

С36

П912

вып. 39



ЛЕНЦИИ
ДЛЯ МОЛОДЫХ
УЧЕНЫХ

Димитр И.Пушкаргов

Дефектоны в кристаллах

ДУБНА

Зил 21102

10-11-87

ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

ЛЕКЦИИ ДЛЯ МОЛОДЫХ УЧЕНЫХ

P17-87-177

Выпуск 39

Димитр И.Пушкаргов

РЕДАКЦИОННЫЙ СОВЕТ

- Д.В.Ширков — председатель
- А.Н.Сисакян — зам. председателя
- А.Т.Филиппов — зам. председателя
- Г.М.Гавриленко
- В.Б.Беляев
- В.П.Гердт
- Е.П.Жидков
- В.А.Загребнов
- Г.В.Мицельмахер
- В.А.Никитин
- Л.М.Сороко
- В.Р.Саранцева

ДЕФЕКТОНЫ В КРИСТАЛЛАХ

C36
P912

(Метод квазичастиц в квантовой теории дефектов)

128164

Дубна 1987

Объединенный институт
ядерных исследований
БИБЛИОТЕКА

"Страницы этой книги представляют собою беспристрастный отчет о действительно происходивших событиях"

Дж.К.Джером. "Трое в лодке..."

СО Д Е Р Ж А Н И Е

ПРЕДИСЛОВИЕ	5
ВВЕДЕНИЕ	6
Глава I. Энергетический спектр дефектонов в квантовых кристаллах	14
§ 1. Идеальные квантовые кристаллы. Твердый гелий	14
§ 2. Дефекты в классических и квантовых кристаллах	17
§ 3. Примесонный спектр. Теория возмущений	18
§ 4. Вакансионный спектр	19
Глава II. Статистика дефектонов	25
§ 5. Коллективные свойства дефектонов в трехмерном кристалле	26
§ 6. Кинематическое взаимодействие	29
§ 7. Одномерный случай	31
§ 8. Теплоемкость дефектонного газа	32
Глава III. Кинетика дефектонов	37
§ 9. Исторический обзор	37
§ 10. Делокализация дефекта	39
§ 11. Рассеяние фононов на дефектонах	41
§ 12. Температурная зависимость коэффициента диффузии	44
§ 13. Рассеяние дефектонов на дефектонах	47
§ 14. Низкотемпературная диффузия	51
§ 15. Сравнение с экспериментом. Определение ширины примесонной зоны из данных по диффузии	54
Глава IV. Структура квантового кристалла с дефектами	61
§ 16. Основное состояние	61
§ 17. Вытеснение примесей вакансиями	64
§ 18. Вакансионные зародыши новой фазы	66
Глава V. Динамика деформируемого кристалла с квазичастичными возбуждениями	68
§ 19. Нелинейная теория упругости	68
§ 20. Уравнения механики. Энергия и функция Гамильтона квазичастицы	72
§ 21. Кинетическое уравнение	75
§ 22. Законы сохранения и уравнения динамики	79
§ 23. Уравнения динамики металлов	81
§ 24. Плотность тока в деформируемом металле	83
§ 25. "Закон сохранения" квазиимпульса	85
§ 26. Распределение дефектонов во вращающемся ^4He	88
§ 27. Интеграл столкновений. Диффузия дефектонов во вращающемся квантовом кристалле	90

§ 28. Распространение второго звука	92
§ 29. Линеаризованное кинетическое уравнение	94
Глава VI. Нелинейные дефектоны. Дефектон-решеточное взаимодействие	96
§ 30. Модель	96
§ 31. Одномерный случай	100
§ 32. Изотопический эффект. Высшие степени нелинейности.	102
§ Глава VII. Квантовая теория краудионов	104
§ 33. Краудионная конфигурация	104
§ 34. Роль дискретности решетки. Проблема пиннинга	106
§ 35. Краудион как квазичастица. Краудионная волна	107
§ 36. Взаимодействие с фононами	108
Глава VIII. Солитонные волны в пайерлсовских системах.	110
§ 37. Вычисление солитонных характеристик с помощью только одночастичного потенциала	111
§ 38. Модель Шу-Шриффера-Хигера	113
§ 39. Еще раз о пиннинге кинков на решетке	115
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	116
Литература	117

*"Джордж сказал:
- Так ничего не выйдет! Нужно думать не
о том, что нам может пригодиться, а только
о том, без чего мы не сможем обойтись".*

Дж.К.Джером. "Трое в лодке..."

ПРЕДИСЛОВИЕ

В последние годы в физике конденсированного состояния появилась новая область, получившая название физики квантовых кристаллов. В широком смысле слова квантовые кристаллы – это твердые тела, в которых нулевые колебания по одной или нескольким степеням свободы относительно велики, что приводит к существованию нового /по сравнению с другими твердыми телами/ вида движения – квантового туннельного перехода атомов в соседние узлы решетки. А дозволенные виды движения – важнейшая характеристика системы! Она так же важна, как и структура. Поэтому наличие нового вида движения равнозначно существованию новой системы. Что же касается квантовых кристаллов, то туннельное движение принесло им славу нового состояния вещества. При этом наиболее ярко новые, квантовые эффекты проявились в поведении дефектов. Их теоретическому и экспериментальному исследованию посвящена уже обширная литература, охватывающая как "типичные" квантовые кристаллы гелия, так и тяжелые металлы с легкими примесями, диффузию мюонов в металлах и др.

Настоящая книга отражает содержание курса лекций, прочитанного автором в Объединенном институте ядерных исследований, и не ставит целью дать исчерпывающий обзор по теории дефектов в квантовых кристаллах. В рамках ее объема это невозможно. Поэтому главное внимание в ней уделено физической картине тех принципиально новых идей и результатов, которые характеризуют эту новую область физики конденсированного состояния. При этом основное место занимает рассмотрение квазичастичного поведения дефектов в кристаллах гелия.

В книгу включена также общая нелинейная теория динамики деформируемого твердого тела при наличии в нем квазичастиц с произвольным законом дисперсии. Она полезна для более глубокого понимания и получения новых точных результатов при рассмотрении широкого круга явлений как в квантовых кристаллах, так и в таких традиционных твердых телах, как металлы и диэлектрики.

Наконец, кратко рассмотрено распространение идей квазичастичного подхода на сложные нелинейные образования солитонного типа в квазиодномерных и трехмерных структурах.

Многие из указанных вопросов обсуждались автором в различное время и по различным поводам с А.Ф.Андреевым, М.И.Кагановым, А.Э.Мейеровичем, А.С.Шумовским. Считаю своим приятным долгом выразить им свою глубокую благодарность.

"Главное достоинство нашей книги - это не ее литературный стиль, и даже не изобилие содержащихся в ней разного рода полезных сведений, а ее правдивость"

Дж.К. Джером. "Трое в лодке..."

ВВЕДЕНИЕ

Описание любой физической системы связано с использованием определенных сохраняющихся /для замкнутой системы/ величин /импульс, энергия, магнитный момент, различные квантовые числа и т.д./, а основные физические уравнения описывают, в конечном итоге, эволюцию этих величин в пространстве и времени под влиянием различных воздействий*. Основные же законы сохранения, а следовательно, и выбор этих величин, тесно связаны со свойствами симметрии пространства и времени. Последнее обстоятельство имеет исключительное значение при построении теории твердого тела, в котором свойства пространства задаются симметрией кристаллической решетки.

Наиболее важное фундаментальное свойство решетки - ее трансляционная симметрия. Поэтому любые нарушения идеальной периодичности оказывают существенное влияние на физические свойства кристалла. Основные причины, нарушающие трансляционную инвариантность решетки, это, с одной стороны, колебания узлов решетки, а с другой - дефекты, связанные с различными примесями, вакансиями, дислокациями, дефектами упаковки и т.д. К дефектам иногда относят также электроны и дырки в полупроводниках, связанные состояния электронов с деформацией решетки /поляроны/ и др. Влияние дефектов на динамику решетки, а также на спектр и кинетику элементарных возбуждений в кристалле изучаются давно. В результате стало ясно, что свойства реальных твердых тел определяются не только свойствами идеальной периодической структуры, но также /и в не меньшей степени/ "нарушениями" кристаллического порядка. Примером тому является вся современная микроэлектроника, которая, по-существу, построена на использовании разнообразных свойств дефектов. Важно отметить при этом, что если концентрация дефектов мала, то вносимый ими беспорядок следует рассматривать на фоне идеальной кристаллической структуры. Это обстоятельство существенно при выборе удобных параметров для описания рассматриваемых явлений.

Основным аппаратом современной теории твердого тела /как и конденсированного состояния вообще/ является квантовая механика многих тел. Основные понятия квантовой механики - энергетический спектр и

* Это связано с тем, что само понятие физическая система /частица, тело и т.д./ приобретает смысл только в меру возможности ее выделения, т.е. пренебрежения ее взаимодействием с другими системами.

