

П-912



ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

17-86-223

УДК 539.2: 530.145:

530.182

ПУШКАРОВ
Димитр Иванов

**КВАЗИЧАСТИЧНЫЙ ПОДХОД
В КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ ДЕФЕКТОВ**

Специальность: 01.04.02 - теоретическая
и математическая физика

Автореферат диссертации на соискание ученой
степени доктора физико-математических наук

Дубна 1986

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики Объединенного института ядерных исследований.

Официальные оппоненты:

доктор физико-математических наук
профессор

М. И. КАГАНОВ

доктор физико-математических наук
академик АН МССР

В. А. МОСКАЛЕНКО

доктор физико-математических наук
старший научный сотрудник

Б. И. САДОВНИКОВ

Ведущая организация:

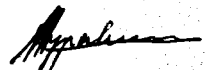
Институт кристаллографии АН СССР, Москва

Защита состоится "___" _____ 1986 г. на заседании Специализированного совета Д 047.01.01 Лаборатории теоретической физики Объединенного института ядерных исследований, г. Дубна, Московской области.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Объединенного института ядерных исследований.

Автореферат разослан "___" _____ 1986 г.

Ученый секретарь
Специализированного совета
кандидат физико-математических наук


В. И. ЖУРАВЛЕВ

Актуальность темы определяется как объектами исследования (точечные дефекты в квантовых кристаллах и одномерные образования солитонного типа в трехмерных и квазиодномерных структурах), так и методом исследования. Она обусловливается также следующими обстоятельствами.

Теория дефектов в кристаллах является важной областью физики конденсированного состояния, актуальность которой определяется большим влиянием дефектов на физические свойства твердых тел, а также большим прогрессом современной технологии в овладении возможностью управлять свойствами твердых тел путем введения в них дефектов определенного вида и концентрации. Вся современная микроэлектроника фактически основана на использовании свойств различных дефектов. Все большее значение при этом приобретают приборы, работающие при низких и сверхнизких температурах, требующие знания специфики низкотемпературного поведения дефектов. Особый интерес в этом отношении представляет длиннопробежная миграция дефектов. При низких температурах обычные активационные механизмы переноса теряют свою эффективность и уступают место квантовым процессам – туннельному и краудинному.

В последнее время возникла и бурно развивается новая область физики твердого тела – физика квантовых кристаллов. Она охватывает как кристаллы инертных газов, так и тяжелые металлы (ниобий, палладий и др.) с растворенными в них водородными примесями. Являясь по существу новым состоянием вещества, квантовые кристаллы вносят значительные изменения в современные представления о конденсированном состоянии. Наиболее ярко новые, квантовые свойства в таких средах проявляются именно в квазичастичном поведении дефектов – вакансий и примесей. В твердом гелии предсказано и обнаружено новое явление – квантовая диффузия дефектов. Благодаря квантовым эффектам гелий является единственным веществом, в котором расслоение твердых растворов происходит за времена, доступные экспериментальному наблюдению. Изотопы гелия являются представителями двух квантовых статистик – бозевской и фермиевской, а каждый из них кристаллизуется в трех модификациях. Таким образом, твердый гелий – это шесть квантовых кристаллов, составленных из атомов всего двух изотопов. Это – уникальный объект для теоретического и экспериментального исследования квантовых свойств дефектов при низких температурах. С другой стороны, гелий – традиционное вещество,

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики Объединенного института ядерных исследований.

Официальные оппоненты:

доктор физико-математических наук
профессор

М. И. КАГАНОВ

доктор физико-математических наук
академик АН МССР

В. А. МОСКАЛЕНКО

доктор физико-математических наук
старший научный сотрудник

Б. И. САДОВНИКОВ

Ведущая организация:

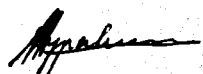
Институт кристаллографии АН СССР, Москва

Защита состоится "___" _____ 1986 г. на заседании Специализированного совета Д 047.01.01 Лаборатории теоретической физики Объединенного института ядерных исследований, г. Дубна, Московской области.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Объединенного института ядерных исследований.

Автореферат разослан "___" _____ 1986 г.

Ученый секретарь
Специализированного совета
кандидат физико-математических наук


В. И. ЖУРАВЛЕВ

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы определяется как объектами исследования (точечные дефекты в квантовых кристаллах и одномерные образования солитонного типа в трехмерных и квазиодномерных структурах), так и методом исследования. Она обусловливается также следующими обстоятельствами.

Теория дефектов в кристаллах является важной областью физики конденсированного состояния, актуальность которой определяется большим влиянием дефектов на физические свойства твердых тел, а также большим прогрессом современной технологии в овладении возможностью управлять свойствами твердых тел путем введения в них дефектов определенного вида и концентрации. Вся современная микроэлектроника фактически основана на использовании свойств различных дефектов. Все большее значение при этом приобретают приборы, работающие при низких и сверхнизких температурах, требующие знания специфики низкотемпературного поведения дефектов. Особый интерес в этом отношении представляет длиннопробежная миграция дефектов. При низких температурах обычные активационные механизмы переноса теряют свою эффективность и уступают место квантовым процессам – туннельному и краудсионному.

В последнее время возникла и бурно развивается новая область физики твердого тела – физика квантовых кристаллов. Она охватывает как кристаллы инертных газов, так и тяжелые металлы (ниобий, палладий и др.) с растворенными в них водородными примесями. Являясь по существу новым состоянием вещества, квантовые кристаллы вносят значительные изменения в современные представления о конденсированном состоянии. Наиболее ярко новые, квантовые свойства в таких средах проявляются именно в квазичастичном поведении дефектов – вакансий и примесей. В твердом гелии предсказано и обнаружено новое явление – квантовая диффузия дефектов. Благодаря квантовым эффектам гелий является единственным веществом, в котором расслоение твердых растворов происходит за времена, доступные экспериментальному наблюдению. Изотопы гелия являются представителями двух квантовых статистик – бозевской и фермиевской, а каждый из них кристаллизуется в трех модификациях. Таким образом, твердый гелий – это шесть квантовых кристаллов, составленных из атомов всего двух изотопов. Это – уникальный объект для теоретического и экспериментального исследования квантовых свойств дефектов при низких температурах. С другой стороны, гелий – традиционное вещество,

Научно-техническая
библиотека
ОИЯИ

без которого немислима низкотемпературная техника. Поэтому изучение его свойств как в жидком, так и в твердом состоянии, имеет важное практическое значение.

В последние годы появились новые перспективные квазиодномерные проводники, в которых носителями тока являются новые возбуждения солитонного типа (кинки), вызванные структурными дефектами решетки. Теория солитонов в таких структурах – часть бурно развивающейся теории нелинейных явлений и солитонов, актуальная для многих областей современной физики – физики магнетизма, плазмы, нелинейной оптики, гидродинамики, элементарных частиц и др.

Поэтому применение квазичастичного подхода к указанным объектам распространяет квантовые идеи и указывает на новые эффекты как в поведении точечных дефектов, так и в поведении сложных нелинейных образований солитонного типа.

Наконец, квазичастичный подход актуален как один из наиболее мощных методов современной квантовой теории твердого тела, который применяется и к таким традиционным объектам, как металлы, полупроводники и др. Поэтому дальнейшее развитие и совершенствование этого метода имеет прямое отношение к широкому кругу проблем, выходящих далеко за рамки теории дефектов.

Целью настоящей работы является развитие и применение квазичастичного подхода к дефектам в квантовых кристаллах, краудинам и солитонам в квазиодномерных структурах, а также создание последовательной нелинейной квантовой теории динамики деформируемого твердого тела с квазичастичными возбуждениями.

Такая задача включает в себя как составные части построение микроскопической теории дефектов в квантовых кристаллах и выяснение квазичастичных свойств новых элементарных возбуждений – дефектонов, а также построение квантовой теории краудинонов и солитонов и выяснение влияния квантовых эффектов на их делокализацию и превращение в новые квазичастицы – солитонные волны.

Основные результаты диссертации можно охарактеризовать следующим образом:

1. Построена микроскопическая квантовая теория точечных дефектов в кристаллах при низких температурах. На основе микроскопической модели показано, что точечные дефекты в квантовых кристаллах делокализуются и превращаются в квазичастицы – дефектоны. Получена волновая функция квазигармонического кристалла с дефектоном.

2. Найден закон дисперсии и все динамические характеристики дефектонов. Для этого развит новый метод, учитывающий влияние "облака" нулевых фононов, без использования теории возмущений. Получена зависимость динамических характеристик от давления (молярного объема). Результаты выражены через макроскопические характеристики среды.

3. Рассмотрено рассеяние дефектонов на дефектонах и показано, что из-за узости дефектонной зоны сечение рассеяния может быть аномально большим. Рассмотрено рассеяние вакансиона на примесоне с учетом анизотропии кристаллического потенциала и получено сечение рассеяния в борновском приближении.

