll 1, \quad \frac{|\Delta E_0^{b0}|}{E_0^{R0}} \sim \frac{AR\nu\Theta}{mc_t^2} \left(\frac{c_R}{c_1} \right)^3 \ll 1. \quad (74)$$

Эти неравенства хорошо выполняются при обычных значениях параметров задачи: $\lambda \sim 3 \cdot 10^{15} \text{ с}^{-1}$, $\rho \sim 1 \text{ г/см}^3$, $T \sim mc_1^2 \sim 10^{11} \text{ с}^{-1}$, $\Theta \sim \mu \sim 10^{13} \text{ с}^{-1}$ (с плотностью числа электронов $\rho_e \sim 3 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$ и $p_F \sim 4 \cdot 10^6 \text{ см}^{-1}$), $T_e \sim 10^{12} \text{ с}^{-1}$, $\tau_R(T_e)T_e \sim 10^2$, $c_1 \sim 3 \cdot 10^5 \text{ см/с}$, $c_t/c_1 \sim 0.3$, $c_R/c_t \sim 0.9$, $\nu \sim 0.4$, $R \sim 3$, $A \sim 3 \cdot 10^{-2}$.

Выделим теперь из энергии $E_{\text{ав},e}$ наибольшую, зависящую от температуры. Для образцов толщиной $L_z \gg c_1/T$ и при принятых значениях параметров выполняются неравенства $\tilde{E}^t \gg \tilde{E}^e \gg \tilde{E}^R$, $\Delta \tilde{E}^R \gg \Delta \tilde{E}^b \gg \Delta E_T^b$ (см. (П.13), (П.18), (44), (45), (60), (61)). Из этих соотношений следует, что наибольшими энергиями в суммах (71)–(73) являются $\tilde{E}^t$ и $\Delta \tilde{E}^R$. Их отношение равно

$$\frac{\Delta \tilde{E}^R}{\tilde{E}^t} \simeq \frac{L_R}{L_z}, \quad (75)$$

где $L_R = \bar{A}l_R T_e/T$, $l_R = \tau(T_e)c_R$, $\bar{A} = (A/R^2\nu)(T_e/p_F c_1)(T_e/T)^3(c_t/c_1)^2$. При принятых значениях параметров $\bar{A} \sim 1$, $c_1/T \sim 3 \cdot 10^{-6} \text{ см}$, $l_R \sim 10^{-5} \text{ см}$, $L_R \sim 10^{-4} \text{ см}$. Значения $L_z \sim L_R$ являются пороговыми. В образцах толщиной $L_z < L_R$ термодинамической энергией является неравновесная энергия рэлеевских волн $\Delta \tilde{E}^R$ (60). Если $L_z > L_R$, то термодинамическая энергия описывается формулой (П.13) для энергии свободных поперечных фононов $\tilde{E}^t$.

Рассмотрим пленки толщиной $L_z^0 \lesssim c_t/T$. В них $\Delta \tilde{E}^{b0}$, ΔE_T^{b0} , $\Delta \tilde{E}^{R0} = 0$ и, согласно (П.15), (П.18) и (69), $\tilde{E}^e \gg \tilde{E}^{t0} \sim \tilde{E}^{R0} \gg \Delta E_T^{R0}$. Из этих неравенств следует, что термодинамической энергией пленок толщиной $L_z^0 \lesssim c_t/T \sim 10^{-6} \text{ см}$ является $\tilde{E}^e$ – энергия возбуждения вырожденных электронов в двумерном газе (П.18).

8. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Итак, в работе получены условия, при которых термодинамическая энергия полуграниченных кристаллов с двумерным газом горячих электронов вблизи свободной поверхности определяется одним из трех видов энергии в зависимости от размера образца. Термодинамической энергией тонких пленок ($L_z^0 \lesssim c_t/T$) является энергия возбуждения свободных электронов $\tilde{E}^e \sim T_e^2$. В толстых пленках ($L_R \gtrsim L_z > c_t/T$) термодинамической энергией становится неравновесная энергия рэлеевских волн $\Delta \tilde{E}^R \sim T_e^5 \tau_R(T_e) \sim T_e^{5-n}$. Эта энергия целиком обусловлена наличием свободной поверхности. Существенно, что она зависит от тепловой длины пробега рэлеевских фононов, нагретых горячими электронами, $l_R = \tau(T_e)c_R$. Термодинамическая энергия толстых образцов с тонким слоем горячих электронов определяется равновесной энергией свободных объемных фононов $\tilde{E}^b \sim T^4$. Отметим, что в случае равномерного распределения горячих

электронов по всему объему большого образца его термодинамическая энергия определяется неравновесной энергией объемных фононов $\sim T_e^5 \tau_b(T_e) \neq \Delta \tilde{E}^R(T_e)$ [8]. Такое различие в зависимости термодинамической энергии кристаллов разного размера от температуры в значительной степени связана с характером распределения в них газа горячих электронов.

ПРИЛОЖЕНИЕ

А. Двумерный поляризационный оператор. Функции Келдыша свободных электронов удобно записать в виде [8]

$$\begin{aligned} G^{--}(\varepsilon, \mathbf{p}) &= [1 - n(\mathbf{p})]G^R(\varepsilon, \mathbf{p}) + n(\mathbf{p})G^A(\varepsilon, \mathbf{p}) = -[G^{++}(\varepsilon, \mathbf{p})]^*, \\ G^{+-}(\varepsilon, \mathbf{p}) &= 2[1 - n(\mathbf{p})] \operatorname{Im} G^R(\varepsilon, \mathbf{p}), \\ G^{-+}(\varepsilon, \mathbf{p}) &= -2n(\mathbf{p}) \operatorname{Im} G^R(\varepsilon, \mathbf{p}), \end{aligned} \quad (\text{П.1})$$

$$G^R(\varepsilon, \mathbf{p}) = (\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{p}} + \mu + i\delta)^{-1} = [G^A(\varepsilon, \mathbf{p})]^*, \quad (\text{П.2})$$

где $\mathbf{p} = (p_x, p_y)$, $\varepsilon_{\mathbf{p}} = \mathbf{p}^2/2m$, m – масса электрона. В (П.1) распределение Ферми

$$n(\mathbf{p}) = \left[\exp\left(\frac{\varepsilon_{\mathbf{p}} - \mu}{T_e}\right) + 1 \right]^{-1} \quad (\text{П.3})$$

умножается на $\operatorname{Im} G^{R,A} = \mp \pi \delta(\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{p}} + \mu)$. Поэтому, в отличие от распределения Планка $n(\omega)$ (см. (4)), в (П.1) $n(\varepsilon) = n(\mathbf{p})$.

Вычислим поляризационные части $\Pi^{ij}(\omega, \mathbf{q})$, проинтегрировав (10) вначале по $d\varepsilon$ с помощью теоремы о вычетах [14]. Перед интегрированием по $d\mathbf{p}$ воспользуемся тождеством, справедливым при $\varepsilon_{\mathbf{p}} = \omega + \varepsilon_{\mathbf{p}-\mathbf{q}}$,

$$n_e(\omega) \equiv \frac{n(\mathbf{p})[1 - n(\mathbf{p})]}{n(\mathbf{p} - \mathbf{q}) - n(\mathbf{p})}. \quad (\text{П.4})$$

В результате получаем, что двумерные поляризационные части $\Pi^{ij}(\omega, \mathbf{q})$ имеют формально одинаковый вид с трехмерными [8], а именно,

$$\begin{aligned} \Pi^{--}(\omega, \mathbf{q}) &= iI_1 + (2n_e + 1)I_2 = -[\Pi^{++}(\omega, \mathbf{q})]^*, \\ \Pi^{+-}(\omega, \mathbf{q}) &= 2(n_e + 1)I_2, \\ \Pi^{-+}(\omega, \mathbf{q}) &= 2n_e I_2. \end{aligned} \quad (\text{П.5})$$

