1989 ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА Том 31, в. 9
1989 SOLID STATE PHYSICS Vol. 31, N 9

УДК 537.311.322

РАСПРОСТРАНЕНИЕ НЕРАВНОВЕСНЫХ ФОНОНОВ В КРИСТАЛЛАХ С ПРИМЕСЯМИ

А. Г. Козорезов, М. В. Красильников

Развита теория распространения слабонеравновесных фононов, инжектированных в кристалл с примесями плоским генератором. Получено и проанализировано точное выражение, описывающее зависимость от времени плотности энергии фононов в произвольной точке среды и справедливое при любом числе актов рассеяния фононов на примесях за характерные времена наблюдения. Предложены простые интерполяционные формулы, с большой точностью соответствующие общему решению. Проанализирована ситуация, когда рассеяние фононов на примесях носит рэлеевский характер. Показано, что в этом случае существенную роль играют высокочастотные фононы с энергиями $\geqslant 4\ k_{\text{Б}}T$, где T — температура генератора.

Неравновесные фононы (НФ), инжектированные в кристалл, в процессе распространения могут испытывать разнообразные взаимодействия. Это обстоятельство определяет широкое применение метода тепловых импульсов в физике твердого тела. Этот метод используется как для исследования свойств самих фононов, так и для изучения явлений переноса в твердых телах при низких температурах.

Если характерная длина свободного пробега НФ значительно превышает размер образца, то предположение о движении фононов по баллистическим траекториям дает хорошее описание процесса распространения теплового импульса.

В другом предельном случае длина свободного пробега фононов по отношению к процессам упругого рассеяния значительно меньше размеров образца и НФ в процессе распространения испытывают в объеме кристалла большое число актов рассеяния. Если при этом за характерные времена наблюдения не происходит заметного преобразования спектрального состава НФ (т. е. вклад от неупругих процессов взаимодействия фононов мал), то оправданной является диффузионная модель распространения теплового импульса, в которой движение фононов с заданной частотой можно описать уравнением диффузии.

В отличие от этих простейших случаев значительно более сложным является характер распространения НФ при наличии ангармонических взаимодействий. Здесь существенную роль могут играть процессы квазидиффузии, нелокальной теплопроводности, а также формирование горячего пятна и др. [1-4].

Вместе с тем даже при описании относительно простых режимов распространения НФ, таких как баллистический и диффузионный, до сих пор ряд вопросов требует прояснения. Во-первых, неясно, в какой мере справедливо диффузионное приближение, если среднее число столкновений фононов на длине образца невелико. Во-вторых, как правило, длина свободного пробега фононов достаточно сильно зависит от их частоты. Это означает, что вполне возможна ситуация, когда значительная часть фононов в образце движется баллистически, другая часть — диффузно и, наконец, третья группа фононов испытывает внутри кристалла небольшое число столкновений. В этих условиях очевидно, что распространение теплового импульса нельзя описать уравнением диффузии или в терминах баллистического движения. Удовлетворительное описание процесса распространения НФ можно получить лишь на основе соответствующего кинетического уравнения для фононов. Решение этой задачи составляет цель настоящей работы.

Итак, ограничимся исследованием распространения фононов в кристаллах в условиях, когда ангармоническими эффектами взаимодействия можно полностью пренебречь. Вместе с тем мы предполагаем, что фононы испытывают достаточно частые квазиупругие столкновения с дефектами или примесями. Интеграл столкновений фононов с примесями зададим в виде

$$I_{fd}\{N\} = \frac{N - \langle N \rangle}{\tau},$$

где N — функция распределения НФ; τ — время квазиупругой релаксации фононов на примесях; $\langle \ldots \rangle$ — символ усреднения по углам

$$f(\mathbf{k}) = \frac{1}{4\pi}\int d\Omega f(k, \theta, \varphi),$$

$f(\mathbf{k})$ — произвольная функция волнового вектора фонона $\mathbf{k}$; $d\Omega$ — элемент телесного угла; θ, φ — полярный и азимутальный углы вектора $\mathbf{k}$.