4. Рассмотрен процесс делокализации дефекта и определены характерное время и скорость фронта волны делокализации.

5. Рассмотрены коллективные свойства дефектонов и определена их статистика в зависимости от статистики дефектных атомов, атомов матрицы кристалла и решеточного типа дефекта. Показано, что с понижением концентрации дефектов роль статистики возрастает.

6. Рассмотрена кинетика дефектонов. Получен их коэффициент диффузии в фононном газе и в области дефектон-дефектонного рассеяния. Получена интерполяционная формула для коэффициента диффузии примесонов в твердом теле. Рассмотрено влияние дефектонов на теплоемкость и теплопроводность квантового кристалла.

7. На основе результатов развитой теории проведена обработка экспериментальных данных по диффузии примесей ^3He в твердом ^4He и определены ширина дефектонной зоны и сечение дефектон-дефектонного рассеяния. Обработка тех же данных по другим теориям давала значения, заниженные на 2-3 порядка.

8. Рассмотрено влияние дефектонных возбуждений на структуру кристаллической решетки. Предсказаны два эффекта – вакансионное очищение кристалла от примесей и вакансионное образование зародышей новой фазы.

9. Построена нелинейная теория динамики кристалла с квазичастичными возбуждениями. Сформулированы уравнения нелинейной теории упругости. Получена самосогласованная система нелинейных уравнений динамики, состоящая из связанных между собой кинетического уравнения для квазичастичного газа, уравнений нелинейной теории упругости и уравнений Максвелла (в случае заряженных квазичастиц).

10. На основе результатов п. 9 получены уравнения динамики металлов и выведена формула для плотности тока в металле при наличии произвольной, зависящей от времени деформации.

11. Вычислена плотность распределения дефектонов в твердом ^4He , вращающемся с постоянной скоростью в сверхтекучем гелии-II.

12. Получено уравнение движения для плотности квазимпульса. Показано, что при небольших отклонениях от равновесия тензор потока квазимпульса диагонален и пропорционален термодинамическому потенциалу Ω газа. С помощью уравнений движения для квазимпульса рассмотрено распространение второго звука в диэлектриках.

13. Рассмотрено нелинейное взаимодействие дефектона с вызванной им же деформацией решетки. Показано, что оно может привести к образованию связанного состояния дефектона с фононами - нелинейного дефектона. Одномерный нелинейный дефектон может двигаться сквозь кристалл с постоянной скоростью и без изменения формы деформации. С математической точки зрения нелинейные дефектоны являются новыми солитонными решениями нелинейного уравнения Шредингера с высшими нелинейностями. Определены динамические характеристики солитонов.

14. Построена квантовая теория краудионов в кристаллах при низких температурах. Показано, что краудионы превращаются в квазичастицы - краудионные волны, движущиеся вдоль кристаллографических осей как "легкие" свободные частицы.

15. Показано, что при довольно общих предположениях пиннинг солитонных возбуждений в квазиодномерных структурах типа полиацетилена на решетке невозможен ввиду существенной роли квантовых эффектов. Такие возбуждения превращаются в квазичастицы - солитонные волны.

16. Рассмотрено взаимодействие краудионных волн с колебаниями решетки. Показано, что краудионная волна может двигаться со скоростью большей скорости звука в кристалле. Рассмотрено черенковское излучение фононов краудионной волной.

Научное и практическое значение. Научное значение работы заключается прежде всего в квантовом подходе к таким объектам (примесям, вакансиям, краудионам, солитонам и др.), которые раньше рассматривались полуклассически. В диссертации на основе микроскопической теории этих объектов выявлен новый тип их поведения - когерентное движение. Введены в рассмотрение новые элементарные возбуждения - нелинейные дефектоны и солитонные волны. Рассчитаны их динамические и кинетические характеристики. Предказаны эффекты, не имеющие классического аналога. Полученная в диссертации волновая функция квантового кристалла послужила основой для расчета различных спектральных проявлений дефектонов в эффекте Мёссбауера, при рассеянии нейтронов, в спектрах ЯМР и др.

В диссертации построена теория динамики деформируемых твердых тел с квазичастичными возбуждениями. Применимость этой теории как к квантовым кристаллам, так и к таким важным объектам, как металлы и полупроводники, обуславливает ее практическое значение. Значительная часть идей и результатов диссертации может с успехом применяться и к другим системам и явлениям (металлы с водородными примесями, квазиодномерная диффузия вдоль дислокаций и т.д.).

Апробация работы. Основные результаты диссертации докладывались на следующих международных и национальных конференциях и школах:

X, XII, XXIV Международные конференции стран-членов СЭВ по физике и технике низких температур (Варна 1971, Секешфехервар 1973, Берлин 1985)

XXII, XXIII Всесоюзные совещания по физике низких температур (Кишинев 1982, Таллин 1984)

Международная конференция по физике квантовых кристаллов (Тбилиси 1974)

VI, VIII Национальные конференции по физике (София 1973, Видин 1976)

II, III Национальные конференции молодых физиков (София 1974, Видин 1976)

Национальная школа "Нелинейные явления и неустойчивости в конденсированном состоянии вещества" (Гялечича 1975)

II, III Международные школы по физике конденсированного состояния (Варна 1982, Варна 1984)

I Национальный конгресс физиков (София 1983)

III Международный симпозиум по избранным проблемам статистической механики (Дубна 1984)

VI Общая конференция по физике конденсированного состояния Европейского физического общества (Стокгольм 1986)

Публикации: По теме диссертации опубликовано 24 статьи. Из опубликованных 17 тезисов и резюме докладов на конференциях в список авторских работ в конце автореферата включены 4 тезиса.

Структура диссертации: Диссертация состоит из введения, трех частей, содержащих 9 глав и 44 параграфа, заключения, 4-х приложений и списка литературы из 167 наименований. Содержит 252 страницы, 15 рисунков и 5 таблиц.

СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

Во Введении кратко отмечены особенности квазичастичного подхода к твердым телам и, в частности, к дефектам в квантовых кристаллах и солитонам в кристаллах и квазиодномерных структурах; вводятся основные понятия, указываются смысл и место рассматриваемых в диссертации проблем, формулируются цель диссертации и основные положения, выдвигаемые на защиту. В краткой форме излагается структура и дается распределение материала по главам диссертации.

В первой части диссертации рассмотрены дефекты в квантовых кристаллах. Большинство результатов здесь относится к вакансиям и примесям в твердых изотопах гелия, хотя некоторые из них имеют отношение и к другим квантовым системам, в частности, к примесям водорода в тяжелых металлах.

Первые два параграфа имеют вводный характер. В них даны краткие сведения о твердом гелии как о квантовом кристалле и о теоретических моделях и методах описания квантовых кристаллов без дефектов. Обращено внимание на особенности в описании дефектов и на основные отличия задач, стоящих перед классической и квантовой теориями дефектов.

Как впервые было указано Андреевым и Лифшицем, в квантовых кристаллах дефекты образуют новую ветвь элементарных возбуждений. Поэтому основной задачей является нахождение энергетического спектра (закона дисперсии) этих возбуждений.

Энергетическому спектру дефектонов посвящена Глава I. В ней на основе микроскопической модели показано, что точечные дефекты (вакансии и примеси) в квантовых кристаллах делокализуются и превращаются в квазичастицы - дефектоны, состояние которых описывается не их положением в кристаллической решетке, а их квазиимпульсом \vec{k} и законом дисперсии $\varepsilon(\vec{k})$. Для вычисления закона дисперсии развит новый метод, учитывающий без помощи теории возмущений роль фононной "шубы", сопровождающей дефект. В модели используется квазигармоническое приближение описания кристалла, а дефектон рассматривается в приближении сильной связи, что оправдано ввиду малой скорости дефектона по сравнению со скоростью звука, и позволяет найти закон дисперсии в аналитическом виде для всей зоны Бриллюэна. В этом приближении вид закона дисперсии определяется свойствами симметрии решетки, а ширина зоны пропорциональна амплитуде вероятности перехода A кристалла в состоянии с дефектом в соседнем узле кристаллической решетки. Показано, что в гексагональной плотно-упакованной фазе ^4He дефектонная зона состоит из двух ветвей, условно названных нами акустической и оптической:

$$\varepsilon_{\alpha\kappa}(\vec{k}) = A \left\{ 7 - 4 \cos \frac{\vec{k}\vec{a}_1}{2} \cos \frac{\vec{k}\vec{a}_2}{2} \cos \frac{\vec{k}\vec{a}_3}{2} + \cos \frac{\vec{k}\vec{c}}{2} \sqrt{1 + 8 \cos \frac{\vec{k}\vec{a}_1}{2} \cos \frac{\vec{k}\vec{a}_2}{2} \cos \frac{\vec{k}\vec{a}_3}{2}} \right\}$$

$$\text{где } \vec{a}_1 = (1, 0, 0), \vec{a}_2 = \left(-\frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2}, 0\right), \vec{a}_3 = \left(-\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}, 0\right), \vec{c} = \left(0, 0, \sqrt{\frac{8}{3}}\right).$$

Ширины зон равны соответственно $\Delta_{\alpha\kappa} = 7A$, $\Delta_{on} = 5A$. У оптической зоны имеется щель шириной $3A$. Таким образом, дефектонный спектр занимает энергетический интервал $8A$.

