

УДК 536.201

## ВРЕМЕНА РЕЛАКСАЦИИ НИЗКОЧАСТОТНЫХ ФОНОНОВ С ПЕРЕБРОСОМ ИМПУЛЬСА

Л. А. Зайцева, И. Б. Левинсон

Вычислены времена релаксации фононной функции распределения из-за рассеяния мягкого фонона на жестком с перебросом импульса жесткого фонона ( $U$ -процесс). Показано, что при низких температурах обратное время релаксации может быть представлено в виде суммы членов с различными степенями частоты мягкого фонона и температуры. Ряд возник от интегрирования вблизи высокосимметричных точек на поверхности зоны Бриллюэна. Члены ряда обязательно зависят от составляющих волнового вектора мягкого фонона, параллельных наименьшим векторам трансляций рассматриваемых решеток. Члены этого ряда со степенями частоты не выше второй обуславливают, например, конечную теплопроводность примесных диэлектриков. Расчеты проводились на примере веществ с кубическими решетками.

При низких температурах перенос тепла может осуществляться с учетом рассеяния фононов с перебросом импульса ( $U$ -процессов). В этом случае при вычислении, например, коэффициентов теплопроводности необходимо знать зависимость времени  $U$ -рассеяния фононов  $\tau_U^{-1} \sim \omega^a T^b \exp \times (-\Theta/cT)$  от  $\omega$  и  $T$  ( $\Theta$  — температура Дебая). Достоверных сведений о числах  $a$ ,  $b$  и  $c$  до сих пор не имелось.

Трудности при вычислении времен релаксации в  $U$ -процессах связаны с необходимостью учитывать конфигурацию поверхности зон Бриллюэна различных веществ и характер спектров фононов вблизи этой поверхности.

Определим  $\tau_U$  как время, за которое фононная функция распределения релаксирует к равновесной за счет трехфононных  $U$ -столкновений. Из закона сохранения квазиимпульса

$$\mathbf{q} + \mathbf{q}' - \mathbf{q}'' = n\mathbf{g} \quad (1)$$

( $\mathbf{g}$  — векторы трансляций в обратном пространстве) следует, что импульсы жестких фононов, участвующих в  $U$ -процессах,  $q', q'' \sim g/2$ , если  $q \ll q', q''$  (рис. 1). Энергии фононов с такими импульсами  $\omega' = \omega(\mathbf{q}')$  и  $\omega'' = \omega(\mathbf{q}'')$  оказываются порядка  $\omega_0$  — энергии на границе зоны Бриллюэна. Из соотношения  $\omega = sq \ll \omega', \omega''$  ( $s$  — скорость звука) вытекает, что при трехфононных столкновениях энергетически возможны лишь процессы присоединения, когда  $\omega + \omega' \rightarrow \omega''$ . Для таких процессов при  $T \ll \omega_0 \ll \Theta$  время релаксации  $\tau_U$  имеет вид [1, 2]

$$\tau_U^{-1}(\omega, T) = \frac{\omega^2}{T} \beta \int d\mathbf{q}' \sum_{\mathbf{q}''} \delta_{\mathbf{q}+\mathbf{q}', \mathbf{q}''+\mathbf{g}} e^{-\omega'/T} \delta(\omega + \omega' - \omega''). \quad (2)$$

Здесь  $\omega\beta/(2\pi)^3$  — квадрат матричного элемента трехфононного взаимодействия. В нем учтено, что один фонон из трех — длинноволновый, а  $q' \sim q'' \sim g/2$ . Коэффициент  $\beta$  при этом усреднен по углам между направлениями атомных связей и направлениями волновых, а также поляризационных векторов [2]. Энергия жесткого фонона  $\omega'' = \omega(\mathbf{q}'' + \mathbf{q})$  в согласии с (1) и поскольку  $\omega(\mathbf{q}'') = \omega(\mathbf{q}'' - \mathbf{g})$ . Функции распределения жестких фононов считаются планковскими. Символ Кронекера в (2) учитывает (1) и

ограничивает для  $U$ -процессов область интегрирования малой частью первой зоны Бриллюэна.

Очевидно, что наибольший вклад в  $\tau_{\bar{v}}^{-1} \sim \exp(-\omega'/T)$  вносят фононы с наименьшей частотой  $\omega' \sim \omega_0$ . Из экспериментов известно [3], что на поверхности зоны Бриллюэна имеются высокосимметричные точки, где энергии  $\omega_0$  очень близки. Практически совпадают энергии в точках  $X$  и  $M$  у CsI и некоторых других веществ группы  $O_h^1$ . Для большинства веществ вклад в  $\tau_{\bar{v}}^{-1}$  от точек с большей энергией оказывается всего на один-два порядка меньше вклада от точки, где энергия наименьшая (при  $T \sim 10$  К). Поправки к  $\tau_{\bar{v}}^{-1}$  за счет четырехфононных взаимодействий гораздо меньше (порядок их малости при  $T \ll \Theta, \Theta/Mz^2$ , где  $M$  — масса элементарной ячейки [1]). Важным доводом в пользу учета точек с разумно большими

Рис. 1. Расположение квазиимпульсов в процессах переброса.

$\omega_0$  является иная (отличная от точки с наименьшей энергией), зависимость их вкладов в  $\tau_{\bar{v}}^{-1}$  от степени и направления импульса мягкого фонона  $q$ . В ряду  $\tau_{\bar{v}}^{-1}$  члены  $\sim \omega^a$ , где  $a \leq 2$ , несмотря на малость, обусловят, например, конечную теплопроводность примесных диэлектриков.

Можно показать, используя непрерывность энергии вдоль поверхности зоны Бриллюэна, что при интегрировании в (2) достаточно учета областей

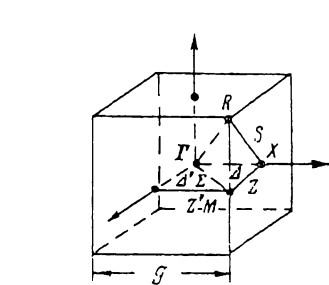


Рис. 2. Зона Бриллюэна для решеток с группой симметрии  $O_h^1$ .