квантовое состояние - легли в основу квазичастичного подхода, явившегося одним из наиболее плодотворных методов в физике конденсированных сред. Важнейшим его достоинством является то, что он позволяет создать физически ясную и наглядную картину при интерпретации сложнейших явлений. Благодаря ему поведение системы из большого числа сильно взаимодействующих частиц /каким и является твердое тело/ стало возможным описывать с помощью ее коллективных элементарных возбуждений, рассматриваемых как газ слабо взаимодействующих между собой квазичастиц. При этом, как правило, каждому типу движения или взаимодействия соответствует свой тип квазичастиц.

Квазичастичный подход не является "привилегией" теории твердого тела. Его с успехом можно применять к любой системе, в которой "элементарные носители явления" не совпадают со структурными единицами вещества. Типичными примерами в этом отношении являются теория сверхтекучести Ландау¹, теория ферми-жидкости², теория неидеального бозегаза Боголюбова³, квазичастичная модель ядра⁴ и др. Самое изящное творение теории твердого тела - зонная теория - явилось результатом последовательного применения квазичастичного подхода к электронам в решетке.

Проследим кратко на этом, ставшем уже классическим, примере, те принципиально новые моменты, которые внесены квантовым рассмотрением.

Первое новое понятие - это квантовое состояние. Электрон описывается не своей координатой и скоростью, а блоховской волновой функцией

$$\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = u_{\vec{k}}(\vec{r}) e^{i\vec{k}\vec{r}}$$

Для характеристики состояния используются определенные квантовые числа, среди которых важное значение имеет квазиволновой вектор \vec{k} /или квазиимпульс $\hbar\vec{k}$ /. Аналогично тому, как сохранение обычного импульса связано с однородностью пространства, т.е. с эквивалентностью бесконечно близких точек, квазиимпульс есть та величина, которая связана с трансляционной симметрией решетки, т.е. с эквивалентностью точек, отстоящих друг от друга на период решетки. Существенно, что в результате периодичности решетки все физически различные значения ограничены в некоторой конечной области, называемой зоной Бриллюэна. Последнюю можно наглядно изобразить как элементарную ячейку бесконечной периодической решетки в k -пространстве.

Другое понятие принципиальной важности, внесенное квантовой механикой, это энергетический спектр. На смену простой классической квадратичной зависимости энергии от импульса появилась сложная функция энергии от квазиимпульса и других квантовых чисел, названная законом дисперсии $\mathcal{E}(\vec{p})$. Закон дисперсии отражает свойства симметрии решетки и взаимодействий в кристалле. Как и все другие физические величины,

он является периодической функцией \vec{p} . В идеальной периодической решетке $\mathcal{E}(\vec{p})$ играет роль функции Гамильтона. Так, скорость квази-частицы

$$\vec{v} = \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \vec{p}}.$$

Естественно, при сложном законе дисперсии скорость и квазиимпульс, вообще говоря, неколлинеарны.

Таким образом, квантовое рассмотрение приводит к замене затравочных частиц и периодического потенциала решетки новыми объектами - квазичастицами со сложными законами дисперсии. Оно ставит, однако, и новые проблемы, так как для квазичастиц необходимо еще построить новую механику, новую теорию рассеяния, статистику и т.д. Очень существенно для дальнейшего также то, что в новом описании кристаллическая решетка стала привилегированной системой отсчета. Важное следствие этого - отсутствие галилеевских преобразований для характеристик квазичастицы. Мы еще вернемся к этому вопросу в главе V.

Поскольку при построении зонной теории речь шла о заведомо квантовых объектах /электронах/, квантовомеханическое рассмотрение не вызвало сомнения как единственно правильное. Одновременно с этим, однако, взгляды на решетку оставались почти классическими, оправданием чему служила большая масса ионов. В результате сложилась физическая картина, в которой электрон был полностью делокализован и принадлежал всем атомам кристалла, а атомы /ионы/ считались хорошо локализованными в узлах решетки. Им разрешались только небольшие нулевые колебания вокруг их равновесных положений*. Таким образом, атомы можно было пронумеровать, квантовой тождественностью они не обладали. Естественно, такое же описание использовалось и для точечных дефектов /вакансий, примесей и др./.

Основное состояние такого кристалла - это идеальная периодическая структура, в которой все узлы заняты собственными атомами, а число атомов в точности равно числу узлов, что в этой картине /но не в квантовой/ означает и отсутствие атомов в межузельных пространствах. Каждый узел является, при этом, дном потенциальной ямы, в которой колеблется определенный атом. Квантовый характер его движения проявляется

* Именно этим в классической теории отличается твердое тело от жидкости, где атомы могут проходить большие расстояния. На самом же деле существенны различия в характерных видах движения - твердотельному виду движения соответствуют колебания узлов /совпадающих с атомами только в классической картине/.

только в наличии нулевых колебаний. Соседние узлы решетки отделены непроницаемыми потенциальными барьерами, которые можно преодолеть только при $T \neq 0$ за счет тепловой энергии. Вероятность соответствующего надбарьерного перехода $\sim \exp(-e_0/T)$, где e_0 - энергия активации. Соответственно частота перескоков атомов пропорциональна этой вероятности, а осуществление каждого отдельного акта перехода связано с тепловыми флуктуациями в системе.

Для большинства твердых тел такое описание вполне оправдано, поскольку ширина волновых функций атомов в решетке /или, что практически то же, амплитуда нулевых колебаний/ много меньше межузельных расстояний, и перекрытием волновых функций соседних атомов можно пренебречь. Для оценки относительной амплитуды нулевых колебаний можно использовать параметр де-Бура

$$\Lambda = \frac{\hbar}{a\sqrt{m\epsilon}}, \quad /B1/$$

где m - масса атома, a - межузельное расстояние, ϵ - характерная энергия взаимодействия атомов. Для большинства кристаллов $\Lambda \leq 10^{-2}$ и волновые функции атомов практически не перекрываются. Существуют, однако, кристаллы, для которых значение Λ не мало. Так, например, для твердых изотопов гелия, где взаимодействие между атомами хорошо описывается потенциалом Леннарда-Джонса^{5,6}

$$U(r) = 4\epsilon \left\{ \left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - 2 \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right\} \quad /B2/$$

с $\epsilon = 10,22$ К и $\sigma = 2,87$ Å, значения параметров де Бура равны

$$\Lambda_{He^4} = 0,38, \quad \Lambda_{He^3} = 0,44. \quad /B3/$$

Такие кристаллы, в которых амплитуды нулевых колебаний не малы, и перекрытие волновых функций соседних атомов заметно отлично от нуля, принято называть квантовыми. В некоторых кристаллах могут быть велики амплитуды только некоторых колебаний, например, примесей водорода в матрицах тяжелых металлов /цирконий, ниобий, палладий и др./⁷. Такие кристаллы являются квантовыми относительно соответствующих степеней свободы.

Наконец, есть ситуации, в которых дефекты образуют вокруг себя сложные конфигурации /краудины, солитоны в квазиодномерных структурах/^{8,9,10}, составленные из большого числа атомов, но обладающие малой эффективной массой. Эффективный периодический потенциал для таких образований недостаточно глубок, чтобы локализовать их. В этих случаях величина, соответствующая параметру де Бура, может быть даже много больше единицы, и полуклассическое рассмотрение таких дефектов становится неадекватным.

Во всех этих ситуациях теория дефектов должна строиться с учетом квантовых эффектов. Следует иметь в виду, что квантовые эффекты оказываются фундаментально важными. Они приводят к появлению нового типа движения – квантового туннельного "протекания" атомов. А допустимый вид движения – первостепенная характеристика любой системы из многих частиц. Она должна входить в теоретическую модель с такой же необходимостью, как и структура. Как уже указывалось /см. сноску на стр. 8/, твердое тело и жидкость отличаются не только структурой, но и характерными видами движения. Наличие же нового, туннельного движения – главная причина, по которой можно назвать квантовые кристаллы новым состоянием вещества. Оно радикально меняет также поведение дефектов – они делокализуются и превращаются в новые элементарные возбуждения, получившие название дефектонов. Согласно принципам квантовой механики, состояние дефектона характеризуется уже не его положением в кристалле, а квазимпульсом и законом дисперсии. Таким образом дефектон движется сквозь кристалл как свободная частица. Важное отличие зонного /дефектонного/ движения от прыжкового перемещения проявляется также в том, что соответствующая ему частота переходов пропорциональна не вероятности, а амплитуде вероятности туннельного перехода*.