Величина A является основным параметром теории. Через нее выражаются все динамические характеристики дефектона. При малых значениях волнового вектора ($k a \ll 1$) закон дисперсии квадратичен. Тогда эффективная масса $m^* \sim \hbar^2 / A a^2$, а средняя скорость $\bar{v} = \vec{k} A a^2 / \hbar$. В излагаемой теории величина A рассматривается как матричный элемент перехода между состояниями кристалла, соответствующими положениям дефекта в двух соседних узлах решетки:

$$A = \hbar^2 \int \left(\Psi_{\vec{z}} \frac{\partial}{\partial x_i} \Psi_{\vec{z}+\vec{\delta}} - \Psi_{\vec{z}+\vec{\delta}} \frac{\partial}{\partial x_i} \Psi_{\vec{z}} \right) d^3x, \quad (1)$$

где x_i - координата реально перемещающегося атома (для вакансии x_i есть координата атома, переходящего на ее место), $d^3x = \prod dx_k$, а $\Psi_{\vec{z}}$ - функция состояния кристалла с локализованным в узле \vec{z} дефектом, в квазигармоническом приближении имеющая вид

$$\Psi_{\vec{z}}(x) = \frac{(\det \hat{\omega}_0)^{1/4}}{(\pi \hbar)^{3N/4}} \exp \left\{ -\frac{1}{2\hbar} (x - \hat{x}, \hat{\omega}_0(\vec{z})(x - \hat{x})) \right\} \quad (2)$$

Здесь $\hat{\omega}_0$ - квадратный корень из матрицы упругих коэффициентов, \hat{x} - равновесные положения атомов.

Такой подход обладает рядом преимуществ по сравнению с методами, основанными на перекрытии одночастичных волновых функций соседних атомов, аналогичных преимуществам дебаевской теории по сравнению с эйнштейновской. Он позволяет также записать волновую функцию дефектона в явном виде и использовать ее для рассмотрения различных спектральных проявлений дефектонов. Используемый подход дает возможность выразить закон дисперсии через макроскопические характеристики среды и две постоянные (ζ_0, ζ_1), зависящие только от свойств симметрии решетки:

$$A = \zeta_1 \theta \left(\frac{m s^2}{\theta} \right)^{1/2} e^{-\zeta_0 \frac{m s^2}{\theta}}, \quad (3)$$

где s - скорость звука, m - масса атома, θ - температура Дебая. Постоянная ζ_0 простым образом связана с числом ближайших соседей -

$\zeta_0 = \sqrt{z} - \frac{1}{\sqrt{z} - 1}$. Выбранный способ описания с помощью самосогласованной матрицы $\hat{\omega}^2$ дал возможность также получить зависимость ширины зоны от молярного объема. Вычисленные значения для ширины вакансионной зоны в гелии показали хорошее согласие с экспериментальными данными и с результатами более поздних теорий. Дополнительное под-

тверждение получено в диссертации (§ 18) при сравнении теоретических и экспериментальных значений для теплоемкости твердого ^3He в области высокотемпературной аномалии. Для кристалла с молярным объемом $V_m = 24,454 \text{ см}^3$ получена энергия активации $\epsilon_0 = 6,65 \text{ К}$ и ширина зоны $\Delta = 6,42 \text{ К}$. Полученная "постоянная Грюнрайзена" для ширины зоны также хорошо согласуется с экспериментальными результатами.

Глава II посвящена статистике дефектонов. Дефектоны появляются не в вакууме, а в решетке из частиц, подчиняющихся определенной статистике. Поэтому поведение волновой функции кристалла с дефектонами при перестановках зависит как от статистики дефектных атомов, так и от статистики атомов матрицы. В результате статистика дефектонов, вообще говоря, не совпадает со статистиками Бозе-Эйнштейна или Бозе-Дирака, как это имеет место для обычных частиц. Существенную роль играет также дискретность решетки – дефекты разного решеточного типа – атомы внедрения или замещения, вызванные одинаковыми атомами, превращаются в дефектоны, подчиняющиеся разным статистикам. Поэтому, в принципе, переход примесного атома внедрения в узел может быть затруднен также необходимостью "перехода в другую статистику" и преодоления энергетического барьера порядка энергии Ферми.

Вообще говоря, температура вырождения дефектонного газа мала:

$$T_0 \sim \Delta \cdot X^{2/3} \quad (4)$$

и понижается с уменьшением концентрации. Тем не менее, роль статистики с понижением концентрации дефектов возрастает, в чем можно убедиться, если учесть, что взаимодействие между дефектонами в кристаллах обратно пропорционально третьей степени расстояния, и, следовательно, энергия взаимодействия дефектонов пропорциональна их концентрации X :

$$E = \frac{V_0}{r^3} = V_0 \cdot X.$$

Следовательно, при малых концентрациях $\frac{T_0}{E} \sim \frac{\Delta}{V_0} X^{-1/3} \gg 1$.

С помощью метода, использованного Боголюбовым, найдена зависимость статистики дефектонов от статистики примесных атомов, статистики атомов матрицы и типа дефекта. Рассмотрено кинематическое взаимодействие дефектонов. Показано, что при определенных условиях дефектоны подчиняются парастатистике, допускающей N -частичное (N – число узлов) заполнение каждого уровня, но не совпадающей со статистикой Дженгиле. В одномерном случае, при учете только обмена между ближайшими соседями, дефектоны можно рассматривать как фермионы.

В Главе III рассмотрена кинетика дефектонов, в которой наиболее ярко проявляется квазичастичное поведение дефектонов.

Рассмотрение начинается с процесса делокализации точечного дефекта. Показано, что в начальные моменты времени делокализация идет

быстро, и вероятность нахождения дефекта в начальном узле уменьшается квадратично во времени. Получен средний квадрат расстояния, пройденного дефектоном за время t :

$$\langle \varrho^2 \rangle^{1/2} = \sqrt{\frac{3}{2}} a \frac{t}{\tau_0}, \quad \tau_0 = \frac{\hbar}{A}, \quad (5)$$

а также уравнение непрерывности для процесса делокализации и скорость фронта волны делокализации $v = \sqrt{3/2} A a / \hbar$. Время делокализации вакансии в твердом гелии оценивается $\sim 10^{-11} \text{ с}$, а для примесей $\sim 10^{-6} \text{ с}$. Для когерентного поведения дефектов необходимо, чтобы все времена свободного пробега были велики по сравнению с временем делокализации τ_0 . Это условие накладывает существенные ограничения на допустимые концентрации дефектов, сводящиеся к неравенству

$$X \sigma \ll 1, \quad (6)$$

где σ – сечение рассеяния (в единицах a^2).

Наибольший интерес представляют эффекты, связанные с диффузией. В них наиболее четко проявляются квазичастичные свойства дефектонов и их отличие от других квазичастиц. В диссертации показано, что принципиальную роль в кинетических явлениях играет ширина энергетической зоны Δ . Ее необходимо сравнивать как с температурой, так и с характерной энергией дефектон-дефектонного взаимодействия V_0 . Для примесей в твердом гелии $V_0 \sim 10^{-2} \text{ К}$. Величина V_0 оказывается на два порядка меньше ширины вакансионной зоны ($\sim 5 - 10 \text{ К}$) и на два порядка больше ширины примесонной зоны ($\sim 10^{-4} \text{ К}$).

Малая ширина примесонной зоны радикально меняет характер процесса рассеяния. В отличие от широкозонных квазичастиц примесоны рассеиваются не на ядре дефекта, а на окружающем его медленно меняющемся поле деформаций. В твердых телах взаимодействие точечных дефектов можно записать в виде

$$\varphi(\vec{r}) = V_0(\vec{n}) \left(\frac{a}{r} \right)^n, \quad (7)$$

где для кристаллов $n = 3$ и функция направлений $V_0(\vec{n})$ исчезает при усреднении по углам, а в пространственно-изотропной среде $n = 6$ и $V_0 = \text{const}$.