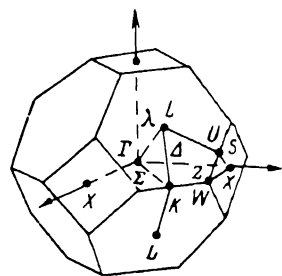


Рис. 3. Зона Бриллюэна для решеток с группами симметрии  $T_d^2, O_h^2, O_h^3$ .

вблизи точек высокой симметрии. Спектры в окрестностях таких точек являются разложениями по переменным с началами в этих точках. Они идентичны спектрам электронов, вычисленных без учета спина кр-методом с применением теории групп [4]. В настоящей работе рассматриваются вещества с кубическими решетками, зоны Бриллюэна которых представляют собой или простой куб (пространственная группа симметрии  $O_h^1$  (рис. 2) или усеченный октаэдр (пространственные группы  $T_d^2, O_h^2, O_h^3$  (рис. 3)).

### 1. Области пересечения изоэнергетических поверхностей вблизи границ зон Бриллюэна

Составляющие вектора  $q''$  на перпендикуляр к плоской границе зоны Бриллюэна в  $U$ -процессах имеют противоположный знак по отношению к такой составляющей вектора  $q'$  (рис. 1). Вследствие этого закон сохранения (1) для перпендикулярных составляющих квазиимпульсов имеет вид

$$q_{\perp} + q'_{\perp} + q''_{\perp} = g, \quad (3)$$

где  $g$  — величина наименьшего вектора трансляций в обратном пространстве. По определению, самыми малыми векторами являются базисные векторы обратных решеток. Расстояние  $g_{GL}$  на рис. 3 равно половине величины наименьшего вектора трансляций обратной равноценноцентриро-

ванной решетки. Второй по величине вектор трансляций этой решетки совпадает с наименьшим вектором трансляций простой кубической решетки, т. е. с ее базисным вектором. Расстояние  $g_{\perp}$  на рис. 2, 3 равно половине величины этого вектора.

Составляющие квазиимпульсов фононов, параллельным границам зон Бриллюэна, подчиняются уравнениям

$$q_j + q'_j - q''_j = 0. \quad (4)$$

Перейдем от переменных  $q'$  с началом в центре зоны к переменным  $p$ , привязанным к точкам на ее поверхности (см. рис. 1, где  $p$  имеет, например, начала в точках  $M$  и  $X$ ). Тогда соотношение (3), переписанное для составляющих

$$p_{\perp} = \frac{1}{2}g - q'_{\perp} \quad (5)$$

с учетом определения границы зон Бриллюэна для переменных  $q'_{\perp}, q''_{\perp} \leq g/2$ , приводит к следующим пределам интегрирования по  $p_{\perp}$  в (2)

$$0 \leq p_{\perp} \leq q_{\perp}. \quad (6)$$

Отсюда следует, что для  $U$ -процессов характерна малая величина  $q_{\perp}$  в качестве по крайней мере одного из верхних пределов интегрирования в (2).

Продольные составляющие вектора  $p$  могут быть определены в зависимости от положения точки на поверхности зоны Бриллюэна как

$$p_j = q'_j \quad (7)$$

или в виде

$$p_j = g_j - q'_j. \quad (8)$$

Здесь  $g_j \leq g/2$  — расстояние в направлении  $j$  вдоль поверхности зоны между рассматриваемой точкой и точкой с координатой (7). Так, расстояния  $g_j$  в отсутствие случайных экстремумов в направлениях  $j$  связывают угловые точки  $R$  и  $W$  с точками на середине ребер  $M, K, U$ , для которых  $p_j = q'_j$ . В свою очередь точки  $M, K, U$  в направлениях, перпендикулярных ребрам, отстоят на соответствующие  $g_k$  от точек в центре плоскостей  $X, L$ , у которых обе продольные координаты определяются формулой (7). При этом для точек  $W, K (U), L$  система координат с началом в центре зоны, изображенная на рис. 3, должна быть переориентирована для совмещения одной оси координат с осью  $\Lambda$ , а другой с направлением  $LK (U)$ . Расстояние  $g_j = g/2$  только для точек  $M$  и  $R$  в кубической зоне Бриллюэна.

Области существования двух высокосимметричных спектров с разностью энергий  $\delta\omega$  смыкаются на расстоянии  $p_j^0 = g_j^0/2$ . Именно при сдвиге на  $p_j^0$  квадратичный спектр переходит в линейный, свойственный точке общего положения. Условием перехода является  $2Bp_j^0 = v$ , где  $B = \delta\omega/g_j^2$ , а  $v = \delta\omega/g_j$  — коэффициенты при квадратичном и линейном членах спектров.

Таким образом, координата  $p_j^0$ , определяемая (7), ограничена

$$-p_j^0 \leq p_j \leq p_j^0, \quad (9)$$

а для  $p_j^0$  из (8) получаем с учетом (4) и условия  $q''_j \leq q_j$

$$q_j \leq p_j \leq p_j^0. \quad (10)$$

Покажем, как с помощью простого приема выделить существенные области интегрирования в (2) вблизи высокосимметричных точек  $X, M, R$  и  $L, X, K, U, W$  зон Бриллюэна на рис. 3. Закон сохранения энергии в (2) предполагает, что поверхности постоянной энергии в  $q'$ -пространстве, определяемые уравнениями  $\omega' = \omega (q') = \text{const}$ , должны пересекаться

с изоэнергетическими поверхностями  $\omega'' = \omega(\mathbf{q}' + \mathbf{q}) = \text{const}$ . В  $U$ -процессах, согласно закону сохранения квазиимпульса (1), (3), (4), такое пересечение возможно, если импульсы  $\mathbf{q}'$  и  $\mathbf{q}''$  принадлежат соседним зонам Бриллюэна (рис. 1). Область интегрирования внутри одной зоны (для  $\mathbf{q}'$ ) с учетом ограничения (6) легче себе представить, если центр этой зоны сместить на величину и по направлению вектора  $\mathbf{q}$ .