Первая, феноменологическая теория дефектов в квантовых кристаллах была предложена в 1969 г. А.Ф. Андреевым и И.М. Лифшицем¹¹. В ней точечные дефекты рассматриваются как делокализованные возбуждения, практически свободно движущиеся сквозь кристалл. В результате диффузия дефектов приобретает характерные черты течения "дефектонной жидкости". Авторы предположили, что такая жидкость может существовать и при нулевой температуре. Квазичастицы, из которых она составлена, получили название нулевых дефектонов. Кристалл с нулевыми дефектонами не является ни жидкостью, ни твердым телом. В нем число узлов отличается от числа атомов в кристалле. Поэтому возможны два вида движения. Первый из них связан с движением узлов решетки и характерен для упругого твердого тела. Второй тип движения связан с переносом массы дефектонами при неподвижных узлах решетки, и характерен для жидкости. Авторы исследовали также макроскопические уравнения движения для кристалла с нулевыми вакансиями и показали, что в такой системе возможен сверхтекучий поток массы.

* Это можно понять из соотношения неопределенностей $\Delta E \cdot \tau \sim \hbar$, если учесть, что ΔE совпадает с расщеплением уровней, обусловленным туннельной проникаемостью барьера, разделяющего соседние узлы, т.е. с амплитудой вероятности перехода A . Тогда частота переходов

$$\tau^{-1} \sim A/\hbar.$$

Меньше года спустя появилась работа Гайера и Зейна¹², посвященная спектру примесей и возможности его обнаружения методом ядерного магнитного резонанса. Однако в ней не указывался надежный способ вычисления параметров, введенных теорией. В том же году автором была опубликована первая микроскопическая теория дефектонов¹³, связывающая их характеристики с макроскопическими характеристиками кристалла. В ней получен закон дисперсии дефектона, рассмотрено его рассеяние на фононах и дефектонах, найдена температурная зависимость его длины свободного пробега*, указана принципиальная роль узости дефектонной зоны в процессах рассеяния, предсказано существование гигантских сечений рассеяния и явление фононной локализации. Расчеты вакансионной зоны¹⁴ по этой теории показали, что ее ширина в кристаллах гелия порядка нескольких градусов.

Квазичастичное поведение примесей в твердом гелии впервые было обнаружено Ричардсом, Поупом и Уайдомом¹⁵ по концентрационной зависимости коэффициента диффузии. Однако оцененная ими амплитуда перехода для дефекта оказалась на 2-3 порядка меньше по сравнению с той же величиной для собственного атома. Объяснения этой малости не было. В том же году Ландесман и Винтер¹⁶ предложили для примесонной диффузии другую концентрационную зависимость, но результат улучшился незначительно. В 1973 г. в работах Есельсона, Михеева, Григорьева и др.¹⁷⁻¹⁹ была измерена не только концентрационная, но и температурная зависимость коэффициента диффузии, предсказанная в^{11,13}, однако оценка амплитуды перехода /обменного интеграла/ от этого не изменилась. Объяснение возникшему парадоксу было найдено автором²⁰ – оно связано с тем, что при обработке экспериментальных данных не были приняты во внимание гигантские сечения дефектон-дефектонного рассеяния и другие особенности квантовой диффузии, указанные в^{13,14}. Дальнейшие экспериментальные исследования полностью подтвердили правильность теории. Таким образом существование дефектонов стало непреложным фактом.

Естественно, квазичастичное поведение дефектонов проявляется не только в диффузии. Однако для становления всей теории дефектонов квантовая диффузия сыграла решающую роль. На ней не только были проверены основные принципы квазичастичного описания; она позволила также оценить энергетические характеристики дефектонов. Из сравнения теории с экспериментом впервые была получена ширина примесонной зоны²⁰. Она действительно оказалась чрезвычайно узкой – $\Delta \sim 10^{-4}$ К /на 4-5 по-

* Спектр, рассеяние и длина свободного пробега составили содержание дипломной работы автора /МГУ, 1968/. Результаты температурной зависимости длины свободного пробега докладывались автором также на Второй всесоюзной конференции по теории твердого тела /Москва, 1969/.

рядков меньше ширины вакансионной зоны/. Большая разница в ширинах зоны примесоннов и вакансионнов обуславливает, как мы увидим дальше, существенное различие в поведении этих квазичастиц.

Узость примесонной зоны важна не только как причина существования гигантских сечений рассеяния. Как показал Андреев^{21,22}, тот факт, что она является наименьшим энергетическим параметром, имеет для диффузии принципиальное значение. Другие эффекты, связанные с узостью дефектонной зоны, были предсказаны в^{23,24}; среди них - возможность образования своеобразных квазичастиц, составленных из связанных между собой дефектонов. При этом особый интерес представляют двумерные и одномерные квазичастицы, движение которых в трехмерном кристалле ограничено в плоскости или на прямой.

Совершенно иначе проявляют себя широкозонные вакансии. Их влияние на структуру кристаллической решетки рассматривалось в работах автора^{10,25}, где предсказаны два новых эффекта - вакансионное очищение кристалла от примесей и вакансионное образование зародышей новой фазы. Андреевым²⁶ была рассмотрена структура вакансий в твердом³Ne и предсказана возможность существования вакансионного ферромагнетика /см. также²⁷/. Рассеяние вакансионнов на флуктуациях спина и на примесях в модели Хаббарда исследовано Пирадашвили²⁸. Кинетика вакансионнов в модели решеточного газа рассматривалась Варданяном²⁹. Вкладу же дефектонов в теплоемкость и другие термодинамические характеристики тела посвящены работы^{10,30-32}.

Предсказанное в работе Андреева и Лифшица¹¹ явление сверхтекучести квантового кристалла вызвало поток теоретических и экспериментальных работ³³⁻³⁶. Среди них отметим работу Лиу³⁵ о возможности появления сверхтекучего потока энтропии.

При увеличении концентрации дефектонов взаимодействие между ними усиливается, и они локализуются. Кинетика дефектонов в условиях самолокализации развивалась в работах Кагана с сотр.³⁷⁻³⁸.

Другим типом дефектонов, связанных с делокализацией сложных многочастичных образований солитонного вида, являются нелинейные дефектоны /солитонные волны/. Они были введены автором^{8,14} сначала для описания краудинонов в кристаллах. Впоследствии оказалось, что аналогичные эффекты должны иметь место также в квазиодномерных структурах типа полиацетилена^{9,10}, в которых структурные дефекты приводят к нелинейным образованиям солитонного типа. Квазичастичное описание таких объектов позволяет использовать при их рассмотрении хорошо развитые методы квантовой механики. С их помощью, например, рассмотрено "черенковское" излучение фононов краудиноной волной⁸.

К нелинейным дефектонам относятся также солитонные образования поляронного типа, представляющие связанные состояния дефектона с фононами³⁹⁻⁴¹.

Важность нелинейных эффектов поставила задачу о построении последовательной нелинейной теории динамики кристалла при наличии квазичастичных возбуждений с произвольным законом дисперсии. Такая теория должна содержать самосогласованную систему, состоящую из уравнений нелинейной теории упругости, кинетического уравнения для квазичастичного газа, и /в случае заряженных квазичастиц/ уравнений Максвелла. Наиболее существенный вопрос при этом - описание динамики квазичастиц в нестационарно деформируемой кристаллической решетке. Его решение связано, в основном, с двумя трудностями. Первая вызвана тем, что квазиимпульс и закон дисперсии как периодическая функция от квазиимпульса хорошо определены только в идеально периодической решетке, являющейся привилегированной системой отсчета. Галилеевских преобразований для квазичастичных характеристик нет, и их нужно чем-то заменить. Вторая трудность связана с тем, что границы зоны Бриллюэна меняются во времени и зависят не только от деформации в данный момент времени, но и от скорости решетки. Эти трудности хорошо известны в электронной теории металлов^{42,43}, но все попытки их преодоления не выходили за рамки линейных теорий. При линеаризации же в выражениях для физических величин /энергия и т.д./ всегда появляются непериодические члены, несовместимые с периодичностью функции распределения, что мешало созданию непротиворечивой самосогласованной теории и не позволяло учитывать зависимость границ зоны Бриллюэна от скорости. Впервые полная нелинейная теория динамики деформируемого твердого тела с квазичастичными возбуждениями с произвольным законом дисперсии была построена в работах^{44,45}. Она излагается в Главе V.

На этом я закончу введение в предмет и его историю. Пользуясь правами лекционного жанра, я выбрал для изложения только те вопросы, которые, на мой взгляд, представляют наибольший интерес с физической или методической точки зрения. Учитывая вечное противоречие между строгостью и ясностью, я решил руководствоваться прежде всего соображениями достоверности и убедительности. При этом список литературы сознательно сокращен до того минимума, который имеет прямое отношение к пониманию излагаемых идей и результатов, а также не пренебрегает приоритетом их авторов.

"Джордж, Гаррис и Монморанси - отнюдь не поэтический идеал, но существа из плоти и крови; в особенности Джордж, который весит около 170 фунтов".

Дж.К. Джером. "Трое в лодке..."

