УДК 538.913—405

КВАЗИБАЛЛИСТИЧЕСКОЕ РАСПРОСТРАНЕНИЕ РЕЗОНАНСНЫХ ФОНОНОВ В СРЕДЕ С ДВУХУРОВНЕВЫМИ ЦЕНТРАМИ РАССЕЯНИЯ

К. Л. Аминов

Развивается теория пленения резонансных фононов в среде, содержащей двухуровневые центры рассеяния с сильным взаимодействием между центрами, альтернативная известной теории Бибермана—Холстейна пленения резонансного излучения в газах. Получены оценки для времени пленения. Сравнение результатов настоящей работы и теории Бибермана—Холстейна показывает, что существенную роль играет учет конечной скорости распространения фононов.

Взаимодействие фононов в твердом теле с двухуровневыми центрами рассеяния приводит к пленению резонансных фононов, т. е. их пространственное распространение замедляется за счет многократного рассеяния на центрах. Характер пленения существенно зависит от того, имеется ли взаимодействие между центрами или им можно пренебречь. В случае изолированных центров, подробно рассмотренном в [1, 2], ситуацию можно качественно обрисовать следующим образом: центр «помнит» условия своего возбуждения и после поглощения фонона излучает его на той же частоте. Для описания неравновесного состояния системы вводится спектральная плотность возбужденных центров; можно получить уравнение переноса для спектральной плотности, которое будет диффузионным с зависящим от частоты коэффициентом диффузии в случае изотропного рассеяния [1, 2]. Уравнение описывает нелокальный процесс, если учесть анизотропию рассеяния [3, 4]. Взаимодействие между центрами приводит к перераспределению энергии поглощаемого фонона между ними, и если скорость поперечной релаксации существенно превышает скорость продольной, система центров «забывает» условия своего возбуждения и частота излучаемого фонона не коррелирует с частотой поглощаемого. Это соответствует механизму Бибермана—Холстейна [5, 6] пленения резонансного излучения. Такая ситуация характерна для парамагнитных систем, где сильное диполь-дипольное взаимодействие между парамагнитными центрами приводит к тому, что неравновесное состояние системы центров может быть описано всего двумя параметрами — зеемановской температурой и температурой диполь-дипольного резервуара [7]. При переизлучении на крыльях резонансной линии увеличивается длина свободного пробега фононов и основной уход энергии из возбужденного объема происходит через крылья (эффект самообращения линии). Соответствующий процесс переноса является нелокальным.

В настоящей работе получено уравнение переноса энергии резонансного возбуждения на гидродинамической стадии процесса в среде, в которой действует механизм пленения Бибермана—Холстейна. Уравнение переноса описывает независимое затухание гидродинамических мод. Асимптотическое поведение постоянной затухания при малых волновых векторах позволяет получить оценки для времени пленения. Сравнение с теорией Бибермана—Холстейна показывает, что существенным оказывается учет эффектов запаздывания.

1. Уравнение переноса

Введем для описания неравновесной подсистемы двухуровневых центров параметр $N(r, t)$ — отклонение концентрации центров, находящихся на верхнем уровне, от равновесной. Фононную подсистему будем описывать параметрами $n_{qs}(r, t)$ — отклонениями чисел заполнения моды qs от равновесного значения. Тогда, считая отклонения от равновесия малыми в линейном приближении, можно записать

$$\frac{\partial N}{\partial t} = -\frac{1}{\tau} N + \sum_s \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \frac{n_{qs}}{\tau_{qs}}, \tag{1}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} n_{qs} + \mathbf{v}_{qs} \nabla n_{qs} = -\frac{1}{\tau_{qs}} \left(n_{qs} - \frac{\langle \tau_{ph} \rangle}{\tau} \frac{1}{\rho_0} N \right), \tag{2}$$

где τ — время жизни электронного возбуждения; τ_{qs} — время жизни фонона моды qs; $\mathbf{v}_{qs}$ — групповая скорость фонона моды qs; $\rho_0 = \sum_s \int d^3q/(2\pi)^3$ — плотность решеточных состояний в единице объема; $\langle \tau_{ph} \rangle$ — среднее время жизни фононов, определяемое соотношением

$$\langle \tau_{ph} \rangle^{-1} = \frac{1}{\rho_0} \sum_s \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \frac{1}{\tau_{qs}}. \tag{3}$$

Уравнения (1), (2) описывают процесс многократного рассеяния фононов на центрах, в котором отсутствует корреляция между поглощаемым и излучаемым фононами, что соответствует механизму пленения Бибермана—Холстейна.