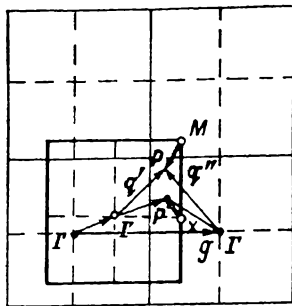


Рис. 4. Сечение кубической зоны Бриллюэна, перпендикулярное оси 4-го порядка  $\Delta$ .

На рис. 4 заштрихованы сечения областей интегрирования вблизи точки  $X$  объемом  $q_i p_j p_k^0$ . В случае интегрирования вблизи точки  $M$ , лежащей в середине ребра кубической зоны, изоэнергетическая поверхность  $\omega' = \omega(\mathbf{p})$  пересекается с тремя изоэнергетическими поверхностями  $\omega'' = \omega(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ , находящимися соответственно в трех примыкающих к  $M$  зонах (рис. 4). Интегрирование в (2) для  $\tau v^{-1}$  в этом случае естественно развивается на три части: две по областям с размерами  $\sim q_i p_j^0 p_k^0$  и одну  $\sim q_i q_j p_k^0$ . Интегрирование вблизи угловых точек связано с разбиением интеграла (2) на еще большее число частей. Так, точка  $R$  — вершина кубической зоны Бриллюэна — соседствует с семью зонами. Сдвиг зоны  $\mathbf{q}'$  в сторону своих соседей на вектор  $\mathbf{q}$  вырежет вблизи  $R$  семь областей: одну с объемом  $q_i q_j q_k$  и по три с объемами  $q_i q_j p_k^0$  и  $q_i p_j^0 p_k^0$ .

В октаэдрической зоне Бриллюэна к точкам  $K$  или  $U$  на середине ребра примыкают две соседние зоны, к угловой точке  $W$  — три. При этом плоские границы такой зоны наклонены друг к другу не под прямым углом. Но и в этом случае можно сохранить разбиение интеграла (2) на части, характерные для точек  $M$  и  $R$  и пределы интегрирования в виде (6), (9), (10).

## 2. Фононные спектры

в центрах плоских границ зон Бриллюэна и зависящие от них времена релаксации с перебросом импульса

Приведем дисперсионные формулы в высокосимметричных точках рассматриваемых зон. Какие члены имеются в разложениях энергий  $\omega(\mathbf{p})$  по степеням  $\mathbf{p}$  в этих точках, предопределяет теория групп [4-6]. Однако величина констант в этих разложениях и знаки перед ними находятся из сравнения с экспериментальными дисперсионными кривыми (например, из [3]). В одной и той же точке зоны Бриллюэна могут осуществляться различные представления в зависимости от пространственной группы кристаллов ( $T_d^2$ ,  $O_h^5$  или  $O_h^1$ ). Представления могут оказаться разной размерности для различных веществ с одной и той же пространственной группой симметрии. Эксперимент помогает найти размерность представления в высокосимметричных точках по степени вырожденности энергий в них, принимая во внимание условия совместности с представлениями в соседних точках. Спектр в точке  $L$  с низшей  $\omega_0^L$  вырожден [3] и для всех кристаллов с октаэдрической зоной Бриллюэна имеет вид [4]

$$\omega_{L_3} = \omega_0^L - A p_{\perp}^2 + \text{sign}(\omega_0^K - \omega_0^L) B p_{\perp}^2 \pm |C| p_{\perp} p_{\parallel}. \quad (11)$$

Здесь индекс  $L_3$  обозначает двумерное представление, по какому преобразуются нормальные колебания в  $L$ . Знак  $\text{sign}(\omega_0^K - \omega_0^L)$  внесен в (11) в соответствии с экспериментами [3] (для веществ группы  $O_h^5$  с  $\omega_0^K \leq \omega_0^L < \omega_0^L$  перед  $B$  надо поставить знак минус (см.  $\text{PbTe}$  в [3]). Переменная  $p_{\perp} = \sqrt{p_x^2 + p_y^2}$  лежит в шестиугольной плоскости зоны Бриллюэна,  $p_{\parallel} = p_z$  направлена по оси  $\Delta$  (рис. 3).

Изменение спектров при переходе от кристаллов с группой  $T_d^2$  к веществам с группами  $O_h^5$  и  $O_h^7$  происходит только в диагональных направлениях четырехугольной плоской границы зоны Бриллюэна [4]. Так, представлению  $X_5$  в точке  $X$  для кристаллов с группами  $T_d^2$ ,  $O_h^5$  (а также  $O_h^1$ ) соответствует энергия [4]

$$\omega_{X_5} = \omega_0^X - A p_{\perp}^2 + \frac{1}{2} (B + C) p_{\parallel}^2 \pm \sqrt{\frac{1}{4} (B - C)^2 (p_j^2 - p_k^2)^2 + D^2 p_j^2 p_k^2}. \quad (12)$$

Для кристаллов  $O_h^1$  возможен невырожденный спектр в  $X$  [3, 4] с низкой  $\omega_0$

$$\omega_{X_r} = \omega_0^X - A p_{\perp}^2 + B p_{\parallel}^2. \quad (13)$$

Здесь и далее индексом  $r$  обозначены одномерные представления.