Двумерные интегралы I_1 и I_2 в $2p_F$ раз меньше соответствующих трехмерных и даются выражениями

$$\begin{aligned} I_1 &= 2\pi \oint d\mathbf{p} \frac{n(\mathbf{p} - \mathbf{q}) - n(\mathbf{p})}{\omega + \varepsilon_{\mathbf{p}-\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{p}}} = -4\pi^2 m, \\ I_2 &= 2\pi^2 \int d\mathbf{p} [n(\mathbf{p} - \mathbf{q}) - n(\mathbf{p})] \delta(\omega + \varepsilon_{\mathbf{p}-\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{p}}) = \frac{4\pi^2 m^2 \omega}{p_F q} \end{aligned} \quad (\text{П.6})$$

при $\mu > T_e$, когда электроны вырождены.

Б. Запаздывающие функции Грина уравнений движения упругих колебаний полугораниченной решетки. Решениями уравнений движения (14) с учетом запаздывания во времени в ω , $\mathbf{q}$, z -представлении являются функции Грина $d_{\alpha\beta}(\omega, q, z, z_1)$, вычисленные в работе [13], при замене в них ω на $\omega + i\delta$. Запаздывающие функции Грина $d_{\alpha\beta}^R(\omega, q, z, z_1)$ с $\beta = x$ и $z_1 = 0$, используемые в этой работе, имеют вид

$$d_{\alpha x, v}^R(\omega, q, z, 0) = -\frac{2\alpha_v^t \gamma}{c_t^2 q \eta_v} \sum_{s=t, l} \exp(-\alpha_v^s z q) a_{\alpha x, v}^s, \quad (\text{П.7})$$

где

$$a_{xx, v}^t = \frac{1}{2}, \quad a_{xx, v}^l = \frac{1}{\gamma}, \quad a_{zx, v}^t = \frac{i}{2\alpha_v^t}, \quad a_{zx, v}^l = \frac{i\alpha_v^l}{\gamma}, \quad (\text{П.8})$$

$$\eta_v = 4\varepsilon_v - \gamma^2, \quad \varepsilon_v = \alpha_v^l \alpha_v^t, \quad \gamma = \alpha_t^2 - 1, \quad (\text{П.9})$$

$$\alpha_v^t = \begin{cases} -i\alpha_t, & v = l, t, \\ \beta_t, & v = R, \end{cases} \quad \alpha_v^l = \begin{cases} -i\alpha_l, & v = l, \\ \beta_l, & v = t, R, \end{cases} \quad (\text{П.10})$$

$$\alpha_s = \left[\left(\frac{\omega + i\delta}{c_s q} \right)^2 - 1 \right]^{\frac{1}{2}}, \quad \beta_s = \left(1 - \frac{\omega}{c_s q} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (\text{П.11})$$

Условия затухания $d_{\alpha x, v}^R$ при $z \rightarrow \infty$ (затем $\delta \rightarrow 0$) определяются неравенствами

$$|\operatorname{Re} i\alpha_s q z| \gg 1, \quad \beta_s q z \gg 1. \quad (\text{П.12})$$

В. Полная средняя энергия колебаний полугораниченной решетки. Средняя энергия полугораниченной решетки $E_{av} = E^b + E^R$, вычисленная в работе [7], при $L_z \gg c_l/T$ определяется формулами

$$\tilde{E}^b = \frac{\pi^2}{30} L_x L_y L_z \left(\frac{2}{c_t^3} + \frac{1}{c_l^3} \right) T^4, \quad \tilde{E}^R \simeq \frac{\pi}{10R\nu^2 c_R^2} L_x L_y T^3, \quad (\text{П.13})$$

$$E_0^b = \frac{1}{16\pi^2} L_x L_y L_z \left(\frac{2}{c_t^3} + \frac{1}{c_l^3} \right) \Theta^4, \quad E_0^R \simeq \frac{1}{12\pi R\nu^2 c_R^2} L_x L_y \Theta^3. \quad (\text{П.14})$$

Выражения для $\tilde{E}^b$, E_0^b совпадают с классическими из книги [1].