Полная концентрация возбуждений $J = N + \sum_s \int n_{qs} d^3q/(2\pi)^3$ является интегралом движения и удовлетворяет уравнению

$$\frac{\partial}{\partial t} J + \operatorname{div} Q = 0, \tag{4}$$

где $\mathbf{Q} = \sum_s \int \mathbf{v}_{qs} n_{qs} d^3q/(2\pi)^3$ — поток возбуждений.

С помощью пространственного Фурье-преобразования уравнения (1), (2) приводятся к виду

$$\frac{\partial}{\partial t} N(k, t) = -\frac{1}{\tau} N(k, t) + \sum_s \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \frac{n_{qs}(k, t)}{\tau_{qs}}, \tag{5}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} n_{qs}(k, t) + i\mathbf{k}\mathbf{v}_{qs} n_{qs}(k, t) = -\frac{1}{\tau_{qs}} \left(n_{qs}(k, t) - \frac{\langle \tau_{ph} \rangle}{\tau} \frac{1}{\rho_0} N(k, t) \right). \tag{6}$$

Из (5), (6) видно, что моды с различными k являются независимыми. Будем искать решение системы (5), (6) в виде $N(k, t) = N(k) \exp(-\lambda t)$, $n_{qs}(k, t) = n_{qs}(k) \exp(-\lambda t)$. Нетривиальное решение существует, если λ удовлетворяет уравнению

$$\lambda + \frac{1}{\rho_0} \sum_s \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \frac{\langle \tau_{ph} \rangle}{\tau} \frac{\lambda - i\mathbf{k}\mathbf{v}_{qs}}{1 + (i\mathbf{k}\mathbf{v}_{qs} - \lambda)\tau_{qs}} = 0. \tag{7}$$

Значение $k=0$ соответствует пространственно-однородному состоянию. В этом случае $\lambda=0$ удовлетворяет уравнению (7), следовательно, существует равновесное состояние, в котором

$$N(0) = \tau \sum_s \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \frac{n_{qs}(0)}{\tau_{qs}}. \tag{8}$$

При $t \to \infty$ система релаксирует к этому состоянию. Хотя время релаксации фононов с частотами, далекими от резонансной, формально может быть сколь угодно большим, это не влияет на установление равновесия в системе центров, поскольку, как видно из (8), вклад таких фононов в $N(0)$ мал. Следовательно, можно считать, что система центров и резонансных фононов с $\tau_{qs} \sim \langle\tau_{ph}\rangle$ приходит к равновесному состоянию за время $t \geqslant \tau, \langle\tau_{ph}\rangle$.

Рассмотрим далее пространственно-неоднородную систему, когда характерный размер пространственных неоднородностей L существенно превышает длину свободного пробега резонансных фононов $L \gg v\langle\tau_{ph}\rangle$. За время $t > \tau, \langle\tau_{ph}\rangle$ происходит установление локального равновесия между центрами и резонансными фононами. Однако это состояние не является стационарным и на следующей, так называемой гидродинамической стадии процесса происходит выравнивание плотности возбуждений в различных областях. Скорость гидродинамической релаксации определяется функцией $\lambda(k)$, удовлетворяющей уравнению (7), причем $\lambda(k) \to 0$ при $k \to 0$. Считая, что $\lambda \ll kv$, из (7) получим

$$\lambda(k) = \sum_s \int d^3q \frac{\tau_{qs}^{-1}(\mathbf{kv}_{qs})^2}{\tau_{qs}^{-2} + (\mathbf{kv}_{qs})^2} \left(\sum_s \int d^3q \left[\frac{\tau}{\tau_{qs}} + \frac{1}{1 + (\mathbf{kv}_{qs}\tau_{qs})^2}\right]\right)^{-1}. \tag{9}$$