Представлению  $X_3$  (двумерному) для кристаллов с несимморфной пространственной группой  $O_h^7$  отвечает спектр (12), где  $B = C$  [4]. В (12), (13) составляющая  $p_{\perp} = p_{\Delta}$  направлена вдоль оси  $\Delta$  — линии вырождения спектров  $\omega_{X_5}$ ,  $\omega_{X_3}$ ;  $p_j$ ,  $p_k$  лежат в четырехугольных плоскостях зон. Константы в разложениях (11)–(13) и других примерно одного порядка  $\sim 4\omega_0/g^2$ , несколько отличаясь для различных веществ. Выражение (2) для  $\tau_U(L, X)$ , где интегрирование ограничено областью вблизи центров плоских границ зон, может быть записано в виде

$$\tau_U^{-1}(L, X) = \beta \frac{\omega^2}{T} \int_0^{q_i} dp_i \int_{-p_j^0}^{p_j^0} dp_j \int_{-p_k^0}^{p_k^0} dp_k e^{-\omega'/T} \delta(\Delta\omega). \quad (14)$$

Здесь и в дальнейшем используется обозначение  $\Delta\omega = \omega + \omega(\mathbf{p}) + \omega(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ , а также все  $p_{j,k}^0$  выражены через величину базисных векторов обратной кубической решетки. Индексом  $i$  всюду обозначены составляющие векторов, перпендикулярных плоским границам зон Бриллюэна. В качестве пределов интегрирования для точек  $L, X$  следует взять величины

$$q_i = q_{\Delta}, \quad p_{j,k}^0 = \frac{1}{2} g_{LW} = p_L^0,$$

$$q_i = q_{\Delta}, \quad p_{j,k}^0 = \frac{1}{2} g_{XW} = p_S^0, \quad p_{j,k}^0 = \frac{1}{2} g_{XM} = p_T^0,$$

где  $p_L^0 = g/8$ ,  $p_S^0 = g/12$ ,  $p_T^0 = g/4$  (рис. 2 и 3).

Энергия  $\omega'' = \omega(\mathbf{p}'', \mathbf{q})$  выражается через переменные  $\mathbf{p}$  с помощью закона сохранения квазиимпульса (1). Составляющие вектора  $\mathbf{p}''$  связаны с соответствующими составляющими  $\mathbf{q}''$  соотношениями (6), (7) и (8), как и  $\mathbf{p}$  с  $\mathbf{q}'$ . Тогда с помощью равенств (3), (4) получаем, что

$$p_{\perp}'' = -p_{\perp} + q_{\perp}, \quad p_j'' = p_j + q_j \quad \text{или} \quad p_j'' = p_j - q_j. \quad (15)$$

Для точек  $L$  и  $X$  справедливы первые две формулы.

Разность энергий  $\Delta\omega$  для точки  $L$  имеет вид

$$\Delta\omega(L_3) \approx sq - 2 \operatorname{sign}(\omega_0^K - \omega_0^L) B (p_j q_j + p_k q_k) - 2C p_{\Delta} p_{\parallel} \approx sq \neq 0. \quad (16)$$

Действительно,  $p_{\Delta} \ll q_{\Delta}$ , а из условия корректности разложения (11)  $\omega_0^L \gg B p_{\parallel}^2$  следует, что  $p_{j,k} \ll g/2$ , поскольку  $B \sim 4\omega_0/g^2$ . Таким образом,  $\delta$ -образный закон сохранения энергии при трехфононном  $U$ -рассеянии вблизи  $L$  не выполняется. В этом случае следует учесть уширение энергетических уровней жестких фононов за счет нормальных процессов  $(2\tau_N)^{-1}$ . Следовательно, в (14) надо произвести замену

$$\delta(\Delta\omega) \rightarrow \frac{1}{\pi} \tau_N^{-1} [(\Delta\omega)^2 + \tau_N^{-2}]^{-1}. \quad (17)$$

При низких температурах самое короткое время  $\tau_N$  связано с процессами распада одного жесткого фонона на два. В этом случае  $\tau_N$  — константа, не зависящая от  $T$ . С учетом (17) и при выполнении неравенства  $\omega \gg \tau_N^{-1} \tau_U^{-1}(L)$  принимает вид

$$\tau_U^{-1}(L) \approx \beta \exp\left(-\frac{\omega_0^L}{T}\right) \frac{q_\Delta}{\tau_N B}. \quad (18)$$

Характерные импульсы, дающие основной вклад в этот интеграл,

$$\bar{p}_i = q_\Delta, \quad \bar{p}_{j,k} = \sqrt{T/B} \sim g \sqrt{T/\omega_0}.$$

Разности энергий  $\Delta\omega$  в точке  $X$  равны

$$\Delta\omega(X_5) \approx sq - \sqrt{(B-C)^2(p_j^2 - p_k^2)^2 + 4D^2 p_j^2 p_k^2}, \quad \Delta\omega(X_r) \approx sq. \quad (19)$$

Из (19) видно, что изоэнергетические поверхности у фононов с вырожденными энергиями пересекаются, т. е.  $\Delta\omega(X_{3,5})=0$  на расстояниях  $\bar{p}_{j,k} \sim \sqrt{qg}$  от линии вырождения. (Согласно терминологии Херринга [7], пересечение изоэнергетических поверхностей при трехфононном рассеянии, когда  $q \ll q', q''$ , происходит по типу касания именно на расстоянии  $\sim \sqrt{qg}$  от линии или точки вырождения). Принимая во внимание формулы (19), получаем, что вклады в  $\tau_U^{-1}(2)$  за счет  $U$ -рассеяния вблизи  $X$  равны

$$\tau_U^{-1}(X_5) \approx \beta \exp\left(-\frac{\omega^0}{T}\right) \frac{\omega^2 q_\Delta}{T \sqrt{(B-C)^2 + D^2}}, \quad (20)$$

$$\tau_U^{-1}(X_r) \approx \beta \exp\left(-\frac{\omega^0}{T}\right) \frac{q_\Delta}{\tau_N B}, \quad (21)$$

$\tau_U^{-1}(X_3)$  отличается от  $\tau_U^{-1}(X_5)$  медленно меняющимся множителем  $\ln(T/\omega)$ , в (21), как и в (20), характерные  $\bar{p}_\perp = q_\Delta$ , а  $\bar{p}_{j,k} \sim g \sqrt{T/\omega_0}$  в отличие от  $\tau_U^{-1}(X_3, X_5)$ .

### 3. Времена релаксации с перебросом импульса вблизи точек на середине ребер зон Бриллюэна

Рассмотрим высокосимметричные точки  $K, U, M$  на середине ребер зон на рис. 2 и 3.