Глава I. ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР ДЕФЕКТОНОВ В КВАНТОВЫХ КРИСТАЛЛАХ

§ 1. Идеальные квантовые кристаллы. Твердый гелий

Как уже отмечалось во Введении, основной характеристикой квантового кристалла является наличие больших нулевых колебаний атомов. При этом квантовость проявляется по тем степеням свободы, по которым велик параметр де Буря /В.1/. Таким образом, в класс квантовых кристаллов входят также тяжелые металлы /палладий, ниобий и др./, в которых квантовым является поведение легких примесей водорода ^{7,46,47} твердый водород с примесями атомарного водорода ^{48,49}, металлический водород ⁵⁰ и др.

Исторически, однако, физика квантовых кристаллов наиболее тесно связана с твердым гелием. Твердый гелий является наиболее полно изученным квантовым кристаллом. Выбор гелия в качестве базовой системы для проверки основных идей и результатов теории обусловлен также рядом других обстоятельств. Кристаллы гелия отличаются исключительной чистотой - единственная примесь в них - изотопическая, причем хорошо контролируемая в очень широких пределах. Оба изотопа 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.

Как уже отмечалось во Введении, полное описание модельной системы включает в себя не только описание структуры и составляющих ее частиц, но и задание основных видов движения в ней, или, что то же, элементарные возбуждения как элементарные носители этих движений. В этом смысле кристаллы ⁴He с небольшим количеством изотопических примесей и вакансий служат редким примером реально существующей модельной системы, в которой элементарными возбуждениями являются только фононы и дефектоны /вакансионы и примесоны/. При этом низкая температура плавления по сравнению с температурой Дебая приводит к простому линейному закону дисперсии для фононов во всей области существования твердой фазы.

Фазовые диаграммы изотопов гелия показаны схематически на рис. I. и рис. 2. На рис. 3 показано смещение границ фаз в зависимости от концентрации примесных атомов ³He в твердом растворе ³He-⁴He.



Рис. 1.



Рис. 2.

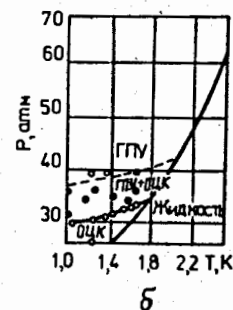
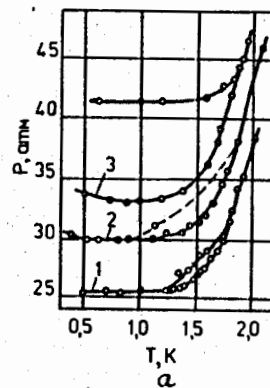


Рис. 3. Фазовые диаграммы /51/ твердых растворов ³He - ⁴He в области перехода оцк - гпу при различных концентрациях x атомов ³He: а) 1 - 0,75%, 2 - 2,17%, 3 - 6,3%; б) x = 7,78%; о - одна твердая фаза, ● - смесь оцк и гпу фаз.

Таблица 1. Характерные значения температуры Дебая θ , дебаевской скорости звука s , давления затвердевания P , расстояния между ближайшими соседями a и среднее расстояние между атомами \bar{a} .

	V_m [см ³]	θ [K]	s [м/с]	P [атм]	a [Å]	\bar{a} [Å]
³ He - оцк	24	19	240	29	3,73	3,42
⁴ He - гпу	21	26	320	25	4,13	3,27
оцк	21	36	390		3,57	3,27

Значения некоторых характерных параметров чистых кристаллов гелия даны в табл. I. Дополнительные сведения о гелии и его твердых растворах можно найти в 51-55.

Интересно отметить, что кристаллы гелия не подчиняются "классическому" правилу Борна, согласно которому необходимым условием устойчивости кристаллической решетки является вещественность фононных частот. Последнее эквивалентно требованию, чтобы одночастичные потенциалы атомов имели минимумы в узлах решетки. Однако, как показали Ветте и Нибур⁵, если использовать потенциал Леннарда-Джонса /В.2/, который очень хорошо описывает взаимодействие между атомами гелия в газобразном и жидком состоянии, то фононные частоты для обоих изотопов как в гексагональной плотноупакованной /гпу/, так и в гранцентрированной кубической /гцк/ фазе должны быть мнимыми во всей зоне Бриллюэна. Они становятся вещественными, только если уменьшить объем реально существующих кристаллов в несколько раз. Таким образом, твердый гелий существует в классически запрещенной области. Мнимость частот означает, что одночастичная потенциальная яма атома имеет в решеточном узле не минимум, а локальный максимум.

С другой стороны, эксперимент указывает на наличие хорошего фононного спектра, если судить по теплоемкости, скорости звука, модулям упругости и температуре Дебая. Это означает, что первые квантовые уровни лежат достаточно высоко над центральным максимумом, и их значения можно аппроксимировать, заменяя истинную яму эффективным гармоническим потенциалом. При этом кривизна эффективного потенциала является плавной функцией температуры и давления. Такой подход, получивший название метода самосогласованных фононов, позволяет использовать гармоническую теорию твердого тела и ввести понятие о фононах. Вид настоящей потенциальной ямы, однако, влияет на форму волновой функции атома, значительно уширяя ее и увеличивая, таким образом, вероятность туннельных переходов.

Для атомов ³He, обладающих спином 1/2 и относительно большим магнитным моментом, обмен атомов местами эквивалентен спиновому обмену /потенциал взаимодействия практически не зависит от спина/, и подлежит экспериментальному наблюдению /напр. методом ЯМР⁵⁵/. Он приводит также к понижению энергии основного состояния кристалла⁵⁶⁻⁶¹.

Обменным эффектам в квантовых кристаллах без дефектов посвящено большое количество работ /см. 56-62 и цитированную там литературу/. Общее в большинстве этих работ - использование вариационной процедуры, основанной на следующей физической модели. Все атомы гелия находятся в своих узлах и описываются одночастичными волновыми функциями $\Phi(\vec{z}_i - \vec{R}_i)$, где \vec{z}_i - координата атома, а \vec{R}_i - "векторный номер"

узла. Тогда полная функция кристалла равна

$$\Psi(\vec{z}_1 \dots \vec{z}_N) = \prod_i \Phi(\vec{z}_i - \vec{R}_i) \prod_{j < k} f(\vec{z}_j - \vec{z}_k), \quad /1/$$

где $f(\vec{z}_i - \vec{z}_k)$ описывает корреляцию на близких расстояниях. Одночастичные функции и пробные корреляционные функции выбираются, как правило, в виде

$$\phi(r) = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{3/4} e^{-\frac{\alpha r^2}{2}}; \quad f(r) = \exp\left\{-k\left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^n - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6\right]\right\}. \quad /2/$$

Определению подлежат параметры α , k , σ , μ .

С их помощью обменный интеграл определяется как разность между энергиями симметричной и антисимметричной комбинаций волновых функций атомов, находящихся в соседних узлах решетки.

Хотя на этом пути были достигнуты определенные успехи, подобный расчет обменного интеграла может иметь только оценочный характер. Все авторы отмечают существенную роль выбора вида корреляционной функции. Он оказался особенно важным для метода кластерного разложения Носанова, требование быстрой сходимости для которого сильно ограничивает класс возможных пробных функций. Относительно некорректности использования гауссовых волновых функций /2/, соответствующих гармонической одночастичной потенциальной яме, мы уже говорили. Тем не менее, следует отметить, что указанный подход давал правильный порядок величины обменного интеграла I_{33} и качественно объяснял его сильную зависимость от объема, наблюдавшуюся на эксперименте.

$$d \ln I_{33} / d \ln V = 20. \quad /3/$$

§ 2. Дефекты в классических и квантовых кристаллах

Деформацию, создаваемую точечным дефектом в кристалле, можно грубо разделить на две части - ядро и медленно спадающее на больших расстояниях поле деформации. Последнее незначительно меняет периодичность решетки и обуславливает, в основном, упругое взаимодействие между дефектами^{63,64}.

Благодаря сильной зависимости междуатомных сил от расстояния, ядро деформации ограничено в пределах первых координационных сфер. Как показал И.М.Лифшиц⁶⁵ /см. также⁶⁶/, это обстоятельство дает возможность провести теоретический анализ решеточных колебаний, не прибегая к теории возмущений. В действительности метод Лифшица легко обобщается на довольно широкий класс зонных квазичастиц. При этом

для классического кристалла с локализованными дефектами основной интерес представляют три проблемы:

- влияние дефектов на зонные частоты и соответствующие им собственные векторы,
- исследование локальных состояний, отцепившихся от зонного спектра,
- изменение термодинамических и кинетических характеристик тела, вызванное наличием дефектов.

Таким образом, основная роль дефектов в классических кристаллах сводится к изменению спектра существующих элементарных возбуждений. В случае малой концентрации дефектов такую задачу можно решить в терминах теории рассеяния.

В квантовых кристаллах дефекты представляют новую ветвь элементарных возбуждений и важнейшими задачами являются нахождение энергетического спектра /закона дисперсии/, статистики и кинетических характеристик этих возбуждений.