Уравнение переноса для концентрации возбужденных центров можно теперь записать в виде

$$\frac{\partial}{\partial t} N(k, t) + \lambda(k) N(k, t) = 0. \tag{10}$$

Это уравнение справедливо на временах $t \gg L/v$, где $L \sim 1/k$ — масштаб пространственных неоднородностей. Кроме того, длина свободного пробега резонансных фононов должна быть мала в масштабе пространственных неоднородностей, иначе невозможно установление локального равновесия между центрами и резонансными фононами, это дает второе условие применимости уравнения (10): $L \gg v\langle\tau_{ph}\rangle$.

После достижения локального равновесия связь между фононами и центрами определяется соотношением

$$n_{qs}(k, t) \simeq (1 + i\mathbf{kv}_{qs}\tau_{qs})^{-1} \frac{\langle\tau_{ph}\rangle}{\tau} \frac{1}{\rho_0} N(k, t), \tag{11}$$

Для пространственного Фурье-образа потока $\mathbf{Q}(k, t)$ получаем (см. (4))

$$\mathbf{Q}(k, t) \simeq -i \frac{\langle\tau_{ph}\rangle}{\tau} \frac{1}{\rho_0} \sum_s \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \frac{\tau_{qs}^{-1}\mathbf{kv}_{qs}\mathbf{v}_{qs}}{\tau_{qs}^{-2} + (\mathbf{kv}_{qs})^2} N(k, t). \tag{12}$$

Основной вклад в поток (12) дают фононы с $\tau_{qs} \sim (kv)^{-1}$. Это означает, что, хотя установление локального равновесия определяется резонансными фононами, перенос возбуждения происходит через крылья резонансной линии (упоминавшийся выше эффект самообращения линии).

Характер процесса переноса определяется асимптотическим поведением $\lambda(k)$ при малых k. К примеру, диффузионная асимптотика подразумевает $\lambda(k) \simeq Dk^2$. Уход возбуждений через крылья является более быстрым, чем диффузионный, нелокальным процессом. В приближении Дебая, считая для простоты, что с центрами взаимодействует лишь одна фононная мода, получаем

$$\tau_q^{-1} = \gamma\varphi(\omega_q - \omega_0), \quad \omega_q = vq, \tag{13), (14}$$

где γ — затухание эффективной фононной моды в центре линии; v — скорость звука; $\varphi(\omega - \omega_0)$ — резонансная форма линии, нормированная таким образом, что $\varphi(0) = 1$, ω_0 — резонансная частота. Ширину линии Δ определим соотношением

$$\Delta = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(\varepsilon)\, d\varepsilon. \tag{15}$$

Считая, что $\Delta \ll \omega_0$, из (9) получим

$$\lambda(k) \simeq \gamma J_1(k)/J_2(k), \tag{16}$$

где

$$J_1(k) = \int_{-1}^{1} dx \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \frac{\varphi(\varepsilon)(\alpha x)^2}{\varphi(\varepsilon)^2 + (\alpha x)^2}, \quad J_2(k) = \int_{-1}^{1} dx \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \frac{\varphi(\varepsilon)^2}{\varphi(\varepsilon)^2 + (\alpha x)^2}. \tag{17), (18}$$

Здесь $\alpha = kv/\gamma$. Ниже мы приведем асимптотические значения коэффициента переноса $\lambda(k)$ для конкретных примеров.