Такое представление для интеграла столкновений означает, что мы ограничиваемся моделью изотропного и упругого рассеяния фононов на примесях, а также не рассматриваем процессы конверсии мод в актах рассеяния.

Рассмотрим безграничную среду, где в начальный момент времени в плоскости $z=0$ происходит генерация НФ, и пренебрежем в дальнейшем влиянием границ. Нас будет интересовать зависимость от времени плотности энергии НФ в произвольной точке пространства

$$\mathscr{E}(z, t) = \sum_{\mathbf{k}j} \hbar\omega_{\mathbf{k}j} N_{\mathbf{k}j}(z, t, \xi), \tag{1}$$

где $\hbar\omega_{\mathbf{k}j}$ — энергия $\mathbf{k}j$-й моды; $\xi = \cos\widehat{\mathbf{k}\mathbf{e}_z}$; $\mathbf{e}_z$ — единичный вектор в направлении оси OZ.

Кинетическое уравнение Больцмана, описывающее характер распространения НФ, инжектированных плоским генератором, при указанных выше условиях имеет вид

$$\frac{\partial N}{\partial t} + v\xi\frac{\partial N}{\partial t} + \frac{N - \langle N \rangle}{\tau} = n\delta(z)\,\delta(t), \tag{2}$$

где v — скорость НФ; n — функция распределения фононов, инжектированных генератором.

Применяя к (2) преобразование Фурье, получим связь между Фурье-образами функции распределения НФ $N(q, \omega)$ и $\langle N(q, \omega)\rangle$. Исключая из этого выражения путем усреднения по углам последнюю величину и выполняя обратное преобразование Фурье, получим

$$N(z, t, \xi) = \frac{1}{(2\pi)^2}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} dq\,d\omega\, e^{iqz - i\omega t}\,\frac{n\tau 2iql}{[2iql - \ln((w+1)/(w-1))]\,(1 - i\omega\tau + iql\xi)}, \tag{3}$$

где $w = [1 - i\omega\tau]/iql$; $l = v\tau$ — длина свободного пробега фонона.

Подставим (3) в (1) и выполним интегрирование по углам

$$\mathscr{E}(z, t) = \frac{\hbar}{(2\pi)^5}\sum_j \frac{1}{v_j^3}\int_0^{\infty} d\omega_{kj}\,\omega_{kj}^3 n_{kj}\tau_{kj} \times$$

$$\times \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} dq\,d\omega\, e^{iqz - i\omega t}\,\frac{\ln((w+1)/(w-1))}{2iql - \ln((w+1)/(w-1))}. \tag{4}$$

Двойной интеграл в (4) может быть представлен в виде

$$I = 2ve^{-\frac{t}{\tau}} \operatorname{Re} \int\limits_0^\infty dq q e^{iqz} \int\limits_{-\infty - i/ql}^{+\infty - i/ql} dw e^{iqvtw} \frac{\ln((w+1)/(w-1))}{2iql - \ln((w+1)/(w-1))}. \tag{5}$$

Обозначим в (5) интеграл по dw через I^* и вычислим его. Для этого рассмотрим вспомогательный интеграл

$$\int\limits_C dw e^{iqvtw} \frac{\ln((w+1)/(w-1))}{2iql - \ln((w+1)/(w-1))}.$$

Контур интегрирования C представлен на рис. 1.