Благодаря малой ширине зоны вокруг дефектов создаются большие области, недоступные для квазичастиц. Их линейный размер

$$R_0 = a (V_0 / \Delta)^{1/n}. \quad (8)$$

Поэтому сечения дефектон-дефектонного рассеяния оказываются аномально большими

$$\sigma \sim \pi a^2 \left(\frac{V_0}{\Delta} \right)^{2/n}. \quad (9)$$

Как показали Андреев и Лифшиц, узкая примесонная зона приводит и к своеобразному захвату квазичастиц не только в минимумах упругого по-

тенциала, но и в местах с большими градиентами поля. При этом захват возможен как в поле притяжения, так и в поле отталкивания. Он происходит в тех случаях, когда ширина зоны оказывается меньше изменения потенциала $\varphi(r)$ на длине постоянной решетки, т.е. если $|\nabla\varphi|a \geq \Delta$, откуда следует, что при концентрациях

$$x > x_c \equiv \left(\frac{\Delta}{nV_0}\right)^{\frac{3}{n+1}} \quad (10)$$

все дефекты будут локализованы. Для примесей ^3He в твердом ^4He $x_c \sim 1\%$.

Более точные оценки можно получить, если учесть, что в реальных условиях эксперимента $T \gg \Delta$ и, следовательно, выполняются условия применимости квазиклассического приближения

$$(ka)^{n-2} \gg \frac{A}{V_0}. \quad (11)$$

В этом случае

$$\sigma \sim \pi a^2 \left(\frac{V_0}{\Delta}\right)^{\frac{2}{n-1}}. \quad (12)$$

Условие (11) выполняется и при выполнении неравенства

$$A \left(\frac{A}{V_0}\right)^{\frac{2}{n-2}} \ll T < \Delta. \quad (13)$$

В этом случае $ka \sim \sqrt{T/A}$, и сечение рассеяния

$$\sigma \sim \pi a^2 \left(\frac{V_0^2}{TA}\right)^{\frac{1}{n-1}}. \quad (14)$$

Оно растет с понижением температуры до значения

$$\sigma_{\max} \sim \pi a^2 \left(\frac{V_0}{A}\right)^{\frac{2}{n-1}}. \quad (15)$$

Обратный предельный случай, соответствующий рассеянию медленной частицы на быстроубывающем поле, может иметь место при рассеянии вакансиона в изотропной среде при $T \ll \Delta$. В этом случае

$$\sigma \approx 3,65 \pi a^2 \left(\frac{V_0}{2A}\right)^{1/2}. \quad (16)$$

Если вакансион рассеивается на вакансионе, то $V_0 \approx ms^2$ (s - скорость звука), $A \sim 1\text{K}$ и $\sigma \sim 50a^2$.

При рассеянии вакансиона на примесоне может реализоваться ситуация, когда $\Delta \gg V_0$. В этом случае справедливо борновское приближение, и задача может быть решена с учетом точной угловой зависимости потенциала (7). Для кубических кристаллов $V_0(\vec{n}) = V_0 \Gamma(\vec{n})$, где

$$\Gamma(\vec{n}) = \sum_{i=1}^3 n_i^4 - \frac{3}{5}. \quad \text{В этом случае дифференциальное сечение равно}$$

$$d\sigma = \frac{4}{225} a^2 \left(\frac{V_0}{A}\right)^2 \Gamma^2(\vec{n}) d\Omega. \quad (17)$$

Если дефектоны подчиняются статистике Ферми-Дирака, то при температурах ниже температуры вырождения сечение рассеяния зависит как от температуры, так и от концентрации:

$$\sigma \sim T \frac{V_0}{A^2 x}, \quad T < Ax^{2/3}, \quad x > \left(\frac{A}{V_0}\right)^3. \quad (18)$$

10

Проведенное рассмотрение достаточно для выяснения когерентной диффузии при низких температурах, когда рассеяние на тепловых фононах можно не учитывать (нулевые фононы не нарушают периодичность кристалла, и рассеяние на них не происходит). Если концентрация дефектов достаточно мала, то длина свободного пробега $l = a / (\sqrt{2} x \sigma)$. (19)

Условие когерентности $l \gg a$ совпадает с условием (6). Благодаря большим значениям сечений рассеяния оно оказывается более слабым, чем условие применимости газового приближения

$$x < \sigma^{-3/2} < \sigma^{-1} \equiv x_0. \quad (20)$$

Концентрация x_0 оказывается также не меньше критической концентрации x_c (10), при которой наступает локализация дефектонов. Поэтому процесс локализации можно рассматривать в терминах квазичастиц.

Концентрационные области можно разбить по степеням малого параметра $\xi \equiv \Delta/V_0$

- I. $x < \xi^{\frac{3}{n-1}}$ - газовое приближение,
- II. $\xi^{\frac{3}{n-1}} < x < (\xi/n)^{\frac{3}{n+1}}$ - область взаимодействующих квазичастиц,
- III. $x > (\xi/n)^{\frac{3}{n+1}}$ - область локализованных дефектонов.

В области I коэффициент диффузии

$$D_I = \frac{1}{6\sqrt{2}} \frac{as}{x\sigma} \frac{\Delta}{\theta_p}, \quad \theta_p = \frac{\hbar s}{2a} \quad (21)$$

или, подставляя σ из (12), имеем

$$D_I \sim \frac{\Delta^2}{V_0 x}. \quad (22)$$

Коэффициент диффузии в области II вычислялся многими авторами. В этой области длина свободного пробега определяется рассеянием на границах энергетической зоны, и D можно записать в виде

$$D_{II} \sim \frac{\Delta^2}{V_0 x^{\frac{n+1}{3}}}. \quad (23)$$

Область III рассматривалась в работах Кагана с сотрудниками.

Существенно, что в (22) и (23) зависимость от ширины зоны одинакова. Поэтому переход из области I в II не связан с изменением зависимости D от молярного объема. Такое поведение было обнаружено экспериментально в работах Ричардса с сотр., но не нашло объяснения в рамках рассматриваемых там моделей.

В существенно квантовой области коэффициент диффузии фермиевских дефектонов имеет вид

$$D_F = \frac{3\pi^2}{8} \frac{a^2}{\hbar} \frac{A^4}{V_0 T^2}, \quad (24)$$

а в случае бозевских возбуждений

$$D_B \approx 2,5 \frac{a^2}{\sigma \hbar} \frac{A^2}{T}. \quad (25)$$

Следует, конечно, иметь в виду, что если бозе-эйнштейновская конденсация возможна, то даже небольшой градиент химического потенциала приводит к сверхтекучему потоку дефектонов, который может оказаться основным.

Правильный учет зависимости кинетических характеристик от ширины зоны имеет большое значение для сравнения теории с экспериментом и, в частности, при определении ширины примесной зоны из данных по диффузии. Непонимание роли больших сечений рассеяния как результата узости зоны, во многих работах приводило к занижению на 2 порядка оценки ширины примесной зоны в гелии.

С повышением температуры все более существенную роль играет рассеяние дефектонов на тепловых фононах. Поскольку скорость дефектона мала по сравнению со скоростью звука s , основную роль играют двух-фононные процессы. Рассеяние фононов на дефектонах рассчитано на основе теории Лифшица. Показано, что сечение рассеяния имеет вид

$$d\sigma_{\vec{k}\vec{k}'} = \left(\frac{v_0}{2\pi}\right)^2 k^4 \sum_{nn'} d\Omega, \quad (26)$$

где

$$\sum_{nn'} = \frac{1}{12m^2s^4} \sum_{\sigma_1\sigma_2} \left\{ \sum_{R_1R_2} \vec{n} \vec{R}_1 \Lambda_{R_1R_2}^{\sigma_1\sigma_2} \vec{n}' \vec{R}_2 \right\}^2, \quad (27)$$

$$\vec{n} = \frac{\vec{k}}{k}, \quad \vec{n}' = \frac{\vec{k}'}{k'}, \quad d\Omega = 2\pi \sin\alpha d\alpha, \quad \cos\alpha = \vec{n} \vec{n}',$$

а $\Lambda_{RR'}^{\sigma\sigma'}$ - матрица возмущения, v_0 - объем ячейки. В случае вакансии в простой кубической решетке

$$\sum_{nn'} = (\vec{n} \vec{n}')^2, \quad (28)$$

а в случае примеси (28) необходимо умножить еще на интенсивность возмущения σ_0 , зависящую как от упругих модулей, так и от массы примеси. Показано, что в фононном газе дефектон движется как тяжелая частица в газе легких. Такое поведение связано с низкими температурами $T \ll \theta_p$, $\theta_p = \hbar s / 2a$. В этом случае длина и время свободного пробега равны соответственно

$$l = \frac{\sqrt{2}a}{\alpha_0\sigma_0} \frac{\overline{\varepsilon(p)}^{3/2}}{\theta_p \sqrt{A}} \left(\frac{\theta_p}{T}\right)^9, \quad \tau = \frac{\tau_0}{\alpha_0\sigma_0} \frac{\overline{\varepsilon(p)}}{\theta_p} \left(\frac{\theta_p}{T}\right)^9, \quad \alpha_0 \approx 1,27 \quad (29)$$

а коэффициент диффузии имеет вид

$$D_T = \frac{as}{3\alpha_0\sigma_0} \left(\frac{\overline{\varepsilon(p)}}{\theta_p}\right)^2 \left(\frac{\theta_p}{T}\right)^9, \quad (30)$$

где черта означает усреднение по температуре.