Энергия пленок толщиной $L_z^0 \lesssim c_t/T$ имеет вид

$$\tilde{E}^{b0} = \frac{\pi^2}{10c_t^3} L_x L_y L_z^0 T^4, \quad \tilde{E}^{R0} \simeq \frac{\pi^3}{30R\nu c_R^3} L_x L_y L_z^0 T^4, \quad (\text{П.15})$$

$$E_0^{b0} = \frac{3}{16\pi^2 c_t^3} L_x L_y L_z^0 \Theta^4, \quad E_0^{R0} \simeq \frac{1}{16\pi R\nu c_R^3} L_x L_y L_z^0 \Theta^4. \quad (\text{П.16})$$

Энергия E_{av} в [7] вычислялась по формуле (5) с $\mathcal{D}_{\alpha\beta}^{-+}(\omega, \mathbf{q}, z, z_1)$ в виде (7). При этом использовалось преобразование (17) и функции $d_{\alpha\beta}(\omega, q, z, z_1)$ из работы [13] при $z_1 = z$. Энергии E^R и E^{b0} волн здесь приведены при $c_t/c_l \ll 1$.

Г. Полная средняя энергия двумерного слоя электронного газа. Средняя энергия свободных электронов, распределенных в слое, параллельном поверхности, согласно определениям из работ [11], [14], [7], [8] задается соотношением

$$E^e = -\frac{2iL_xL_y}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{p} \frac{p^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \int_0^L dz |\psi(z)|^2 G^{-+}(\varepsilon, \mathbf{p}). \quad (\text{П.17})$$

Здесь функция $G^{-+}(\varepsilon, \mathbf{p})$ определяется формулами (П.1), (П.2), а распределение электронов $|\psi(z)|^2$ в двумерном слое вблизи поверхности – формулой (23). Энергия E^e в (П.17) распадается на энергию возбуждения $\tilde{E}^e$ и энергию вырождения E_0^e ,

$$\tilde{E}^e = \frac{\pi}{6} L_x L_y m T_e^2, \quad E_0^e = \frac{2}{\pi} L_x L_y m \mu^2 \quad (\text{П.18})$$

при $\mu > T_e$, когда электроны вырождены.

Благодарности. В заключение выражаю свою признательность И. Б. Левинсону за предложенную тему исследования и полезные советы. Я также благодарна А. С. Простеневу за внимание и помощь в работе. Эта работа поддерживалась Российским фондом фундаментальных исследований (проект № 99-03-32101).

Список литературы

- [1] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. Статистическая физика. Ч. 1. М.: Наука, 1976.
- [2] В. Л. Бонч-Бруевич, С. Г. Калашиников. Физика полупроводников. М.: Наука, 1977.
- [3] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. Теория упругости. М.: Наука, 1987.
- [4] W. Rayleigh. London. Math. Soc. Proc. 1887. V. 17. P. 4.
- [5] V. Dupuis, R. Maro, L. Onsager. Journ. Chem. Phys. 1960. V. 33. P. 1452.
- [6] А. Марадудин. Дефекты и колебательный спектр в кристаллах. М.: Мир, 1968.
- [7] Л. А. Зайцева. Хим. физика. 2000. Т. 19. С. 3.
- [8] Л. А. Зайцева. ТМФ. 1998. Т. 115. С. 289.
- [9] М. И. Каганов, И. М. Лифшиц, Л. В. Танатаров. ЖЭТФ. 1956. Т. 31. С. 232.
- [10] С. М. Бадалян, И. Б. Левинсон. ФТТ. 1988. Т. 30. С. 2764.
- [11] Л. В. Келдыш. ЖЭТФ. 1964. Т. 47. С. 1515.
- [12] Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский. Физическая кинетика. М.: Наука, 1979.
- [13] A. A. Maradudin, D. L. Mills. Annals of Physics. 1976. V. 100. P. 262.
- [14] А. А. Абрикосов, Л. П. Горьков, И. Е. Дзялошинский. Методы квантовой теории поля в статистической физике. М.: Наука, 1962.

Поступила в редакцию 1.XII.2000 г.