Преобразования симметрии в эквивалентных точках  $K$  и  $U$ , где  $\omega_0^K \equiv \omega_0^U$ , описываются только одномерными представлениями  $K_r(U_r)$ . Группы направлений в  $K, U$  и  $\Sigma$  совпадают ( $C_3$  для  $T_d^2$  и  $C_{2v}$  для  $O_h^5, O_h^7$  [4]). Следовательно, спектр в  $K, U$  с учетом данных из [3, 4] имеет вид

$$\omega_{K,U} = \omega_0^K - \text{sign}(\omega_0^K - \omega_0^{L,K}) v p_k + A p_i^2 + B p_j^2. \quad (22)$$

В (2) составляющая  $p_y$  направлена вдоль ребра зоны  $WK$ , т. е. перпендикулярно зеркальной плоскости, в которой лежат две оси 3-го порядка — пространственные диагонали куба. Вследствие этого  $v_j = 0$ . Составляющая  $p_i = p_\perp$  перпендикулярна шестиугольной или четырехугольной плоскостям зоны Бриллюэна. Пара таких плоскостей, перпендикулярных оси 3-го порядка  $\Delta$  или 2-го порядка  $\Delta$ , разделены наименьшими векторами трансляций обратной объемноцентрированной решетки, и поэтому  $v_i = 0$ . Составляющие  $p_k$  лежат вдоль линий  $KL, UL, UX(S)$ . Групповая скорость  $v_k = v \neq 0$ , поскольку для этих направлений нет преобразований симметрии, обращающих  $v_k$  в нуль. Знак  $\text{sign}(\omega_0^K - \omega_0^{L,K})$  в (22) имеет ту же причину, что в формуле (11) для  $\omega_L(\mathbf{p})$ . Знаки перед  $B$  в (11)—(13) и  $v$  в (22) различны

(координаты точек  $K, U$  связаны с координатами  $p_k = q'_k$  точек  $L, X$  соотношением (8)).

Группа направлений в точках  $X$  и  $M$  одна и та же ( $D_{4h}$  [4]). Поэтому спектры в этих точках имеют одинаковый вид. Для точки  $M$  [3]

$$\omega_{M_r} = \omega_0^M + A p_j^2 + B p_i^2, \quad (23)$$

$$\omega_{M_s} = \omega_0^M + A p_j^2 + \frac{1}{2} (B + C) p_i^2 \pm \sqrt{\frac{1}{4} (B - C)^2 (p_i^2 - p_k^2)^2 + D^2 p_i^2 p_k^2}, \quad (24)$$

где  $p_j = p_T$  направлена по линии вырождения  $T$ , т. е. вдоль ребра кубической зоны,  $p_{i, k} = p_{x, z'}$  по направлениям  $z \perp \Delta$  и  $z' \perp \Delta'$  (рис. 2),  $p_{ii} = \sqrt{p_i^2 + p_k^2}$ .

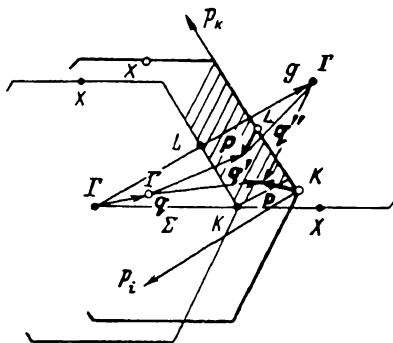


Рис. 5. Область в сечении октаэдрической зоны Бриллюэна, перпендикулярном оси 2-го порядка  $\Sigma$  вблизи точки  $K$

В соответствии с правилами (6), (9), (10) для записи пределов интегрирования в (2) для точек на середине ребер имеем

$$\tau_U^{-1}(M, K, U) = \beta \frac{\omega^2}{T} \int_{-p_j^0}^{p_j^0} dp_j \sum_{i \neq k}^{q_i} \int_{q_k}^{p_k^0} dp_i \left( \int_{q_k}^{p_k^0} dp_k e^{-\omega'' T \delta(\Delta\omega_i)} + \frac{1}{2} \int_0^{q_k} dp_k e^{-\omega'' T \delta(\Delta\omega_{i,k})} \right). \quad (25)$$

Пределы интегрирования в (25) для точки  $M$  (рис. 2) есть

$$q_{\perp} = q_{i, k} = q_{\Delta}, \quad p_{j, k}^0 = p_T^0.$$

Для точек  $K, U$  имеем предельные импульсы, равные

$$q_{\perp} = q_{i, k} = q_{\Delta}, \quad q_{\Delta} \text{ (так как } q_{\Delta} \perp q_{KL} \perp q_{WK}, \text{ а } q_{\Delta} \perp q_{UX} \perp q_{WU}), \\ p_k^0 = \frac{1}{2} g_{KLL} \approx p_L^0 \text{ или } p_k^0 = g_{UX} = p_S^0 \text{ и } p_j^0 = \frac{1}{2} g_{KWW} = p_S^0.$$

В (25) предполагается взаимная перпендикулярность направлений  $KL$  и  $UL$  с  $UX$  в точках  $K$  и  $U$ . Это предположение никак не скажется на первом интеграле в (24), поскольку он представляет собой сумму идентичных вкладов от интегрирования по независимым друг от друга областям с размерами  $p_j q_i p_k^0$  и  $p_j p_i^0 q_k$  (рис. 5). Второй интеграл в (25) для точек  $K, U$  записан в упрощенном виде. При этом предполагается, что во всей области интегрирования порядка  $p_j^0 q_i q_k$  рассеиваются фононы с  $\omega''$  только из одной из двух, примыкающих к точке  $K, U$  зон. Из дальнейшего будет видно, что этим интегралом можно пренебречь.