Если $T \gg \Delta$, как это имеет место для примесонов в гелии, то $\overline{\varepsilon(p)} = \Delta$, и

$$D_T = 2,4as \left(\frac{\Delta}{\theta_p}\right)^2 \left(\frac{\theta_p}{T}\right)^9 \quad (31)$$

Если же $T_0 < T < \Delta$, то дефектоны можно рассматривать как бальмановский газ и $\overline{\varepsilon(p)} = \frac{3}{2}T$. Тогда

$$D_B \approx 0,59 \frac{as}{\sigma_0} \left(\frac{\theta_p}{T}\right)^7 \quad (32)$$

Соответственно время свободного пробега

$$\tau_B = 1,18 \frac{\tau_0}{\sigma_0} \left(\frac{\theta_p}{T}\right)^8 \quad (33)$$

При $T < T_0$ коэффициент диффузии зависит от статистики дефектонов. В случае бозевской статистики

$$D_B \sim \frac{as}{\sigma_0} \left(\frac{\theta_p}{T}\right)^7, \quad (34)$$

а в случае статистики Ферми

$$D_F \sim \frac{as}{\sigma_0} \times^{4/3} \left(\frac{\Delta}{\theta_p}\right)^2 \left(\frac{\theta_p}{T}\right)^9 \quad (35)$$

Девятую степень температуры в (30) и (35) можно получить из простых физических соображений. Три степени связаны с числом фононов, четыре - с сечением рассеяния (26), и две - с неэффективностью передачи импульса при столкновении "легкой частицы с тяжелой". Существенно, однако, что в (30) - (35) в качестве температурного параметра входит величина $\theta_p = \hbar s / 2a$, а не температура Дебая $\theta \approx 8\theta_p$. Поэтому коэффициент диффузии отличается от использованного в некоторых других работах множителем $\sim 10^{-6}$. Использование неправильного диффузионного закона приводило к заниженным значениям для ширины примесной зоны в гелии на 2-3 порядка.

Малость ширины примесной зоны в данном случае имеет неожиданное проявление. Как было показано Андреевым, из-за того, что ширина зоны является наименьшим энергетическим параметром, она выпадает из интеграла столкновений в кинетическом уравнении. В результате газокинетическое приближение для диффузии оказывается справедливым и при температурах, близких к дебаевской (и для длин свободного пробега меньше постоянной решетки). Этот же результат был получен раньше другим методом Каганом и Клиндером. К сожалению, справедливость закона (30) при температурах, близких к дебаевской, нельзя проверить в гелии, так как кристалл плавится раньше, а активационная диффузия начинается при значительно более низких температурах.

В диссертации получена интерполяционная формула, описывающая когерентную квантовую диффузию в гелии во всей области ее существования:

$$D^{-1} = \frac{3\theta_p}{\alpha s \Delta} \left\{ 2\sqrt{z} x\sigma + \alpha_0 \sigma_0 \frac{\theta_p}{T} \left(\frac{T}{\theta_p} \right)^q \right\} \quad (36)$$

Из сравнения этой формулы с экспериментом впервые была определена ширина примесонной зоны в гелии. Из нее следует также температура фоновой локализации примесоннов

$$T_k = \theta_p \left(\frac{\sqrt{2z} \Delta}{\alpha_0 \sigma_0} \frac{\Delta}{\theta_p} \right)^{1/9} \quad (37)$$

и температура перехода из области дефектон-дефектонного в область дефектон-фононного рассеяния

$$T^* = T_k / \ell^{1/9} \quad (38)$$

Знание этих температур позволяет оценить длину пробега примесона. Формула (36) дает возможность также определить сечение дефектон-дефектонного рассеяния из данных по диффузии. При этом экспериментальные значения хорошо согласуются с предсказанными теоретически. Наконец, изучая экспериментально зависимость диффузии от молярного объема, из (36) можно получить "постоянную Грюнрайзена" для ширины зоны. Зная постоянную Грюнрайзена для сечения рассеяния \mathcal{K}_0 из данных по диффузии в области низкотемпературного плато, можно судить о зависимости сечения рассеяния от ширины зоны и выяснить, как меняется эта зависимость с концентрацией. Таким образом, например, отсутствие изменения \mathcal{K}_0 с концентрацией является подтверждением правильности закона (22).

В § 18 рассмотрена теплоемкость дефектонного газа как в случае сохраняющегося, так и несохраняющегося числа дефектонов. Проведены расчеты для кристаллов с простой кубической и о.п.к. решеткой. Проведено сравнение с экспериментальными данными в области "высокотемпературной аномалии", о которой предполагалось, что она имеет вакансионный характер, но удовлетворительного теоретического объяснения не было. Из этого сравнения определены параметры вакансионной зоны.

Как правило, наличие дефектов уменьшает теплопроводность кристалла, что связано с вызванным ими рассеянием фононов и других элементарных возбуждений. Этот эффект, в принципе, остается и после делокализации дефектов. Однако при достаточно низких температурах фоновая теплопроводность резко уменьшается, в то время как диффузия дефектонов возрастает. Дефектонная теплопроводность рассмотрена в § 19, где получены основные температурные и концентрационные зависимости как в "классической" ($T > T_0$), так и в существенно квантовой ($T < T_0$) области.

В главе IV рассмотрена структура квантового кристалла с дефектами. Наличие делокализованных дефектов ставит по-новому вопрос о структуре основного состояния квантового кристалла. Один из возможных эффектов (состояние с нулевыми дефектонами) рассматривался Андреевым и Лишицем. В диссертации рассмотрено "разупорядочивающее" действие дефектонов в основном состоянии. Рассмотрена модель квантового кристалла, состоящего из атомов двух сортов. Показано, что в такой системе взаимодействие между вакансиями сопровождается рождением и уничтожением примесонных возбуждений. Взаимодействие вакансии с примесонами может привести к локализации вакансии в определенной области кристалла, а также к такой перестройке атомов в этой области, которая обеспечивает максимальное понижение энергии кристалла за счет уширения вакансионной зоны.

Показано, что при ненулевой температуре между вакансиями и примесонами появляется эффективное отталкивание, не имеющее классического аналога. Оно является следствием того обстоятельства, что делокализация вакансии приводит к понижению энергии кристалла на величину $\Delta/2$. Для превращения вакансии в квазичастицу, однако, требуется хорошая периодичность решетки. Поэтому вакансион "устраивает" такую периодичность, вытесняя примеси. Число "очищенных" узлов одним вакансионном

$$N \approx \frac{4}{3} \pi \left(\frac{\pi A}{2Tx'} \right)^{3/5} \quad (39)$$

где x' — концентрация примесей в неочищенной области. Показано также, что вакансии с такой структурой имеют другую равновесную концентрацию x_v , зависящую от числа вытесненных примесей Nx :

$$x_v = \exp \left\{ -\frac{\varphi}{T} - \frac{5}{2} Nx \right\}, \quad (40)$$

где φ — энергия дна вакансионной зоны.

Другой эффект, связанный с конечностью ширины вакансионной зоны, получен в § 22. Показано, что из-за различных ширин вакансионных зон в двух фазах, свободная энергия кристалла с делокализованными вакансиями может оказаться ниже в той фазе, которая при локализованных вакансиях менее выгодна. Поэтому вокруг вакансионнов могут образоваться зародыши новой фазы. Число частиц в зародыше

$$N \approx \frac{4}{3} \pi \left(\frac{\pi A}{2q} \right)^{3/5}, \quad (41)$$

где q — теплота перехода.

Вторая часть диссертации посвящена построению последовательной нелинейной теории динамики деформируемого твердого тела с квазичастичными возбуждениями. В ней рассмотрение не ограничено рамками теории дефектов. Необходимость теории, объединяющей в единую систему

му уравнения теории упругости, кинетическое уравнение Больцмана и уравнения Максвелла ощущается и при рассмотрении таких традиционных объектов, как металлы и полупроводники, и ее отсутствие весьма сильно ограничивает возможности квазичастичного подхода. Принципиальная трудность при построении такой теории состоит в том, что квазиимпульс является хорошим квантовым числом только в идеальной периодической решетке. Закон дисперсии как периодическая функция от квазиимпульса определен тоже только в этой системе. С другой стороны, все законы сохранения и динамические уравнения записываются в лабораторной Л-системе отсчета. С точки зрения квазичастичного описания обе системы неравновправны, и характеристики квазичастиц в них не связаны преобразованиями Галилея. Для теории твердого тела эта проблема не новая, но до сих пор была решена только в линейном приближении.

Наиболее существенный вопрос при этом — описание динамики квазичастиц в нестационарно деформированной решетке. При точном описании все физические величины, характеризующие квазичастицу, как и в недеформированном кристалле, являются периодическими функциями квазиимпульса, однако их периоды являются функциями координат и времени. Границы зоны Бриллюэна зависят при этом не только от деформации в данный момент времени, но и от скорости решетки. Если провести разложение всех величин по степеням вектора смещения решетки, то в выражениях для физических величин возникает кажущаяся неперидичность, и кинетическое уравнение становится несовместимым с условием периодичности функции распределения.