Легко показать, что интегрирование по C_R при $R \to \infty$ дает нуль, а интегралы по C_1 и C_2 компенсируют друг друга. Выделим аналитическую ветвь подынтегральной функции, задавая логарифмы вещественными на верхнем берегу разреза правее точек ветвления. Единственный полюс подынтегрального выражения находится в нижней полуплоскости $w = -i \operatorname{ctg} ql$ и при условии $0 \leqslant ql \leqslant \pi/2$ попадает внутрь контура интегрирования. Вычет подынтегральной функции в полюсе оказывается равным

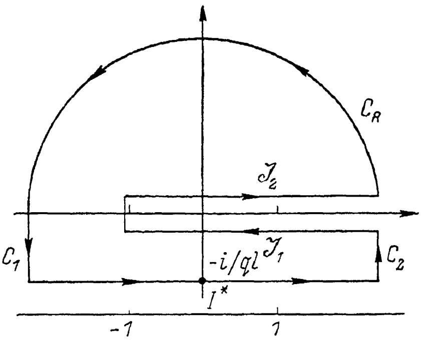

Рис. 1. Контур интегрирования C.

$$\frac{ql \exp[t/\tau \cdot ql \operatorname{ctg} ql]}{i \sin^2 ql} \Theta(\pi/2 - ql).$$

Легко показать, что

$$\mathscr{G}_1 + \mathscr{G}_2 = \int\limits_{-1}^{1} dx\, e^{iqvtx} \frac{4\pi ql}{(2iql - \ln(1+x)/(1-x))^2 + \pi^2}.$$

В итоге получим

$$I^* = \frac{2\pi ql \exp[t/\tau \cdot ql \operatorname{ctg} ql]}{\sin^2 ql} \Theta(\pi/2 - ql) -$$

$$- \int\limits_{-1}^{1} dx e^{iqvtx} \frac{4\pi ql}{[2iql - \ln((1+x)/(1-x))]^2 + \pi^2}. \tag{6}$$

Подставляя (6) в (5) найдем $I = I_1 - I_2$, где

$$I_1 = \frac{4\pi v e^{-t/\tau}}{l^2} \int\limits_0^{\pi/2} \frac{dx\, x^2}{\sin^2 x} \exp[t/\tau x \operatorname{ctg} x] \cos\frac{xz}{l},$$

$$I_2 = 2ve^{-t/\tau} \operatorname{Re} \int\limits_0^\infty dq q e^{iqz} \int\limits_{-1}^{1} dx\, e^{iqvtx} \frac{4\pi ql}{[2iql - \ln((1+x)/(1-x))]^2 + \pi^2}.$$

В выражении для I_2 удается выполнить интегрирование по dq, поскольку подынтегральная функция является четной. После элементарных преобразований получим

$$I_2 = 4\pi l v e^{-t/\tau} \operatorname{Re} \int\limits_0^1 dx \int\limits_{-\infty}^{\infty} dq q^2 \left\{ \frac{e^{iq(z+vtx)}}{[2iql - \ln((1+x)/(1-x))]^2 + \pi^2} + \right.$$

$$+\frac{e^{iq(z-vtx)}}{[2iql+\ln((1+x)/(1-x))]^2+\pi^2}\Bigg\}. \qquad (7)$$

Первое слагаемое в (7) при интегрировании по dq обращается в нуль. Интегрирование второго слагаемого дает

$$I_2=-\frac{2\pi^2 v e^{-t/\tau}z}{lv^2t^2}+\frac{\pi v e^{-t/\tau}}{l^2}\int\limits_0^{z/vt}dx\left(\frac{1+x}{1-x}\right)^{\frac{vtx-z}{2l}}\times$$

$$\times\left\{\sin\frac{\pi(z-vtx)}{2l}\left[\pi^2-\ln^2\frac{1+x}{1-x}\right]+2\pi\ln\frac{1+x}{1-x}\cos\frac{\pi(z-vtx)}{2l}\right\}. \qquad (8)$$

Таким образом, для величины $\mathscr{E}(z,t)$ получим окончательно

$$\mathscr{E}(z,t)=\frac{\hbar}{(2\pi)^3}\sum_j\frac{1}{v_j^4}\int\limits_0^\infty d\omega_{kj}\omega_{kj}^3 n_{kj}I, \qquad (9)$$