Основные дефекты в квантовых кристаллах гелия — это вакансии и изотопические примеси. В классических кристаллах изотопическая примесь отличается, как правило, только массой и не меняет констант связи с соседними атомами. В квантовых кристаллах есть еще одно отличие изотопической примеси от собственного атома — у нее другая амплитуда нулевых колебаний, что с необходимостью приводит к изменению и упругих постоянных вокруг дефекта.

§ 3. Примесонный спектр. Теория возмущений

По-видимому, наиболее простой способ показать возможность существования дефектонов как новой ветви элементарных возбуждений, связанной с обменным взаимодействием атомов, можно продемонстрировать, исходя из модели Хаббарда¹² с гамильтонианом

$$H = \sum_R \epsilon_0 b_R^+ b_R + \sum_{R,R'} t_4(R,R') b_R^+ b_{R'} + U \sum_R b_R^+ b_R b_R^+ b_R \quad /1/$$

где b_R^+ , b_R — операторы рождения и уничтожения атомов в узле \vec{R} в одночастичном состоянии φ_R , ϵ_0 — энергия локализованного в узле атома, t_4 — матричный элемент перехода /обменный интеграл/ атома ^4He из узла \vec{R}' в \vec{R} , а U — энергия отталкивания атомов, находящихся в одном узле,

$$t_4(R,R') = \int dx \varphi_R^*(x) \hat{T} \varphi_{R'}(x), \quad U = \iint dx dx' |\varphi_R(x)|^2 v(x-x') |\varphi_{R'}(x')|^2 \quad /2/$$

\hat{T} — оператор кинетической энергии, $v(x_i - x_j)$ — потенциал взаимодействия.

Наличие примеси ^3He формально можно рассматривать как другое состояние частицы в узле. Пусть $t_3(R,R')$ — соответствующий матричный элемент перехода. Точнее, величина t_3 соответствует обменному интегралу в воображаемом идеальном кристалле, в котором все собственные атомы заменены примесными атомами, без каких-либо изменений параметров решетки. После этого задача, с точностью до обозначений, совпадает с задачей экситона Френкеля /см., например, ^{67/}. Обменный гамильтониан получается во втором порядке по теории возмущений и имеет вид:

$$H_{ex} = \frac{1}{U} \sum_{R,R'} [t_3 b_{R3}^+ b_{R3} + t_4 b_{R4}^+ b_{R4}] [t_3 b_{R3}^+ b_{R3} + t_4 b_{R4}^+ b_{R4}] \quad /3/$$

Обмену примесного и собственного атома соответствует член

$$H_{34} = \sum t_{34}(R,R') a_R^+ a_R + \text{э.с.}, \quad /4/$$

где введены операторы рождения и уничтожения дефектов

$$a_R^+ = b_{R4}^+ b_{R3}, \quad a_R = b_{R3}^+ b_{R4}, \quad /5/$$

а обменный интеграл¹²

$$t_{34} = \frac{t_3 t_4}{U} \quad /6/$$

Относительно применимости этой теории для реальных расчетов дефектонного спектра можно выдвинуть ряд возражений. Так, в теории вводятся две феноменологические величины / t_3 и U /, которые нельзя вычитать в рамках теории и которые не подлежат независимому экспериментальному определению / t_3 — обмен атомов ^3He в решетке ^4He /. Теория не учитывает стерическое взаимодействие атомов, особенно существенное для плотноупакованных решеток. Теория неприменима для вакансий, так как величина t_3 в таком случае теряет смысл. Нет возможности связать параметры теории с макроскопическими характеристиками тела. Не учтена роль деформации вокруг дефекта. Наконец, неудовлетворительно использование одночастичных волновых функций, о чем уже шла речь в § 1.

§ 4. Вакансионный спектр

В этом параграфе мы предложим другой способ вычисления дефектонного спектра без использования теории возмущений¹³. Другое преимущество нового метода заключается в том, что в нем обменный интеграл рассматривается как матричный элемент перехода между волновыми функциями всего кристалла, соответствующими разным положениям дефекта, а

не между одночастичными функциями дефекта. Это позволяет выразить закон дисперсии вакансиона через макроскопические характеристики среды без введения подгочных параметров. Можно сказать, что излагаемый подход отличается от методов, использованных в теории квантовых кристаллов 56-60, и от теории Гайера-Зейна¹², аналогично тому, как теория твердого тела Дебая отличается от теории Эйнштейна.

Рассмотрим решетку из одинаковых атомов с одним точечным дефектом, положение которого будем описывать радиус-вектором \vec{z} . Поскольку скорость дефектона много меньше скорости звука в кристалле, газ нулевых фононов успевает подстраиваться к его движению и, следовательно, в те ситуации, когда дефект находится вблизи одного из узлов решетки, гамильтониан системы можно записать в виде¹³:

$$H_{\vec{z}} = \frac{1}{2} \sum_R m_R \dot{u}_R + U_{\vec{z}}, \quad U_{\vec{z}} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{RR' \\ \sigma\sigma'}} \phi_{RR'}^{\sigma\sigma'}(\vec{z}) (u_R^\sigma - \dot{x}_R^\sigma(\vec{z})) (u_{R'}^{\sigma'} - \dot{x}_{R'}^{\sigma'}(\vec{z})), \quad /1/$$

где m_R - масса атома в узле \vec{R} , u_R^σ - компонента радиус-вектора атома, \dot{x}_R^σ - координаты его равновесного положения в деформированной решетке, $\sigma = x, y, z$, а ϕ - "самосогласованная" матрица упругих коэффициентов. Матрицу ϕ можно записать как сумму матрицы идеального кристалла L и матрицы возмущения $\hat{\Lambda}$:

$$\phi_{RR'}^{\sigma\sigma'}(\vec{z}) = L_{R-R'}^{\sigma\sigma'} + \hat{\Lambda}_{RR'}^{\sigma\sigma'}(\vec{z}). \quad /2/$$

Из трансляционной симметрии идеальной решетки следует, что \hat{L} зависит от R и R' только через их разность, а $\hat{\Lambda}$ - только через расстояние до дефекта

$$\hat{\Lambda}_{RR'}^{\sigma\sigma'}(\vec{z}) = \hat{\Lambda}_{R-\vec{z}, R'-\vec{z}}^{\sigma\sigma'}. \quad /3/$$

Матрица $\hat{\phi}$ обладает важным свойством⁶⁶:

$$\sum_R \phi_{RR'}^{\sigma\sigma'} = 0. \quad /4/$$

Если же элементарная ячейка кристаллической решетки содержит больше одного атома, то это условие записывается в виде

$$\sum_{RS} \phi_{RR'}^{\sigma s \sigma' s'} \quad /4a/$$

где s - номер атома в ячейке, а R - номер ячейки. Очевидно, это условие выполняется для каждой из матриц \hat{L} и $\hat{\Lambda}$ в отдельности. Если в решетке взаимодействуют только ближайшие соседи, то условие /4/ позволяет выразить элементы матрицы возмущения $\hat{\Lambda}$ через элементы матрицы идеального кристалла. Так, в случае простой кубической решетки

$$\Lambda_{\sigma\sigma} = -L_{\sigma\sigma} = -6ms^2, \quad \Lambda_{\sigma\delta} = \Lambda_{\delta\sigma} = ms^2 = -\Lambda_{\delta\delta}, \quad /5/$$

где индекс δ пробегает по ближайшим соседям, s - скорость звука.

Для упрощения записи введем обозначения

$$x_i \equiv x_R^\sigma = \sqrt{m_R} u_R^\sigma, \quad p_i = \sqrt{m_R} \dot{u}_R^\sigma$$

$$(\hat{\omega}_0^2(\vec{z}))_{RR'}^{\sigma\sigma'} = m_R^{-1/2} \phi_{RR'}^{\sigma\sigma'}(\vec{z}) m_{R'}^{-1/2}. \quad /6/$$

В этих обозначениях гамильтониан /1/ имеет вид

$$H_{\vec{z}} = \frac{1}{2} (P, P) + U_{\vec{z}}, \quad U_{\vec{z}} = \frac{1}{2} (x - \dot{x}(\vec{z}), \hat{\omega}_0^2(\vec{z}) (x - \dot{x}(\vec{z}))), \quad /7/$$

где (α, β) - скалярное произведение векторов α и β .