Нелинейная теория деформируемого твердого тела с квазичастичными возмущениями построена в Главе V. Она включает в себя как составную часть нелинейную теорию упругости, которую удобно формулировать, вводя для описания положения узлов решетки дискретные координаты $N^\alpha(\vec{z}, t)$, отсчитывающие число шагов по решетке с начала координат до данного узла. Каждый шаг при этом совпадает с локальным значением элементарных векторов трансляций \vec{a}_α . Таким образом, расстояние между узлами

$$d\vec{z} = \vec{a}_\alpha dN^\alpha + \dot{\vec{u}} dt,$$

где $\dot{\vec{u}} = -\vec{a}_\alpha \dot{N}^\alpha$ — скорость решетки. Если рассматривать плотность энергии $E_0(s, g^{\alpha\beta})$ как функцию энтропии s и метрического тензора обратной решетки $g^{\alpha\beta} = \vec{a}^\alpha \vec{a}^\beta$, то в излагаемой теории потоки массы \vec{j} , энергии \vec{Q} и импульса $\vec{\Pi}_{ik}$ имеют вид

$$\begin{aligned} \vec{j} &= \rho_0 \dot{\vec{u}}, \\ \vec{Q} &= \frac{1}{2} \dot{\vec{u}}^2 \dot{\vec{u}} + \vec{a}^\alpha (\vec{a}^\beta \dot{\vec{u}}) \sigma_{\alpha\beta} + T s \dot{\vec{u}} + \vec{q}, \end{aligned} \quad (42)$$

$$\vec{\Pi}_{ik} = -(\sigma_{\alpha\beta} + F g_{\alpha\beta}) a_i^\alpha a_k^\beta + \rho_0 \dot{u}_i \dot{u}_k + \pi_{ik}, \quad (43)$$

где

$$\sigma_{\alpha\beta} = -2 \left(\frac{\partial E_0}{\partial g^{\alpha\beta}} \right)_s, \quad F = E - T s.$$

При этом диссипативная функция

$$R = -\vec{q} \frac{\nabla T}{T} - \pi_{ik} \frac{\partial \dot{u}_i}{\partial x_k} = \kappa_{ik} \frac{\partial T}{\partial x_i} \frac{\partial T}{\partial x_k} + \eta_{iklm} \dot{u}_{ik} \dot{u}_{lm},$$

а тензор скорости деформации

$$\dot{u}_{ik} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \dot{u}_i}{\partial x_k} + \frac{\partial \dot{u}_k}{\partial x_i} \right)$$

не предполагается малым.

Важное место в теории занимает установление связи между функцией Гамильтона $H(\vec{p}, \vec{z}, t)$ для квазичастицы в Л-системе и законом дисперсии $\varepsilon(\vec{k}, g^{\alpha\beta})$ в С-системе (связанной с решеткой). Для этого использовано то обстоятельство, что в квазиклассическом приближении фаза волновой функции затравочной частицы (электрона, примеси) совпадает с действием $S(N^\alpha, t)$, и использованы трансформационные свойства волновой функции. При этом канонически сопряженным с дискретной координатой N^α оказывается инвариантный квазиимпульс $k_\alpha = \frac{\partial S_0}{\partial N^\alpha} = \vec{k} \vec{a}_\alpha$ (S_0 — действие в С-системе). В этих обозначениях

$$H(\vec{p}, \vec{z}, t) = \varepsilon + \vec{p} \dot{\vec{u}} - \frac{1}{2} m \dot{\vec{u}}^2, \quad \vec{p} = k_\alpha \vec{a}^\alpha + m \dot{\vec{u}}, \quad (44)$$

где закон дисперсии $\varepsilon(\vec{a}_\alpha (\vec{p} - m \dot{\vec{u}}), g^{\alpha\beta})$ — периодическая функция \vec{p} с периодом $2\pi \hbar \vec{a}^\alpha$. Преобразование же энергии имеет галилеевский вид

$$\varepsilon(\vec{p}, \vec{z}, t) = \varepsilon + m \dot{\vec{u}} \frac{\partial \varepsilon}{\partial \vec{p}} + \frac{1}{2} m \dot{\vec{u}}^2. \quad (45)$$

Функция $H(\vec{p}, \vec{z}, t)$ неперидична, однако именно такая функция обеспечивает периодичность функции распределения квазичастиц $f(\vec{p}, \vec{z}, t)$ и инвариантность кинетического уравнения при замене $\vec{p} \rightarrow \vec{p} + 2\pi \hbar \vec{a}^\alpha$. В диссертации кинетическое уравнение записано в форме, не содержащей неперидических членов:

$$\begin{aligned} \frac{df}{dt} + \vec{a}_\alpha \frac{\partial \varepsilon}{\partial k_\alpha} \left(\frac{\partial f}{\partial \vec{z}} \right)_{k_\alpha} - \vec{a}_\alpha \frac{\partial f}{\partial k_\alpha} \left\{ \frac{d\dot{\vec{u}}}{dt} + (\nabla \varepsilon)_{k_\alpha} - \right. \\ \left. - m \frac{\partial \varepsilon}{\partial k_\beta} [\vec{a}_\beta, \text{rot} \dot{\vec{u}}] - \vec{F} \right\} = \hat{I} f, \end{aligned} \quad (46)$$

где \hat{I} — оператор столкновений, F — внешняя сила, $\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + (\dot{\vec{u}} \nabla)$ и дифференцирование по координатам и времени происходит при постоянных k_α .

Зависимость границ зоны Бриллюэна от координат и времени приводит к некоммутативности операций интегрирования по $d^3\rho$ и дифференцирования по \vec{z} и t . Коммутаторы определяются некоторыми интегралами от функции распределения по границе зоны Бриллюэна. В случаях, когда температура не мала по сравнению с шириной энергетической зоны квази-частиц, так же как и при сильном отклонении от равновесия, функция распределения f отлична от нуля на границе зоны Бриллюэна, и указанная некоммутативность существенна. Аналогичная ситуация возникает и в металлах с открытыми поверхностями Ферми. Эта трудность сильно ощущается в линейных теориях из-за указанной выше кажущейся неперидичности в выражениях для физических величин. Все эти трудности можно обойти, если вместо $f(k_\alpha, \vec{z}, t)$ ввести в рассмотрение перенормированную функцию

$$\varphi = f(k_\alpha, \vec{z}, t) / \sqrt{g}, \quad g = \det g_{\alpha\beta}.$$

Для нее кинетическое уравнение имеет вид

$$\begin{aligned} \dot{\varphi} + \operatorname{div} \left\{ (\vec{u} + \vec{a}_\alpha \frac{\partial \varepsilon}{\partial k_\alpha}) \varphi - \frac{\partial}{\partial k_\alpha} \left\{ \varphi \vec{a}_\alpha (\nabla \varepsilon + m \frac{d\vec{u}}{dt}) - \right. \right. \\ \left. \left. - m \varphi \frac{\partial \varepsilon}{\partial k_\beta} [\vec{a}_\alpha \vec{a}_\beta] \operatorname{rot} \vec{u} - \vec{a}_\alpha \vec{F} \varphi \right\} \right\} = \hat{I} \varphi, \end{aligned} \quad (47)$$

где дифференцирование по \vec{z} и t проводится при постоянных k_α . Результаты вычислений приводятся к обычным переменным (\vec{R}, \vec{z} или \vec{p}, \vec{z}) заменой

$$\vec{a}_\alpha \frac{\partial}{\partial k_\alpha} \rightarrow \frac{\partial}{\partial \vec{R}} \rightarrow \frac{\partial}{\partial \vec{p}},$$

а интегралы по зоне Бриллюэна связаны соотношением

$$\begin{aligned} \langle f \dots \rangle \equiv (2\pi\hbar)^{-3} \int d^3\rho f(\vec{\rho}, \vec{z}, t) \dots = \frac{1}{\sqrt{g}} (2\pi\hbar)^{-3} \int d^3k_\alpha f(k_\alpha, \vec{z}, t) \dots = \\ = (2\pi\hbar)^{-3} \int \varphi(k_\alpha, \vec{z}, t) \dots \equiv \langle \langle \varphi \dots \rangle \rangle; \int d\vec{z} = \int d^3N \sqrt{g}. \end{aligned} \quad (48)$$