где

$$I=\frac{e^{-t/\tau}}{2t^2}+\frac{e^{-t/\tau}}{\pi\tau}\left\{\int\limits_0^{\pi/2}\frac{dx\,x^2}{\sin^2 x}\exp\left[\frac{t}{\tau}x\operatorname{ctg}x\right]\cos\frac{x}{\tau}+\right.$$

$$+\frac{1}{4}\int\limits_0^{1/t}dx\left(\frac{1+x}{1-x}\right)^{(tx-1)/2\tau}\left[\sin\frac{\pi(1-tx)}{2\tau}\left(\ln^2\frac{1+x}{1-x}-\pi^2\right)-\right.$$

$$\left.\left.2\pi\ln\frac{1+x}{1-x}\cos\frac{\pi(1-tx)}{2\tau}\right]\right\}.$$

Все величины, имеющие размерность времени, в выражении (9) и далее обезразмерены и заданы в единицах $t_\delta=z/v$ времени баллистического пролета фонона на расстояние z.

Выражение (9) справедливо при любом значении τ. Предельный случай $\tau\to 0$ соответствует ситуации, когда фононы испытывают большое число столкновений в среде. В этих условиях общее решение (9) легко преобразовать и представить в виде асимптотического ряда. Главный член этого ряда в точности соответствует решению уравнения диффузии, т. е. в (9)

$$I\to I_D={}^1/_2\sqrt{3/\pi t\tau}\exp[-3/4t\tau]. \qquad (10)$$

В предельном случае $\tau\to\infty$ в формуле (9) для I можно отбросить второе и третье слагаемые. Тогда

$$I\to I_{\text{Б}}=e^{-t/\tau}/2t^2, \qquad (11)$$

что соответствует баллистическому распространению фононов от плоского источника. Экспоненциальный сомножитель описывает уменьшение числа фононов, движущихся по баллистическим траекториям из-за столкновений.

На рис. 2 представлены результаты численного интегрирования общего решения (9). Здесь изображена зависимость плотности энергии фононов, генерируемых в момент времени $t=0$ плоским монохроматическим источником, в точке наблюдения z от времени.

Общее решение (9) громоздко и допускает только численный анализ. Однако легко построить простые и удобные интерполяционные формулы, воспроизводящие общее решение с любой точностью. Обсудим этот вопрос подробнее.

Простейшую интерполяционную формулу можно написать, представив общее решение в виде суммы диффузионного (10) и баллистического (11) вкладов, т. е.

$$I^0(t)=I_{\text{Б}}+I_D=\frac{1}{2}\left\{\frac{e^{-t/\tau}}{t^2}+\sqrt{\frac{3}{\pi t\tau}}\exp[-3/4t\tau]\right\}. \qquad (12)$$

Эта интерполяционная формула имеет очевидный недостаток. Она плохо передает поведение общего решения при конечных значениях $\tau \geqslant 1$ при временах $t \geqslant 1$. Это связано с тем, что при $\tau \geqslant 1$ диффузионная составляющая в (12) дает конечный вклад при $t \simeq 1$, сопоставимый с вкладом от баллистической составляющей, если только величина τ не слишком велика. Разумеется, в точном решении (9) второе и третье слагаемые, учитывающие роль столкновений, при $t=1$ в сумме дают нуль.