В точках  $M$  и  $K, U$ , согласно (15), в первом интеграле  $\omega'' = \omega(p_k - q_k, -p_i + q_i, p_j + q_j)$ , где для точек  $K, U$   $v'' = d\omega''/dp'' = v$ , а во втором  $\omega'' = \omega(-p_k + q_k, -p_i + q_i, p_j + q_j)$  с  $v'' = -v$  для точек  $K, U$ . Разности энергий в точке  $M$  равны

$$\Delta\omega_i(M_S) \approx sq - (B - C) p_i^2, \quad \Delta\omega_i(M_r) \approx \Delta\omega_{i,k}(M_r, M_S) \approx sq \neq 0. \quad (26)$$

Из этих формул видно, что рассеяние разрешено без учета  $\tau_N$  для фононов с вырожденной энергией (24) в областях, где  $\bar{p}_k \sim \sqrt{qg}$ ,  $\bar{p}_j \sim g\sqrt{T/\omega_0}$  и  $\bar{p}_i = q_\Delta$  (заштрихованы на рис. 4). Во втором интеграле (25) для тех же фононов с вырожденной энергией (24), а также во всем интеграле (25), если фононные энергии невырождены (23), надо использовать размытый закон сохранения энергии (17). В этих случаях характерные импульсы в (25)  $\bar{p}_{j,k} \sim g\sqrt{T/\omega_0}$ ,  $\bar{p}_{i,k} = q_\Delta, q_{\Delta'}$ . Таким образом,

$$\tau_U^{-1}(M_6) \approx \beta \exp\left(-\frac{\omega_0^M}{T}\right) \frac{1}{\sqrt{TA}} \left( \frac{\omega^{3/2}}{\sqrt{B-C}} \sum_{\Delta=2} q_i + q_\Delta q_{\Delta'} \frac{1}{\tau_N} \right), \quad (27)$$

$$\tau_U^{-1}(M_7) \approx \beta \exp\left(-\frac{\omega_0^M}{T}\right) \frac{1}{\tau_N \sqrt{AB}} \sum_{\Delta=2} q_i. \quad (28)$$

В этих формулах просуммированы обе составляющие  $q_\Delta \perp q_{\Delta'}$ , перпендикулярные плоскостям зоны ( $q_{\Delta'} \parallel q_Z, q_\Delta \parallel q_Z'$ , рис. 1). В (28) отброшен член, связанный со вторым интегралом (25). Порядок его малости  $\omega/\sqrt{T\omega_0}$ , а зависимость от  $q_\Delta$  выше. Малый второй член в (27) содержит  $q$  в более низкой степени (из-за  $\Delta\omega_{ik} \neq 0$ ), чем первый. Поэтому его надо сохранить.

Разность энергии в точках  $K, U$  имеет вид

$$\Delta\omega_i(K, U) = \Delta\omega_{ik}(K, U) \approx sq - \text{sign}(\omega_0^K - \omega_0^{L,K}) vq_k. \quad (29)$$

Из этой формулы следует, что рассеяние вблизи точек  $K, U$  без учета  $\tau_N$  в общем случае запрещено, и  $\tau_U^{-1}(K)$  есть

$$\tau_U^{-1}(K) \approx \beta \exp\left(-\frac{\omega_0^K}{T}\right) \frac{1}{\tau_N \sqrt{TB}} \bar{p}_k \sum_{\Delta=2} q_i, \quad (30)$$

где при  $[\omega_0^K < \omega_0^L]$  (для веществ с  $O_h^5$ )  $\bar{p}_k = T/v$ , а при  $\omega_0^K > \omega_0^L$   $\bar{p}_k = \frac{p_L^0}{v}$ . Другие характерные импульсы в (25) для этого случая  $\bar{p}_j \sim g\sqrt{T/\omega_0}$ ,  $\bar{p}_i = q_\Delta$ . В сумму из (30) входят составляющие  $q_\Delta, q_{\Delta'}$ , параллельные осям  $\Lambda, \Lambda'$ .

Согласно [3],  $\omega_0^K \leq \omega_0^L$ , поэтому при интегрировании в (25) вблизи четырехугольной плоскости зоны на расстоянии  $p_k > q_k$  от точки  $U$  характерные  $\bar{p}_k = p_s^0$ . При интегрировании вдоль шестиугольной плоскости  $\bar{p}_k$  определяется, как и для точки  $K$ . Поэтому

$$\tau_U^{-1}(U) \approx \beta \exp\left(-\frac{\omega_0^K}{T}\right) \frac{1}{\tau_N \sqrt{TB}} (p_s^0 q_\Delta + \bar{p}_k q_\Delta). \quad (31)$$

Поправки к  $\tau_U^{-1}(K, U)$  за счет вторых членов в (25) малы в отношении  $\omega/T$  или  $q/p_s^0, L$  и могут быть отброшены.

#### 4. Времена релаксации за счет $U$ -рассеяния вблизи угловых точек $W$ и $R$

Спектры в точке  $W$ , согласно теории групп [6], невырождены в кристаллах  $T_d^2$ , вырождены в веществах с группой  $O_h^7$  и как вырождены, так и невырождены в кристаллах  $O_h^5$ . Дисперсионные формулы имеют вид

$$\omega_{W_r} = \omega_0^W - Ap_1^2 - Bp_1^2, \quad (32)$$

$$\omega_{W_s} = \omega_0^W \pm Ap_1^2 \pm Bp_1^2, \quad (33)$$

где  $W_r$  обозначают одномерные представления для групп  $T_d^2$  и  $O_h^5$ , а  $W_s$  — двумерные для групп  $O_h^5$  и  $O_h^7$  [6]. В формулах (32), (33)  $p_{11} = \sqrt{p_j^2 + p_k^2}$ ,



где  $p_j, p_k$  лежат вдоль четырехугольной или шестиугольной плоскостей зоны, а  $p_{\perp} = p_{\Delta}$  или  $p_{\Lambda}$ .