2. Время пленения

Рассмотрим конкретные примеры. Для лоренцевой линии $\varphi(\varepsilon) = \Delta^2/(\Delta^2 + (\pi\varepsilon)^2)$. При малых k для интегралов (17), (18) можно получить следующие асимптотические выражения:

$$J_1(k) \simeq (4/3\sqrt{2})\,\Delta\sqrt{\alpha}, \quad J_2(k) \simeq (2\sqrt{2})\,\Delta\sqrt{\alpha}. \tag{19), (20}$$

Соответствующее выражение для коэффициента переноса (16) имеет вид

$$\lambda(k) \simeq (1/3)\, kv. \tag{21}$$

Из (21) следует, что возбуждение распространяется баллистически, т. е. $L \sim t$. Следует, однако, помнить, что приведенный вывод справедлив при временах $t \gg L/v$.

Рассмотрим также гауссову форму линии $\varphi(\varepsilon) = \exp(-\pi\varepsilon^2/\Delta^2)$. При малых k для гауссовой линии

$$J_1(k) \simeq (\sqrt{\pi}/2)\,\Delta\alpha/\sqrt{\ln(1/\alpha)}, \quad J_2(k) \simeq (4/\sqrt{\pi})\,\Delta\sqrt{\ln(1/\alpha)},$$
$$\lambda(k) \simeq (\pi/8)\, kv/\ln(\gamma/kv). \tag{22)—(24}$$

Такая асимптотика для $\lambda(k)$ соответствует более медленному процессу, чем баллистический, так как при выводе подразумевалось, что $kv \ll \gamma$.

Выражения (21), (24) позволяют оценить время пленения резонансных фононов в объеме с размерами порядка L. Для лоренцевой линии время пленения

$$t_п \sim 3L/v, \tag{25}$$

для гауссовой линии время пленения

$$t_п \sim (8L/v)\ln(L/v). \tag{26}$$

Если для лоренцевой линии $t_п$ порядка времени баллистического ухода фононов $t_б \sim L/v$, то для гауссовой линии $t_п \gg t_б$. Однако в малых интервалах изменения L зависимость $t_п$ от L мало отличается от линейной, что опять позволяет говорить о квазибаллистическом распространении.

3. Сравнение с теорией Бибермана—Холстейна

Как указывается в [1], уравнение Бибермана—Холстейна, записываемое для концентрации возбужденных центров, может быть получено из (1), (2), если в (2) пренебречь временно́й производной от чисел заполнения фононов. Это соответствует тому, что мы пренебрегаем эффектами запаздывания, что, по-видимому, допустимо для фотонов. Для сравнения с нашей теорией получим уравнение типа (10), пренебрегая запаздыванием. Так как мы пренебрегаем эффектами запаздывания, предполагается, что выражение (11) следует рассматривать как точное равенство, т. е. система фононов мгновенно приходит в равновесие с системой центров. Подставляя (11) в (5), получаем искомое уравнение

$$\frac{\partial}{\partial t} N(k, t) + B(k) N(k, t) = 0, \tag{27}$$

где

$$B(k) = \frac{\langle \tau_{ph} \rangle}{\tau} \frac{1}{\rho_0} \sum_s \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \frac{\tau_{qs}^{-1} (\mathbf{kv}_{qs})^2}{\tau_{qs}^{-2} + (\mathbf{kv}_{qs})^2}. \tag{28}$$

Выражение для $B(k)$ можно также записать в виде

$$B(k) = \left(\sum_s \int d^3 q \frac{\tau_{qs}^{-1} (\mathbf{kv}_{qs})^2}{\tau_{qs}^{-2} + (\mathbf{kv}_{qs})^2} \right) \left(\sum_s \int d^3 q \frac{\tau}{\tau_{qs}} \right)^{-1}. \tag{29}$$

Используя снова изотропное приближение (13), (14), получим

$$B(k) \simeq J_1(k) / 2\tau\Delta, \tag{30}$$

где $J_1(k)$ определяется выражением (17).

Выражение (30) отличается от выражения (16) отсутствием знаменателя, расходящегося при $k \to 0$. Таким образом, учет или пренебрежение эффектами запаздывания приводит к принципиально различным результатам.