Можно предложить более точную интерполяционную формулу, нежели (12). Для этого нужно сохранить третье слагаемое в (9), разложив его по параметру $1/\tau$ и считая $\tau \gg 1$. Смысл сохранения подобного слагаемого состоит в более корректном учете столкновений. При $\tau > 1$ это сла-

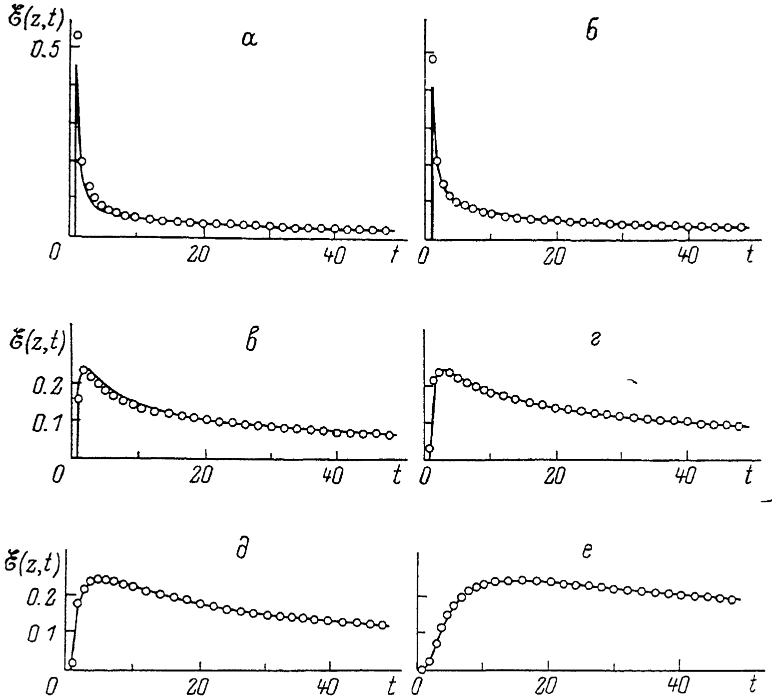

Рис. 2. Зависимость плотности энергии фононов от времени в точке наблюдения z при $\tau=10$ (*а*), *5* (*б*), 1 (*в*), 0.5 (*г*), 0.3 (*д*), 0.1 (*е*).

Сплошная кривая — точное решение (9), точки — интерполяционная формула (13).

гаемое частично компенсирует вклад от диффузионной составляющей. Удерживая главный член в разложении по $1/\tau < 1$, получим

$$I^1(t) = \frac{1}{2}\left\{\frac{e^{-t/\tau}}{t}\left[\frac{1}{t} + \frac{1}{\tau}\left(\ln\frac{t-1}{t+1} - t\ln\frac{t^2-1}{t^2}\right)\right] + \sqrt{\frac{3}{\pi t\tau}}\exp\left[-3/4t\tau\right]\right\}. \qquad (13)$$

Несмотря на отсутствие полной компенсации вклада диффузионной составляющей при $t=1$, формула (13), как видно из рис. 2, с большой точностью воспроизводит общее решение (9) во всем диапазоне значений величины τ.

Применим найденное точное решение (9) для анализа распространения НФ в кристалле с точечными дефектами, когда рассеяние фононов на примесях носит рэлеевский характер.

Введем частоту ω_0, определяемую из условия $\tau(\omega_0)=1$. Тогда

$$\tau(\omega) = \tau(\omega_0)(\omega_0/\omega)^4. \qquad (14)$$

Будем для простоты считать, что функция распределения фононов, генерируемых источником, является планковской. Воспользуемся интерполяционной формулой (13). Подставляя (14) в (13), а затем в (9), получим

$$\mathscr{E}(z, t) \sim \int_0^\infty \frac{dx\, x^3}{e^x - 1} \left\{ \frac{e^{-t(x/\alpha)^4}}{t} \left[\frac{1}{t} + \left(\frac{x}{\alpha}\right)^4 \left(\ln \frac{t-1}{t+1} - t \ln \frac{t^2-1}{t^2} \right) \right] + \right.$$
$$\left. + \left(\frac{x}{\alpha}\right)^2 \sqrt{\frac{3}{\pi t}}\, e^{-\frac{3}{4t}\left(\frac{x}{\alpha}\right)^4} \right\}, \qquad (15)$$

где $\alpha = h\,\omega_0/k_Б T$, T — температура генератора.