Тогда волновую функцию основного состояния кристалла с локализованным дефектом можно записать в виде

$$\Psi_{\vec{z}}(x) = \frac{(\det \hat{\omega}_0)^{1/4}}{(\pi \hbar)^{3N/4}} \exp\left\{-\frac{1}{2\hbar} (x - \dot{x}, \hat{\omega}_0^2(\vec{z}) (x - \dot{x}))\right\}, \quad /8/$$

где N - число атомов. Энергия же этого состояния равна

$$E_0 = \frac{1}{2} \hbar \text{Sp} \hat{\omega}_0(\vec{z}). \quad /9/$$

Матрица $\hat{\omega}_0$ есть квадратный корень из матрицы $\hat{\omega}_0^2$. Неоднозначность в извлечении квадратного корня из матрицы устраняется требованием положительной определенности квадратичной формы

$$(x, \hat{\omega}_0(\vec{z}) x) > 0.$$

Ввиду тождественности узлов решетки энергия кристалла не зависит от координат дефекта. Следовательно, правильная волновая функция в нулевом приближении должна иметь вид суперпозиции

$$\Psi_{\vec{k}}(x) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{z}} e^{i\vec{k}\vec{z}} \Psi_{\vec{z}}(x). \quad /10/$$

Рассмотрим теперь уравнение Шредингера

$$\frac{1}{2} \hbar^2 \tilde{\Delta} \Psi + (E - U) \Psi = 0. \quad /11/$$

Входящий сюда потенциал U является сложной функцией координат всех атомов, учитывающей возможность перехода дефекта из одного узла в другой. В той области конфигурационного пространства, которая соответствует "хорошей" локализации дефекта в узле \vec{z} , потенциал U совпадает с $U_{\vec{z}}$. В этой области функция $\Psi_{\vec{z}}$ существенно отлична от нуля, а все $\Psi_{\vec{z}'} / \vec{z}' \neq \vec{z} /$ исчезающе малы. Поэтому в этой области

конфигурационного пространства

$$\frac{1}{2} \hbar^2 \tilde{\Delta} \Psi_{\vec{z}} + (E_0 - U) \Psi_{\vec{z}} = 0. \quad /12/$$

Выбор нашей модели предполагает, что потенциал U совпадает с некоторой из функций $U_{\vec{z}}$ в любой точке конфигурационного пространства. Поэтому с той же точностью, с которой справедливо /12/, в уравнении Шредингера /11/ можно заменить Ψ на Ψ_k . После этого умножаем /11/ слева на $\Psi_{\vec{z}}$, а /12/ - на Ψ_k , вычитаем одно равенство из другого и интегрируем по объему, в котором определена $\Psi_{\vec{z}}$. Преобразуя полученное выражение по теореме Гаусса, получаем

$$(E_k - E_0) \int \Psi_{\vec{z}} \Psi_k dx = \frac{1}{2} \hbar^2 \int \left(\Psi_{\vec{z}} \frac{\partial}{\partial x_i} \Psi_k - \Psi_k \frac{\partial}{\partial x_i} \Psi_{\vec{z}} \right) d^i x, \quad /13/$$

где $d^i x = dx_1 \dots dx_{i-1} dx_{i+1} \dots dx_n$, а S - поверхность, ограничивающая область изменения координат дефекта. Имея в виду то, что вклад в поток дают преимущественно ближайшие к дефекту атомы, находим

$$E_k = E_0 + \frac{1}{2} \sum_{\vec{s}} A_{\vec{s}} e^{i\vec{k}\vec{s}}, \quad A_{\vec{s}} = \hbar^2 \int \left(\Psi_{\vec{z}} \frac{\partial}{\partial x_{\vec{s}}} \Psi_{\vec{z}+\vec{s}} - \Psi_{\vec{z}+\vec{s}} \frac{\partial}{\partial x_{\vec{s}}} \Psi_{\vec{z}} \right) d^i x /14/$$

Здесь \vec{s} пробегает значения, соответствующие ближайшим узлам, а $x_{\vec{s}}$ - координата реально перемещающегося атома, связывающая \vec{z} с $\vec{z} + \vec{s}$ /в случае вакансии это координата атома, переходящего на ее место/.

Формула /14/, в принципе, решает задачу о нахождении закона дисперсии. Для кристаллов с кубической или гексагональной плотно упакованной решеткой интеграл в правой части от \vec{s} не зависит. Таким образом, закон дисперсии дефектона имеет следующий вид в различных кристаллических модификациях твердого гелия:

$$\text{для ПК: } \varepsilon(\vec{k}) = E_k - E_0 = A (\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a), \quad /15/$$

$$\text{для оцк: } \varepsilon(\vec{k}) = 4A \cos \frac{k_x a}{2} \cos \frac{k_y a}{2} \cos \frac{k_z a}{2}, \quad /16/$$

$$\text{для гцк: } \varepsilon(\vec{k}) = 2A \left(\cos \frac{k_x a}{2} \cos \frac{k_y a}{2} + \cos \frac{k_x a}{2} \cos \frac{k_z a}{2} + \cos \frac{k_y a}{2} \cos \frac{k_z a}{2} \right), \quad /17/$$

$$\text{для гпу: } \varepsilon_{\text{оп}}(\vec{k}) = A \left\{ 7 - \cos \frac{\vec{k}\vec{a}_1}{2} \cos \frac{\vec{k}\vec{a}_2}{2} \cos \frac{\vec{k}\vec{a}_3}{2} + \cos \frac{\vec{k}\vec{c}}{2} \left(1 + 8 \cos \frac{\vec{k}\vec{a}_1}{2} \cos \frac{\vec{k}\vec{a}_2}{2} \cos \frac{\vec{k}\vec{a}_3}{2} \right)^{1/2} \right\}, \quad /19/$$

где $\vec{a}_1 = (1, 0, 0)$, $\vec{a}_{2,3} = (-\frac{1}{2}, \pm \frac{\sqrt{3}}{2}, 0)$, $\vec{c} = (0, 0, \sqrt{\frac{8}{3}})$.

В последнем случае имеются две дефектонные зоны, как и должно быть в решетках, элементарная решетка которых содержит два атома. Эти зоны частично перекрываются. Ширина нижней зоны, которую мы условно назвали акустической, равна $7A$, а верхней /оптической/ - $5A$. Дно оптической зоны расположено выше дна акустической зоны на величину $3A$. Ширина спектра, таким образом, равна $8A$. Для простых же и кубических решеток ширина зоны $\Delta = zA$, где z - число ближайших соседей.

При малых значениях волнового вектора $/ka \ll 1/$ закон дисперсии квадратичен во всех зонах. Эффективная масса квазичастицы в простых и кубических решетках

$$m^* = \frac{\hbar^2}{Aa^2}, \quad /20/$$

а в гпу-решетке

$$m^* = \frac{\hbar^2}{2Aa^2}. \quad /21/$$

Таким образом, видно, что основные характеристики дефектонов простым образом выражаются через амплитуду вероятности перехода A . Поэтому ее вычисление из микроскопической теории представляет особый интерес. Интеграл /14/ с волновыми функциями /8/ можно взять точно¹³ при произвольных деформациях вокруг дефекта. Мы не будем выписывать здесь это решение ввиду его громоздкости, отсылая читателя к оригинальной работе¹³. Вместо этого приведем упрощенное выражение, которое получается, если пренебречь деформацией:

$$A = \zeta_1 \theta \left(\frac{ms^2}{\theta} \right)^{1/2} \exp \left\{ -\zeta_0 \frac{ms^2}{\theta} \right\}, \quad /22/$$

где

$$\zeta_0 = \left(\frac{3\pi^2}{32} \right)^{1/3} \left(\sqrt{z} - \frac{1}{\sqrt{z+1}} \right),$$

а ζ_1 - числовой параметр порядка единицы. Таким образом, нам удалось выразить амплитуду вероятности перехода A /туннельную частоту/ через макроскопические характеристики кристалла - температуру Дебая θ , скорость звука s и число ближайших соседей z . Однако, ввиду сильного ангармонизма колебаний, как температура Дебая, так и скорость звука сильно зависят от температуры и давления. Выбранный нами способ описания квантового кристалла позволяет учесть зависимость от давления /молярного объема/ через постоянную Грнрайзена

$$f = -d \ln \theta / d \ln V.$$

Тогда

$$\frac{ms^2}{\theta} = \alpha V^{\frac{2}{3}-f}, \quad \alpha = \frac{m k_B \theta_0}{\hbar^2 (6\pi^2 N_A)^{2/3}}, \quad \theta = \frac{\theta_0}{V^f},$$

где k_B - постоянная Больцмана, N_A - число Авогадро, а θ_0 - постоянная, которая определяется экспериментально /и, вообще говоря, является функцией температуры/. Окончательно туннельную частоту A можно записать в виде

$$A = \zeta_1 \frac{\alpha_1}{V P_1} e^{-\frac{\alpha}{V P_0} \left(\sqrt{Z} - \frac{1}{\sqrt{Z} + 1} \right)}, \quad /23/$$

где

$$P_1 = \frac{3}{2} \gamma - \frac{1}{3}; \quad P_0 = \gamma - \frac{2}{3}; \quad \alpha_1 = \theta_0 \sqrt{\alpha}. \quad /24/$$

Значения входящих в /23/ параметров для гпу ^4He и оцк ^3He даны в табл. 2, а зависимость ширины зоны от молярного объема показана на рис. 4. К сожалению, экспериментальные данные, полученные разными авторами /см. например $^{31,68}/$, довольно противоречивы и не позволяют провести детальное сравнение с теоретическими расчетами.