Полная система уравнений динамики получена из законов сохранения. Из этой системы выведены уравнения динамики металлов. При этом потоки энергии \vec{Q}_i и импульса Π_{ik} имеют вид:

$$\begin{aligned} Q_i = E_\alpha \dot{u}_i + \langle \varepsilon \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} \rangle - \frac{1}{2} \dot{u}^2 J_i + (\Pi_{ik} + t_{ik}) \dot{u}_k + S_i \\ \Pi_{ik} = -t_{ik} - (\sigma_{\alpha\beta} - \langle \lambda_{\alpha\beta} f \rangle + E_\alpha g_{\alpha\beta}) a_i^\alpha a_k^\beta + \rho \dot{u}_i \dot{u}_k - \\ - \frac{m}{e} (\dot{u}_i j_{ek} + \dot{u}_k j_{ei}), \end{aligned} \quad (49)$$

где $t_{ik} = \frac{1}{4\pi} \{ B_i B_k - \frac{1}{2} B^2 \delta_{ik} \}$
максвелловский тензор магнитного поля,

$$\lambda_{\alpha\beta} = \frac{\partial \varepsilon}{\partial g^{\alpha\beta}}, \quad \vec{S} = \frac{c}{4\pi} [\vec{E}, \vec{B}], \quad \vec{J} = \rho \vec{u} - \frac{m}{e} \vec{j}_e,$$

а \vec{j}_e - плотность электрического тока в системе, связанной с решеткой:

$$\vec{j}_e = -e \langle \frac{\partial \varepsilon}{\partial \vec{p}} f \rangle. \quad (50)$$

Полная система уравнений динамики металла состоит, таким образом, из кинетического уравнения, уравнения сохранения импульса

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \vec{u}) + \nabla_k \Pi_{ik} = \frac{m}{e} \frac{\partial j_{ei}}{\partial t}, \quad (51)$$

уравнений Максвелла и уравнения квазинейтральности $2(2\pi\hbar)^{-3} \int f d^3k_\alpha = z$, где z - суммарный заряд ионов элементарной ячейки.

В § 30 получено уравнение движения для плотности квазиимпульса. Оно записано в виде закона сохранения. Показано, что в квазиравновесном случае тензор потока квазиимпульса диагонален и пропорционален термодинамическому потенциалу Ω .

В § 28 получена формула для плотности тока в металле при наличии произвольной нестационарной деформации. Показано, что ток имеет вид

$$\vec{j}_e = \hat{\sigma}(\vec{B} - \frac{mc}{e} \operatorname{rot} \vec{u}) (\vec{E} + \frac{1}{c} [\vec{u}, \vec{B}]) + \frac{1}{e} \nabla \mu + \frac{m}{e} \frac{d\vec{u}}{dt}, \quad (52)$$

где $\hat{\sigma}(\vec{B})$ - тензор проводимости недеформированного металла.

В § 29 получено распределение вакансион в твердом ^4He , вращающемся в сверхтекучем гелии-II.

Линеаризованная динамика рассмотрена в Главе VI. В применении к дефектонному газу линеаризованное кинетическое уравнение имеет вид уравнения Фоккера-Планка. Показано, что вращение кристалла влияет на диффузию через недиагональные компоненты коэффициента диффузии в импульсном пространстве. В применении к металлам вид кинетического уравнения подтверждает результаты, полученные другими авторами путем менее строгого рассмотрения.

Показано, что линеаризованное уравнение для квазиимпульса выражается только через производные от термодинамического потенциала Ω :

$$\frac{\partial^2 \Omega}{\partial v_i \partial v_k} \dot{V}_k = \frac{\partial \Omega}{\partial x_i}, \quad (53)$$

где \vec{V} - дрейфовая скорость газа, играющая роль термодинамической переменной. С помощью (53) рассмотрено распространение второго звука в диэлектриках, содержащих бозевские квазичастицы с произвольным законом дисперсии, как в случае сохраняющегося, так и несохраняющегося числа квазичастиц. Результаты выражены через термодинамические функции газа.

Часть III распространяет идеи квазичастичного подхода на нелинейные образования, среди которых наибольший интерес представляют образования солитонного типа. Показано, что одномерные солитонные возмущения могут существовать и в трехмерном кристалле.

В Главе VII рассмотрены нелинейные дефектоны поляронного типа в одномерных и трехмерных структурах. Природа нелинейности связана с зависимостью упругих постоянных и закона дисперсии от деформации кристалла. Как видно из (49), равновесному состоянию при $t_{i\kappa} = 0$, $\vec{u} = 0$ соответствует тензор напряжений

$$\Sigma_{i\kappa} = (\sigma_{\alpha\beta} + E_0 g_{\alpha\beta}) a_i^\alpha a_\kappa^\beta = \langle \lambda_{i\kappa} f \rangle. \quad (54)$$

Если $\lambda_{i\kappa}$ не зависят от волнового вектора, это равенство означает, что деформации кристалла пропорциональны распределению дефектонов $\langle f \rangle$. Показано, что аналогичное условие имеет место и при квантовом рассмотрении, и что оно приводит к появлению в уравнении Шредингера нелинейных членов типа самовоздействия. Задача усложняется наличием в гамильтониане дефектон-фононного взаимодействия члена с кинетической энергией, учитывающего роль изотопического эффекта. Математически задача сводится к нахождению солитонных решений нелинейного интегро-дифференциального уравнения

$$i\hbar \frac{\partial a}{\partial t} = (\varepsilon_0 + T_0 + U_0) a - \frac{1}{2} A \frac{\partial^2 a}{\partial x^2} - \frac{\lambda^2}{m s^2 (1-\beta^2)} |a|^2 a + \mu \frac{\lambda^2 \beta^2}{2 m s^2 (1-\beta^2)^2} |a|^4 a, \quad (55)$$

где $\mu = \frac{m_0 - m}{m}$, m_0 - масса дефекта, $\beta = v/s$, v - скорость солитона,

$$U_0 = \frac{\lambda^2}{1-\beta^2} \int \frac{|a|^4}{(1-\gamma|a|^2)^2} dx, \quad T_0 = \beta^2 U_0, \quad \gamma = \mu \frac{\beta^2}{1-\beta^2}.$$

Если $\mu > 0$, что соответствует тяжелому дефекту, искомое солитонное решение имеет вид

$$a(x, t) = \left(\frac{1}{L} \frac{\text{th} \eta}{\eta} \right)^{1/2} \frac{e^{i(kx - \omega t - \varphi)}}{\left[1 + \text{sech} \eta \cdot \text{ch} 2 \frac{x - x_0 - vt}{L} \right]^2}, \quad (56)$$

где $k = \hbar v/A$ - волновой вектор свободного дефектона,

$$L = \mathcal{L}_0 (1-\beta^2) \frac{\eta}{\text{th} \eta}, \quad \mathcal{L}_0 = \frac{m s^2 \Delta}{\lambda^2}, \quad \eta^2 = \frac{2}{3} \frac{\mu \beta^2}{\mathcal{L}_0 (1-\beta^2)^2} \\ \hbar \omega = \varepsilon_0 + \frac{\hbar^2 v^2}{\Delta} + (1+\beta^2) U_0 - \frac{\Delta}{(2L)^2}, \quad (57)$$

$$U_0 = \frac{\Delta}{(2\mathcal{L}_0)^2} \frac{1}{(1-\beta^2)^3 \eta^2} \left(11(1 - \text{th} \eta / \eta) - 3 \text{th}^2 \eta \right).$$

Если $\mu < 0$, решение уравнения (55) имеет вид, аналогичный (56) - (57), где следует заменить $\eta \rightarrow i\eta$.

Солитонные образования (нелинейные дефектоны) энергетически более выгодны, чем свободные дефектоны, а их эффективные массы близки по величине. Показано также, что нелинейные дефектоны солитонного типа возникают вблизи дна энергетической зоны. Так, если эффективная масса свободного дефектона отрицательна, они появляются в коротковолновой части спектра.

В Главе VIII построена квантовая теория краудионов. С точки зрения нелинейной теории краудион является уникальной моделью одномерного образования в трехмерном кристалле, выгодно отличающейся от квазиодномерных структур, составленных из слабо взаимодействующих цепочек. В диссертации использована модель Френкеля-Конторовой, к которой добавлено взаимодействие с фононами. Показано, что краудионная конфигурация в деформированной решетке имеет вид

$$\xi(n, x) = \frac{2}{\pi} (1 + \Delta_{xx}) \arctg \left(e^{\frac{x-n}{\ell v}} \right), \quad (58)$$

где длина краудиона

$$\ell_v = \ell \sqrt{1 - v^2/c^2}, \quad \ell = (1 + \Delta_{xx}) \left(\frac{m c^2}{2A(\Delta)} \right)^{1/2}$$

m - масса атома, c - скорость звука в краудионной цепочке, A - амплитуда периодического потенциала, созданного атомами решетки, $\Delta_{i\kappa}$ - тензор деформации; ось x выбрана вдоль краудионной цепочки.

Энергия краудионной конфигурации в континуальном приближении равна

$$E = \frac{2m c^2}{\pi^2 \ell \sqrt{1-\beta^2}} (1 + \varepsilon_{i\kappa} \Delta_{i\kappa}), \quad \beta = v/c, \quad (59)$$

где $\varepsilon_{i\kappa}$ - коэффициенты в разложении энергии по малым деформациям.