Смысл параметра α состоит в том, что для фононов с энергиями $h\omega < \alpha k_Б T - \tau(\omega) > 1$, а для фононов $h\omega > \alpha k_Б T - \tau(\omega) < 1$.

На рис. 3 представлены результаты численного анализа выражения (15) для разных значений параметра α. Видно, что в зависимости от параметра α меняются парциальные вклады в $\mathscr{E}(z, t)$ «баллистических» $\tau(\omega) > 1$ и «диффузионных» $\tau(\omega) < 1$ фононов. Малое изменение α приводит к резкому изменению положения максимума зависимости $E(z, t)$, а при $\alpha \geqslant 3$ вообще к его исчезновению.

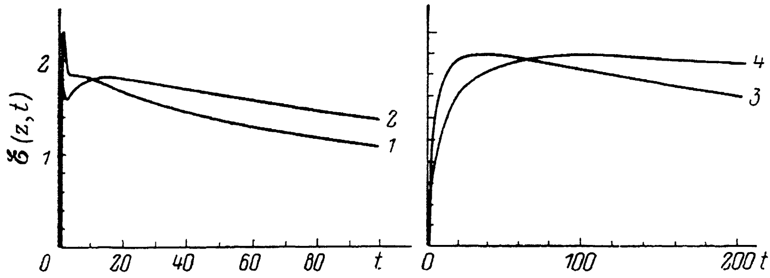

Рис. 3. Зависимость плотности энергии фононов от времени в точке наблюдения z при $\alpha=3$ (1), 2.5 (2), 2 (3), 1.5 (4).

Очевидно, что в различные моменты времени вклад в $\mathscr{E}(z, t)$ вносят фононы разных энергий. Легко оценить энергию фононов, вносящих основной вклад в $\mathscr{E}(z, t)$ в произвольный момент времени t^*. Введем частоту ω^* и разобьем интеграл (15) на два. В первом интегрирование будем проводить от нуля до $X^* = h\,\omega^*/k_Б T$, а во втором от X^* до ∞. Первый интеграл определяет вклад в $\mathscr{E}(z, t^*)$ низкочастотных ($\omega < \omega^*$) фононов, а второй — высокочастотных ($\omega > \omega^*$). Значение X^*, при котором вклады обеих групп фононов в $\mathscr{E}(z, t^*)$ сравниваются, и будет искомым результатом. Так, например, на рис. 3 ($\alpha = 1.5 \div 2.5$) в точке максимума основной вклад вносят фононы с энергиями $\approx 4 k_Б T$.

Приведенные оценки свидетельствуют о том, что при наличии в кристалле рэлеевских рассеивающих центров максимум зависимости $\mathscr{E}(z, t)$ формируется в основном высокочастотными фононами. Поскольку с ростом t средняя энергия фононов, определяющих $\mathscr{E}(z, t)$, возрастает, то возрастают интенсивности ангармонического взаимодействия и рассеяния фононов на примесях. Это обстоятельство существенно усиливает роль ангармонических процессов при диффузионном режиме распространения слабонеравновесных фононов и может привести к появлению переходной области между режимами диффузии и нелокальной фононной теплопроводности [1].

Авторы благодарят И. Б. Левинсона за полезные замечания и А. В. Таранова за помощь при численной обработке результатов.

Список литературы

[1] Левинсон И. Б. // ЖЭТФ. 1980. Т. 79. № 4 (10). С. 1394—1407.
[2] Казаковцев Д. В., Левинсон И. Б. // ЖЭТФ. 1985. Т. 88. № 6. С. 2228—2243.
[3] Козуб В. И. // ЖЭТФ. 1988. Т. 94. № 6. С. 186—203.
[4] Иванов С. Н. и др. // ЖЭТФ. 1985. Т. 89. № 5 (11). С. 1824—1829.

Институт радиотехники
и электроники АН СССР
Москва

Поступило в Редакцию
21 марта 1989 г.