В точке  $R$  возможны лишь трехмерные представления ( $R'_{15}$  или  $R'_{25}$ ), так как, согласно [3], энергия вдоль оси  $\Lambda$  расщепляется на две ветви, одна из которых дважды вырождена. Для представления  $R'_{15}$  в [4] приведены разложения  $\omega(\mathbf{p})$  в направлениях  $\Lambda$  или  $T$  (рис. 2) в виде

$$\omega_{R'_{15}} = \omega_0^R - (A \pm B) p^2, \quad (34)$$

где для  $\Lambda$ -направления:  $p_i = p_j = p_k = p/\sqrt{3}$ , а для  $T$ :  $p_k = p, p_j = p_i = 0$ . Для  $S$ -направления  $\omega(\mathbf{p})$ , где  $p_k = p_j = p/\sqrt{2}, p_i = 0$ ,

$$\omega_{R'_{15}} = \omega_0^R - (A \pm B) p^2, \quad \omega_{R'_{15}} = \omega_0^R - C p^2. \quad (35)$$

Знания спектра в таком виде достаточно для вычисления  $\tau_U^{-1}(R)$ .

С учетом замечаний к формуле (25) для  $\tau_U^{-1}(K, U)$ , относящихся и к  $\tau_U^{-1}(W)$ , общее выражение для вкладов в  $\tau_U^{-1}$  за счет угловых точек может быть записано как

$$\begin{aligned} \tau_U^{-1}(R, W) = & \beta \frac{\omega^2}{T} \sum_{i \neq j \neq k \neq 0}^{q_i} \int d p_i \left\{ \int_{q_i}^{p_j^0} d p_j \int_{q_k}^{p_k^0} d p_k e^{-\frac{\omega'}{T}} \delta(\Delta \omega_i) + \right. \\ & \left. + \int_0^{q_i} d p_i \left[ \int_{q_k}^{p_k^0} d p_k e^{-\frac{\omega'}{T}} \delta(\Delta \omega_{ij}) + \frac{1}{3} \int_0^{q_k} d p_k e^{-\frac{\omega'}{T}} \delta(\Delta \omega_{ijk}) \right] \right\}. \quad (36) \end{aligned}$$

В этом выражении для точки  $W$  пределы  $q_{\perp} = q_{i,j,k} = q_{\Delta}, q_{\Lambda}, p_{j,k}^0 = = g_{WV}/2 = p_S^0$ . Для точки  $R$  величины  $q_{\perp} = q_T \parallel q_{\Delta}, p_{j,k}^0 = p_T^0$ . В  $\omega'$  и  $\Delta \omega$  пренебрежем для обеих точек членами с  $p_{\perp} \leq q_{\perp}$ . Тогда

$$\Delta \omega_i(W_s) \approx sq - 2B p_{\parallel}^2, \quad \Delta \omega_{ij}(W_s) \approx sq - 2B p_k^2, \quad \Delta \omega_{ijk}(W_s) = \Delta \omega(W_r) = sq. \quad (37)$$

Для  $R$  в связи с оговоренными пренебрежениями можно использовать в первом интеграле (36) формулу (35) для  $\omega'$  в  $S$ -направлении, а во втором формулу (34) для  $\omega'$  в  $T$ -направлении,

$$\omega_{R'_{15}} \approx \omega_0^R - (A + B) p_{\parallel}^2, \quad \Delta \omega_i(R) \approx sq - 2B p_{\parallel}^2, \quad (38)$$

$$\omega_{R'_{15}} \approx \omega_0^R - (A + B) p_k^2, \quad \Delta \omega_{ij}(R) \approx sq - 2B p_k^2. \quad (39)$$

В последнем члене в (36)  $\Delta \omega_{ijk} \neq 0$  для обеих точек. Следовательно, там, а также всюду в (36) для точки  $W$  с невырожденной энергией (32) надо заменить  $\delta(\Delta \omega)$  на  $(\pi \omega^2 \tau_U)^{-1}$ . В результате получаем

$$\tau_U^{-1}(W_r) \approx \beta \exp\left(-\frac{\omega_0^W}{T}\right) \frac{1}{\tau_N T} (p_S^0)^2 \sum_{\Delta=2, \Delta=1} q_i. \quad (40)$$

$$\tau_U^{-1}(W_s) \approx \beta \exp\left(-\frac{\omega_0^W}{T}\right) \frac{\omega^2}{TB} \sum_{\Delta=2, \Delta=1} q_i. \quad (41)$$

$$\tau_U^{-1}(R) \approx \beta \exp\left(-\frac{\omega_0^R}{T}\right) \frac{\omega^2}{TB} \sum_{\Delta=3} q_i. \quad (42)$$

Характерные импульсы  $\bar{p}_{\perp} = q_{\Delta}, q_{\Lambda}$  в (40) и (41) и  $\bar{p}_{\perp} = q_{\Lambda}$  в (42). Продольные импульсы  $\bar{p}_{j,k} \sim \sqrt{qg}$  для (41) и (42) согласно (32). В (40)  $\bar{p}_{j,k} = = p_S^0 \approx g/12$ , так как невырожденная энергия (32) в точке  $W$  имеет максимум. (В  $K, U$  вдоль ребер имеются соответственно минимумы).

Поправки к (40) за счет второго члена малы в отношении  $q/p_s^0$ , а к (41) и (42) в отношении  $(\omega/\omega_0)^{1/2}$ . Отброшенные третьи члены в (40) малы, как  $(q/p_s^0)^2$ , а в (41) и (42), как  $(\tau_N \omega_0)^{-1}$ . Во всех отброшенных членах степень  $q_{\perp}$  выше или такая же, как и в первом.

## 5. Обсуждение результатов

Основной вклад в интегралы (36)  $\tau_{\bar{v}}^{-1}(W, R)$  и (25)  $\tau_{\bar{v}}^{-1}(M, K, U)$ , как и значения  $\tau_{\bar{v}}^{-1}(X, L)$  (14), набираются главным образом за счет интегрирования по областям вдоль плоских границ зон с объемами порядка  $q_{\perp} \bar{p}_j \bar{p}_k$ .

Выражения  $\tau_{\bar{v}}^{-1}$  во всех точках высокой симметрии содержат только составляющие  $q$ , параллельные наименьшим векторам трансляций. Эта особенность —  $\tau_{\bar{v}}^{-1} \sim q_{\Delta}$ ,  $q_{\Lambda}$  — следствие построения зон Бриллюэна из плоскостей, разделенных наименьшими векторами трансляций и перпендикулярных им.