Эффективная масса μ краудиона уменьшается с ростом его длины

$$\mu = \frac{2m}{\pi^2 \ell}.$$

Таким образом, в континуальном приближении краудион является солитоном топологического типа, динамические характеристики которого не зависят от координаты x его центра. При классическом рассмотрении это вырождение снимается, если учесть дискретность решетки. В диссертации показано, что она проявляется в создании эффективного периодического потенциала $U(x)$ с периодом решетки и экспоненциально малой глубиной:

$$U(x) = \frac{1}{2} U_1 \cos 2\pi x, \quad U_1 \sim m c^2 e^{-\pi^2 \ell} \quad (60)$$

Однако, как показано в диссертации, задача о поведении краудиона в таком поле не является классической, а квантовой. Для оценки величины квантовых эффектов введен параметр $\delta = U_c \mu a^2 / \hbar^2$, аналогичный параметру де Бура. Малость этого параметра означает, что длина волны краудиона много больше постоянной решетки. Таким образом, благодаря квантовым эффектам краудион делокализуется и превращается в квазичастицу – краудионную волну. Найден закон дисперсии и эффективная масса нового возбуждения.

Показано, что краудионная волна может двигаться со скоростью, больше скорости звука в кристалле. Рассмотрено черенковское излучение фононов краудионной волной.

В последней Главе IX рассматриваются солитонные волны в квазиодномерных структурах. Электрон-фононное взаимодействие в таких структурах может привести к образованию солитонов поляронного типа. Этот случай рассмотрен в § 43. Возможны также ситуации, когда электрон-фононное взаимодействие приводит к перестройке классического основного состояния (переход Пайерлса) с удвоением периода решетки. При этом каждый атом цепочки оказывается в "двойной яме". Аналогичная ситуация возникает в полиацетиле, где расположение атомов в определенных минимумах связано с чередованием двойных и единичных электронных связей. Замена одной последовательности, зеркальной ей, приводит к структурному дефекту, аналогичному блоховской стене в ферромагнетиках. Такие дефекты описываются топологическими солитонами (кинками) и играют важную роль в проводимости вещества. Одна из проблем здесь – проблема пиннинга солитонов на решетке. В диссертации показано, что в модели φ^4 и модели Шу-Шриффера-Хеегера квантовые эффекты приводят к делокализации солитона и к его превращению в квазичастицу – солитонную волну. Поэтому в этих моделях пиннинг солитонов на решетке невозможен, и их локализация должна наблюдаться вблизи примесей и других дефектов решетки.

В Заключение подводятся итоги и проводится краткое обсуждение наиболее существенных результатов.

ПУБЛИКАЦИИ АВТОРА ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

1. Пушкар Д.И. Микроскопическая квантовая теория дефектов при низких температурах. – ЖЭТФ, 1970, т. 59, № 5, с. 1755 – 1764.
2. Пушкар Д.И. Кинетика дефектонов в кристаллах. – X Международная конференция стран СЭВ по физике и технике низких температур, Варна 1971. – Тезисы докладов, с. 73 – 74.

3. Пушкар Д.И. Квантовая теория дефектов в кристаллах при низких температурах. –
 - а) Дисс. ... канд. физ.-мат. наук, МГУ, Москва, 1972, 101 с.
 - б) Автореферат дисс. ... канд. физ.-мат. наук, МГУ, Москва, 1972, 10 с.
4. Пушкар Д.И., Пушкар Х.И. Кинетика на дефектоните в квантовите кристалли /Кинетика дефектонов в квантовых кристаллах/. – Тезисы VI Национальной конференции по физике, София, 1973, с. 26.
5. Пушкар Д.И. К диффузии примесонов в твердом ${}^4\text{He}$. – Письма в ЖЭТФ, 1974, т. 19, № 12, с. 751 – 753.
6. Пушкар Д.И. Диффузия на дефектоните в квантовите кристалли /Диффузия дефектонов в квантовых кристаллах/. – Сокр. доклады II Национальной конференции молодых физиков, София, 1974, Секция теор. физ., с. 47 – 48.
7. Пушкар Д.И. Энергетический спектр дефектонов в квантовых кристаллах. – ФНТ, 1975, т. 1, № 5, с. 581 – 585
8. Пушкар Д.И. Кинетика дефектонов в квантовых кристаллах. – ФНТ, 1975, т. 1, № 5, с. 586 – 589.
9. Пушкар Д.И. Диффузия дефектонов в квантовых кристаллах. – ЖЭТФ, 1975, т. 68, № 4, с. 1471 – 1476.
10. Pushkarov D.I., Pushkarov Kh.I. Delocalization and Diffusion of Defects in Quantum Crystals at $T=0$. – Phys.Stat.Sol.(b), 1975, v. 67, No. 1, p. K23 – K25
11. Pushkarov D.I., Pushkarov Kh.I. Defecton Diffusion in the very Quantum Region. – Phys.Stat.Sol.(b), 1976, v. 74, No. 2, p. K97 – K100.
12. Pushkarov D.I., Pushkarov Kh.I. Solitary Defectons in One-Dimensional Quantum Crystals. –
 - а) Trieste 1976, 10 p. (Internal Report / International Centre for Theor. Phys. IC/76/124),
 - б) J.Phys.C: Solid State Phys. 1977, v.10, No.19, p. 3711 – 3716.
13. Пушкар Д.И., Койнов Зл. К теории дефектонов в квантовых кристаллах. – ЖЭТФ, 1978, т. 74, № 5, с. 1845 – 1852.
14. Pushkarov D.I. On the Theory of Thermal Conductivity in Quantum Crystals. – Phys.Stat.Sol.(b), 1977, v. 80, No. 1, p. 295 – 300.
15. Пушкар Д.И. Влияние вакансионных на структуру кристаллической решетки. – Письма в ЖЭТФ, 1978, т. 27, № 6, с. 359 – 361.
16. Пушкар Д.И. Квантовая теория краудионов при низких температурах. – ЖЭТФ, 1973, т. 64, № 2, с. 634 – 642.
17. Pushkarov Kh.I., Pushkarov D.I. Soliton Solutions in Some Non-linear Schrödinger-like equations. – Rep.Math.Phys. 1980, v. 17, No.1, p. 37 – 40.

18. Pushkarov Kh.I., Pushkarov D.I. Solitons in Condensed Matter.- in: "Optical and Acoustic Waves in Solids - Modern Topics", ed. M.Borissov, World Scientific Publ., Singapore, 1983, p. 229-257
19. Pushkarov D.I. Quantum Behaviour and Phonon Emission by Solitons in Crystals at Low Temperatures.- in: "Nonlinear Phenomena in Solids - Modern Topics".- ed. M.Borissov, World Scientific Publ. Singapore, 1985, p. 119 - 130.
20. Pushkarov D.I. Quantum Behaviour of Solitons in Lattice Structures.- a) Dubna 1984, 10 p. (Preprint/Joint Inst.for Nuclear Research, E17-84-752)
b) Solid State Commun. 1985, v. 54, No.5, p. 465 - 469 .
21. Pushkarov D.I. On the Defecton Statistics in Quantum Crystals.- Phys.Stat.Sol.(b), 1986, v.133, No. 2, p. 525 - 531.
22. Пушкарлов Д.И. Дефектонный второй звук в квантовых кристаллах.- Дубна 1985, 7 с. (Препринт/Объед. ин-т ядер.исслед. P17-85-224).
23. Пушкарлов Д.И. О статистике дефектонов в квантовых кристаллах.- Дубна 1985, 6 с. (Сообщение Объед.ин-та ядер.исслед. P17-85-248).
24. Андреев А.Ф., Пушкарлов Д.И. Уравнения динамики металлов.- а) ЖЭТФ, 1985, т. 89, № 5, с. 1883 - 1889 ;
б) Дубна, 1985, 10 с. (Препринт/Объед. ин-т ядер. исслед. P17-85-487).
25. Пушкарлов Д.И. Структура квантового кристалла с дефектами.- III Международный симпозиум по избранным проблемам статистической механики, Дубна, 1984, Сборник аннотаций, с. 105.
26. Пушкарлов Д.И. Излучение фононов солитоном в кристаллах при низких температурах.- в кн.: Проблемы статистической механики, Дубна, 1984, изд. Объед. ин-та ядер. исслед. Д17-84-850, т. II, с. 205 - 210.
27. Pushkarov D.I. Dynamics Theory of Quantum Crystals with Delocalized Defects.- Dubna 1985 - 15 p. (Preprint/Joint Inst. for Nucl. Research, E17-85-531).
28. Pushkarov D.I. Solitary Bound States of Magnons and Lattice Deformation.- Trieste, 1977, 21 p. (Intern. Report/International Centre for Theor.Phys. IC/77/142).

Рукопись поступила в издательский отдел
10 апреля 1986 года.