Таблица 2. Значения параметров, входящих в /23/, согласно 69,70

Кристалл	θ_0	γ	α	P_0	P_1	ζ_0	α_1
гпу ^4He	$6,73 \cdot 10^4$	2,6	516	1,93	3,57	3,2	$1,53 \cdot 10^6$
оцк ^3He	$4,19 \cdot 10^4$	2,41	240	1,74	3,3	2,57	$6,5 \cdot 10^5$

Интерес представляет также "постоянная Грюнайзена"

$$\gamma_A = d \ln A / d \ln V \sim 2 \div 4.$$

Она значительно меньше аналогичной величины для обменного интеграла атомов в чистом ^3He /1.3/.

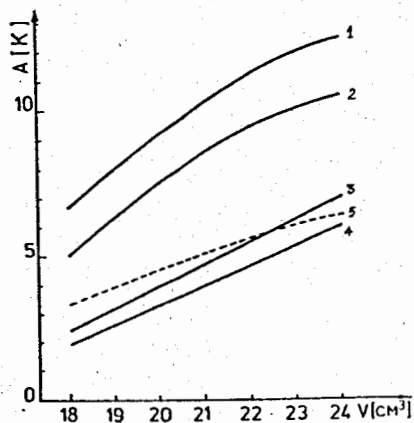


Рис. 4. Ширина вакансионной зоны в зависимости от молярного объема согласно /23/.

1 - оцк ^3He , 2 - оцк ^4He ,
3 - гпу ^3He , 4 - гпу ^4He при $\zeta_1 = 1$; 5 - оцк ^3He при $\zeta_1 = 1/2$.

"В результате ему становится ясно, что жену следует искать не в числе его знакомых".

Дж.К. Джером. "Памяти Джона Ингерфильда и его жены Анни"

Глава II. СТАТИСТИКА ДЕФЕКТОНОВ

Рассмотрение термодинамических и кинетических характеристик дефектного газа возможно только после выяснения коллективных свойств дефектонов. Прежде всего отметим, что статистика дефектонов не должна совпадать обязательно со статистикой Бозе-Эйнштейна или Ферми-Дирака, как это имеет место для обычных частиц. Дефектоны появляются не в вакууме, и поведение волновой функции при перестановке дефектонов зависит не только от характеристик дефектного атома /например, от его спина/, но также и от атомов матрицы, подчиняющихся своей статистике и образующих периодическую решетку. Наличие решетки /а не непрерывной среды/ существенно. Как будет показано, дефекты разного решеточного типа /атомы замещения или внедрения/ превращаются в квазичастицы, подчиняющиеся различным статистикам. Поэтому переход примесного атома внедрения в узел может, в принципе, быть затруднен необходимостью "перехода в другую статистику" и преодоления энергетического барьера порядка энергии Ферми E_F .

Характерной особенностью дефектонов в квантовых кристаллах является малая ширина энергетической зоны Δ /см. §§ 4, 15/. Для вакансионных она составляет несколько градусов, а для примесных ^3He в ^4He $\Delta \approx 10^{-4}$ К/В случае водородных примесей в металлах она может быть значительно шире $^{47}/$. Поэтому температура вырождения дефектного газа T_0 очень мала:

$$T_0 \approx \Delta x^{2/3},$$

где x - безразмерная концентрация дефектов. Таким образом, в довольно широком температурном интервале можно считать, что дефектоны подчиняются статистике Больцмана. При понижении температуры, однако, статистика дефектонов, и, в частности, нулевых вакансионных 11 может стать существенной и привести к вполне определенным эффектам в теплоемкости, теплопроводности и диффузии 30,71 . Возможно также появление сверхтекучих потоков в кристалле 11,33,34 .

С другой стороны, малая ширина зоны приводит к аномально большим сечениям рассеяния 13,20,72 и к локализации дефектонов при довольно низких концентрациях. Поэтому только при очень низких концентрациях можно рассматривать дефектоны как квазичастичный газ. Однако, несмотря на понижение температуры вырождения с уменьшением концентрации, относительная роль статистики при этом возрастает. В этом легко убе-

даться из следующего рассмотрения⁷³. Взаимодействие точечных дефектов в кристаллах обратно пропорционально третьей степени расстояния. Таким образом, энергия взаимодействия дефектов пропорциональна их концентрации x :

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

Характерные же энергии, связанные со статистикой /температура вырождения, энергия Ферми и т.д./, зависят от концентрации слабее:

$$T_0 \sim \Delta x^{2/3}.$$

Следовательно, при достаточно малых концентрациях

$$\frac{T_0}{E} \sim \frac{\Delta}{V_0} x^{1/3} \gg 1.$$

§ 5. Коллективные свойства дефектонов в трехмерном кристалле

Рассмотрим упрощенную модель кристалла, в котором взаимодействие между атомами не зависит от их статистики. Это означает, что атомы матрицы отличаются от дефектов только спином. Тогда формально можно считать, что в каждом узле решетки расположена частица, которая может находиться в двух состояниях, которые будем отличать индексом s . Состояние с $s=0$ соответствует бозевской, а с $s=1$ - фермиевской частице. В бозевском кристалле состояние с $s=1$ можно рассматривать как возбужденное, а с $s=0$ - как основное, в то время как для фермиевского кристалла будет наоборот. В любом кристалле вакансиям приписываем спин, равный нулю.

Поскольку число частиц в каждом состоянии равно либо нулю, либо единице, то собственные значения оператора числа частиц $N_{ns} = 0, 1$, а так как в каждом узле всегда есть одна частица /или вакансия, которая формально рассматривается как частица/, то

$$\sum_s N_{ns} = 1. \quad /1/$$

Все узлы решетки будем считать пронумерованными. Способ нумерации при этом произволен, но постоянен. Вводя в рассмотрение операторы рождения a_{ns}^+ и уничтожения a_{ns} частиц в узле n в состоянии s , пишем

$$\hat{N}_{ns} = a_{ns}^+ a_{ns}. \quad /2/$$

Волновую функцию в представлении чисел заполнения обозначим через $|\dots N_{ns} \dots\rangle$.

Операторы a^+ и a можно построить в два этапа. Сначала введем операторы b^+ и b , обладающие свойствами

$$b_{ns}^+ b_{ns} = \hat{N}_{ns}, \quad /3/$$

$$b_{ns}^+ |\dots N_{ns} \dots\rangle = (1 - N_{ns}) |\dots N_{ns} + 1 \dots\rangle,$$

$$b_{ns} |\dots N_{ns} \dots\rangle = N_{ns} |\dots N_{ns} - 1 \dots\rangle.$$

Отсюда следует их коммутационные соотношения

$$b_{ns} b_{m\sigma}^+ - b_{m\sigma}^+ b_{ns} = \delta_{mn} \delta_{s\sigma} (1 - 2\hat{N}_{ns}), \quad /4/$$

$$b_{m\sigma} b_{ns} - b_{ns} b_{m\sigma} = b_{m\sigma}^+ b_{ns}^+ - b_{ns}^+ b_{m\sigma}^+ = 0,$$

совпадающие с перестановочными соотношениями для операторов Паули. Они учитывают тот факт, что в одном узле не может быть больше одной частицы, однако не учитывают правильно симметрию волновых функций. Так, для частиц, находящихся в разных узлах, соотношения /4/ совпадают с теми для бозевских операторов, в то время как там могут находиться ферми-частицы. Чтобы правильно учесть статистику атомов /но не и возбуждений!/, совершим преобразование, аналогичное использованному Боголюбовым³, записывая операторы a^+ и a в виде

$$a_{ns}^+ = e^{i\pi s \sum_{l \neq n} \hat{N}_{li}} b_{ns}^+, \quad a_{ns} = e^{-i\pi s \sum_{l \neq n} \hat{N}_{li}} b_{ns}. \quad /5/$$

Очевидно,

$$a_{ns}^+ a_{ns} = b_{ns}^+ b_{ns} = \hat{N}_{ns}.$$

С помощью /4/ находим коммутационные соотношения для операторов a^+ и a ^{14,73}:

$$[a_{m\sigma} a_{ns}^+]_- = (1 - 2\hat{N}_{ns}) \delta_{mn} \delta_{s\sigma} - (1 - e^{i\pi s\sigma}) (1 - \delta_{mn}) a_{ns}^+ a_{m\sigma}$$

$$[a_{m\sigma} a_{ns}]_+ = (e^{-i\pi s\sigma} + 1) a_{ns} a_{m\sigma}, \quad m \neq n \quad /6/$$

$$a_{ns} a_{n\sigma} = a_{ns}^+ a_{n\sigma}^+ = 0.$$

Тогда оператор Гамильтона в представлении вторичного квантования с учетом только парных взаимодействий записывается в виде

$$H = \sum_{m \neq n} A_{mn} a_{mn}^+ a_{n\sigma}^+ a_{m\sigma} a_{ns}, \quad /7/$$

где A_{mn} - матричный элемент оператора парного взаимодействия.