Наименьшая линейная зависимость  $\tau_{\bar{v}}^{-1}$  от  $\omega$  возникает в тех точках, где  $U$ -рассеяние запрещено по энергиям без учета времени жизни жесткого фонона  $\tau_N$ .

Общие формулы для кристаллов с разными пространственными группами и для различных веществ с одной группой неодинаковы. В кристаллах  $T_d^2$   $\omega_0^2 < \omega_0^{X, K, W}$ , а нормальные колебания преобразуются по представлениям  $L_3$ ,  $X_5$ ,  $K_r$ ,  $U_r$  и  $W_r$  в соответствующих точках [3, 4, 6]. Ряд  $\tau_{\bar{v}}^{-1}(T_d^2)$ , следовательно, представляет собой сумму выражений (18), (20), (40), (30) и (31) с  $\bar{p}_k = \bar{p}_{s, L} \sim g/10$ . Представления в группе  $O_h^2$  те же, что и в группе  $T_d^2$ , кроме представлений в точке  $W$  [6, 7]. Для веществ с  $\omega_0 < \omega_0^{X, K, W}$  (соединения Li в [3]) и, если для них в точке  $W$  энергия невырождена, пригодны те же формулы, что и для  $\tau_{\bar{v}}^{-1}(T_d^2)$ . Если же в точке  $W$  нормальные колебания преобразуются по двумерному представлению  $W_5$ , то для  $\tau_{\bar{v}}^{-1}(O_h^2)$  надо использовать вместо (40) формулу (41). Наибольший вклад в эти ряды вносит член  $\tau_{\bar{v}}^{-1}(L) \sim \omega \exp(-\omega_0^2/T)$  (18).

У большинства веществ группы  $O_h^2$   $\omega_0^2 < \omega_0^{L, K, W}$ . В этом случае для  $\tau_{\bar{v}}^{-1}(K)$  и  $\tau_{\bar{v}}^{-1}(U)$  следует взять формулы (30) и (31) с  $\bar{p}_k = T/\nu$ . Остальные члены ряда состоят из (18), (20) и (40) или (41) в зависимости от вырождения энергии в точке  $W$ . Наибольший вклад в этом случае в  $\tau_{\bar{v}}^{-1}(O_h^2)$  вносит член  $\tau_{\bar{v}}^{-1}(X^5) \sim \omega^3 T^{-1} \exp(-\omega_0^2/T)$  (20).

У веществ с группой  $O_h^1$  представления в высокосимметричных точках  $L_3$ ,  $X_3$ ,  $K_r(U_r)$ ,  $W_s$ . Соответственно ряд  $\tau_{\bar{v}}^{-1}(O_h^1)$  получается с помощью формул (18), (20) при  $B=C$  и (30), (31) с  $\bar{p}_k = p_s^0 \sim g/10$ , где наибольший член  $\tau_{\bar{v}}^{-1}(L)$ .

В точках  $M$ ,  $X$  и  $R$  для кристаллов группы  $O_h^1$  могут осуществляться представления  $R'_{15}(R'_{25})$ ,  $M_r$ ,  $X_5(M_5, X_r)$  или  $M_5$ ,  $X_5$  [3, 4]. Согласно [3], спектры в  $M$  ( $X$ ) имеют минимум в направлении  $Z$  ( $S$ ) (для вырожденного спектра достаточно роста одной из ветвей). Поэтому невырожденный спектр в  $M$  ( $X$ ) может перейти в направлении  $Z$  только в ветвь вырожденного спектра, имеющего в точке  $X$  ( $M$ ) максимум. В случае одновременного вырождения энергий в точках  $X$ ,  $M$  ветви спектров также должны переходить из растущих в падающие и наоборот. При этом предполагается, что нет случайных экстремумов в точках общего положения на поверхности зон Бриллюэна. Таким образом, для получения  $\tau_{\bar{v}}^{-1}(O_h^1)$  надо воспользоваться формулами (42), (28), (20) (для CsBr, например), или (42), (27), (21), или (20) (для CsI и др. [3]). Наименьшая степень  $\omega$  в  $\tau_{\bar{v}}^{-1}(O_h^1)$  за счет  $\tau_{\bar{v}}^{-1}(M_r, X_r) \sim \omega$  или за счет  $\tau_{\bar{v}}^{-1}(M_5) \sim \omega^2 \sqrt{T}$ . Наибольший вклад в  $\tau_{\bar{v}}^{-1}(O_h^1)$  вносят  $\tau_{\bar{v}}^{-1}(M_r)$  или главный член в (27)  $\tau_{\bar{v}}^{-1}(M_5) \sim \frac{\omega^{3/2}}{T} \exp\left(-\frac{\omega_0^M}{T}\right)$ , так как у веществ с группой  $O_h^1$   $\omega_0^M \leq \omega_0^X < \omega_0^R$ .

- [1] Гуревич В. Л. Кинетика фоонных систем. М.: Наука, 1980. 400 с.
- [2] Могилевский Б. М., Чудновский А. Ф. Теплопроводность полупроводников. М.: Наука, 1972. 536 с.
- [3] Bilz H., Kress W. Phonon Dispersion Relations in Insulators, Springer—Verlag, Berlin—Heidelberg—New-York, 1979, Springer Series in Solid State Sciences 10. 256 p.
- [4] Бир Г. Л., Пикус Г. Е. Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках. М.: Наука, 1972. 584 с.
- [5] Bouckaert L. P., Smoluchowski R., Wigner E. Phys. Rev., 1936, vol. 50, p. 58—67 (Перевод в сборнике: Нокс О., Голд А. Симметрия в твердом теле. М.: Наука, 1970. 424 с.).
- [6] Parmenter R. G. Phys. Rev., 1955, vol. 100, N 2, p. 573—579 (Перевод в сб. 5, с. 360—378).
- [7] Herring K. Phys. Rev., 1954, vol. 95, N 4, p. 954—965.

Институт химической физики  
АН СССР  
Москва

Поступило в Редакцию  
15 апреля 1987 г.  
В окончательной редакции  
2 июля 1987 г.