Оценим на основании (30) время пленения резонансного возбуждения. Для лоренцевой линии

$$t_{\text{п}} \sim (3/\sqrt{2}) \tau \sqrt{(\gamma L/v)}, \tag{31}$$

для гауссовой линии

$$t_{\text{п}} \sim (4/\sqrt{\pi}) \tau (\gamma L/v) \sqrt{\ln(\gamma L/v)}. \tag{32}$$

Выражения (31), (32) с точностью до численного множителя совпадают с соответствующими выражениями для времени пленения, приведенными в [2]. Сравнение (31), (32) с выражениями (25), (26) показывает, что учет эффектов запаздывания имеет принципиальное значение.

4. Многоуровневая система

Изложенный выше подход можно применить и к многоуровневой системе, если выполнены следующие условия: взаимодействия между центрами достаточно сильные, чтобы в системе установилось локальное равновесие, описываемое единственным параметром. Иными словами, скорость переходов между различными уровнями центров, затухание фононов и скорость поперечной релаксации должны превышать скорость пространственного ухода возбуждений. Очевидно, что если в этих условиях имеется единственный закон сохранения, то это закон сохранения энергии. В линейном приближении, т. е. считая, что относительные отклонения чисел заполнения фононов и заселенностей уровней центров малы, для времен, превышающих время установления локального равновесия, можно получить следующее уравнение переноса:

$$\frac{\partial}{\partial t} \Xi(k, t) + A(k) \Xi(k, t) = 0, \tag{33}$$

где $\Xi(k, t)$ — зависящий от времени пространственный Фурье-образ отклонения температуры от равновесного значения,

$$A(k) = \frac{\frac{1}{\rho_0} \sum_s \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} c_{qs} \frac{\tau_{qs}^{-1} (\mathbf{kv}_{qs})^2}{\tau_{qs}^{-2} + (kv_{qs})^2}}{c_{el} + \frac{1}{\rho_0} \sum_s \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \frac{c_{qs}}{1 + (\mathbf{kv}_{qs} \tau_{qs})^2}}. \tag{34}$$

Здесь $c_{qs} = (\partial/\partial T)\, \hbar\omega_{qs} \{\exp(\hbar\omega_{qs}/kT) - 1\}^{-1}$ — теплоемкость фононной моды qs; $c_{el} = (\partial/\partial T) \sum_{\alpha} E_\alpha \exp(-E_\alpha/kT) \Big/ \sum_{\gamma} \exp(-E_\gamma/kT)$ — теплоемкость системы центров.

Выражение (34), записанное для двухуровневой системы, совпадает с соответствующим выражением (9), полученным выше. Необходимо отметить, что введенная температура не является температурой в общепринятом смысле этого слова, поскольку локальное равновесие устанавливается лишь в системе центров и резонансных фононов, т. е. тех фононов, у которых длина свободного пробега, ограниченная резонансным рассеянием на центрах, не превышает размеров пространственных неоднородностей неравновесного состояния.

В заключение автор выражает благодарность Б. З. Малкину за обсуждение работы и ряд ценных замечаний.

Список литературы

[1] Левинсон И. Б. // ЖЭТФ. 1978. Т. 75. N 1. С. 234—248.
[2] Малышев В. А., Шехтман В. Л. // ФТТ. 1978. Т. 20. № 10. С. 2915—2928.
[3] Малышев В. А., Шехтман В. Л. // Опт. и спектр. 1979. Т. 46. № 4. С. 800—808.
[4] Аминов К. Л., Малкин Б. З. // Письма в ЖЭТФ. 1988. Т. 48. № 9. С. 508—510.
[5] Holstein T. // Phys. Rev. 1947. V. 72. N 12. P. 1212—1233.
[6] Биберман Л. Н. // ЖЭТФ. 1947. Т. 17. № 5. С. 416—426.
[7] Альтшулер С. А., Валишев Р. М., Кочелаев Б. И., Хасанов А. Х. // ЖЭТФ. 1972. Т. 62. № 3. С. 639—652.

Казанский государственный университет
им. В. И. Ульянова-Ленина

Поступило в Редакцию
9 августа 1989 г.
В окончательной редакции
5 января 1990 г.