Ясно, что из-за хаотического распределения примесей операторы a^+ и a не подчиняются определенной статистике. Из них, однако,

можно составить новые операторы:

$$\alpha_n(s, \sigma) = a_{n\sigma}^+ a_{ns}, \quad \alpha_n^+(s, \sigma) = a_{ns}^+ a_{n\sigma} = \alpha_n(\sigma, s), \quad /8/$$

имеющие смысл операторов рождения и уничтожения возбуждения в узельном представлении. Индекс s в /8/ относится к "возбужденному", а σ - к основному состоянию. Легко проверить, что $\alpha_n^+(s, \sigma) \alpha_n(s, \sigma) = \hat{N}_{ns}$. Несмотря на сложный вид соотношений /6/, коммутационные соотношения для операторов возбуждений /8/ принимают знакомый вид в ряде важных конкретных случаев. Так, учитывая, что

$$\alpha_n(s, \sigma) \alpha_n^+(s, \sigma) = \hat{N}_{n\sigma}$$

и нормировочное условие /1/, получаем

$$\alpha_n(s, \sigma) \alpha_n^+(s, \sigma) + \alpha_n^+(s, \sigma) \alpha_n(s, \sigma) = 1. \quad /9/$$

Для произвольных же m, n, σ, s прямой подсчет с помощью /6/ дает

$$[\alpha_m(s, \sigma) \alpha_n^+(s, \sigma)]_{\pm} = \left(e^{i\pi(s-\sigma)} \mp 1 \right) \alpha_n^+(s, \sigma) \alpha_m(s, \sigma). \quad /10/$$

Для определенности рассмотрим кристалл бозевского типа /⁴Ne/ с примесями замещения фермиевского типа /³Ne/. В этом случае операторы $\alpha_n^+ = a_{n1}^+ a_{n0}$ и $\alpha_n = a_{n0}^+ a_{n1}$ удовлетворяют точным фермиевским перестановочным соотношениям

$$\alpha_m \alpha_n^+ + \alpha_n^+ \alpha_m = \delta_{mn}, \quad \alpha_n \alpha_n = \alpha_n^+ \alpha_n^+ = 0,$$

а гамильтониан /7/ имеет вид

$$H = \sum_{m \neq n} A_{mn} \alpha_m^+ \alpha_n. \quad /11/$$

Так как матрица A_{mn} зависит только от разности координат узлов, то гамильтониан /11/ приводится к диагональному виду с помощью преобразования Фурье

$$\alpha_m^+ = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} \alpha_{\vec{k}}^+ e^{-i\vec{k}\vec{R}_m}, \quad \alpha_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} \alpha_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{R}_n}, \quad /12/$$

где операторы возбуждений $\alpha_{\vec{k}}^+$ и $\alpha_{\vec{k}}$ - фермиевского типа.

В случае кристалла из фермиевских атомов с вакансиями или примесями бозевского типа оператор $\alpha_n^+ = a_{n1}^+ a_{n0}$ имеет смысл оператора уничтожения-возбуждения. Следовательно, и в этом случае дефектоны являются ферми-частицами.

Если дефекты и атомы кристалла подчиняются одной и той же статистике /а также в случае вакансий в ⁴Ne/, то $s-\sigma=2$, и соотношения /9/ и /10/ дают

$$\alpha_m \alpha_n^+ - \alpha_n^+ \alpha_m = (1 - 2\hat{N}_n) \delta_{mn}, \quad \hat{N}_n = \alpha_n^+ \alpha_n. \quad /13/$$

Это хорошо известные перестановочные соотношения для операторов Паули, неоднократно обсуждавшихся в теории магнетизма. Мы рассмотрим их более подробно в следующем параграфе. В нулевом приближении по концентрации квазичастиц их можно заменить бозевскими.

Результаты проведенного рассмотрения приведены в табл. 3, где Φ и B означают соответственно ферми- и бозе-тип возбуждений.

Таблица 3. Статистика дефектонов в зависимости от статистики атомов кристалла и статистики и типа дефектов

Дефект	в ферми-кристалле	в бозе-кристалле
1. Вакансия	Φ	B
2. Атом замещения бозевского типа	Φ	B
фермиевского типа	B	Φ
3. Примесоны внедрения сохраняют статистику примесных атомов		

Аналогичным образом можно рассмотреть и статистику дефектонов в сложных решетках, а также статистику вакансионнов в неупорядоченном кристалле из ферми- и бозе-частиц. При этом, в отличие от настоящих частиц, дефектонные возбуждения не всегда будут описываться бозевской или фермиевской статистикой даже приближенно.

§ 6. Кинематическое взаимодействие

Несмотря на то, что при малых концентрациях возбуждений статистика паулионов очень близка к статистике Бозе-Эйнштейна, отличие между двумя статистиками представляет принципиальный интерес, и может быть существенным для некоторых ситуаций, связанных, например, с проблемой бозе-эйнштейновской конденсации и с возможностью появления сверхтекучих дефектонных потоков. Вопрос сводится к возможности нахождения макроскопического числа дефектонов в одном квантовом состоянии, причем это не обязательно состояние с нулевым квазиимпульсом ²⁹.

Коммутационные соотношения в k -пространстве можно найти из /5.12/ и /5.13/:

$$[\alpha_k \alpha_p^+]_- = \delta_{kp} - \frac{2}{N} \hat{N}_{p-k}, \quad /1/$$

где

$$\hat{N}_{p-k} = \sum_n \alpha_n^+ \alpha_n e^{i(p-k)R_n}, \quad \hat{N}_0 = \sum_n \alpha_n^+ \alpha_n. \quad /2/$$

Коммутируя еще раз, получаем

$$[\alpha_q [\alpha_k \alpha_p^+]_-] = \frac{2}{N} \alpha_{q+k-p}, \quad [\alpha_q^+ [\alpha_k \alpha_p^+]_-] = \frac{2}{N} \alpha_{p+q-k}. \quad /3/$$

Видно, что вектор состояния в правой части определяется законом сохранения квазиимпульса. Парастатистика с такими коммутационными соотношениями рассматривалась в ⁷⁴, где показано, что в одном квантовом состоянии могут находиться не более N квазичастиц. Состояние с n_k квазичастицами в состоянии с заданным k имеет вид

$$|n_k\rangle = C_{n_k} (\alpha_k^+)^{n_k} |0\rangle, \quad /4/$$

где

$$C_n^2 = \frac{N^n (N-n)!}{N!}, \quad C_{N+1} = 0.$$

Функция распределения идеального газа с числами заполнения не больше N совпадает с функцией Джентиле

$$n_k^G = \left(\exp \frac{\epsilon_k - \mu}{T} - 1 \right)^{-1} - (N+1) \left(\exp \frac{(\epsilon_k - \mu)(N+1)}{T} - 1 \right)^{-1} \quad /5/$$

Однако при $n_k \gg 1$ дефектоны нельзя рассматривать как невзаимодействующие квазичастицы, в чем легко убедиться из следующего рассмотрения. Действие оператора α_k^+ на состояние $|n_k\rangle$ дает

$$\alpha_k^+ |n_k\rangle = \sqrt{(n_k+1)(1-n_k/N)} |n_k+1\rangle$$

и, следовательно,

$$\langle n_k | [\alpha_k \alpha_k^+]_- | n_k \rangle = 1 - 2n_k/N.$$

Тогда из /1/ и /2/ получаем

$$\hat{n}_k = \frac{1}{2} N (1 - [\alpha_k \alpha_k^+]_-) = \hat{N}_0, \quad /6/$$

т.е. \hat{n}_k не зависит от k .

Из /6/ следует, что гамильтониан идеального дефектного газа должен был бы иметь вид

$$H_{id} = \sum_k \epsilon_k \hat{n}_k = N \bar{\epsilon} \hat{N}_0, \quad \bar{\epsilon} = \frac{1}{N} \sum_k \epsilon_k,$$

а энергия системы в состоянии $|n_k\rangle$ -

$$\langle n_k | H_{id} | n_k \rangle = N \bar{\epsilon} \hat{n}_k.$$

Однако гамильтониан дефектного газа имеет вид

$$H = \sum_k \epsilon_k \alpha_k^+ \alpha_k = \frac{2}{N} \sum_k \epsilon_k \hat{N}_0 + \sum_k (\alpha_k^+ \alpha_k - 1) \epsilon_k$$

и, следовательно, энергия в состоянии с n_k квазичастицами может быть записана в виде ⁷⁴

$$\langle n_k | H | n_k \rangle = n \epsilon_k + \frac{n_k - 1}{N} (\bar{\epsilon} - \epsilon_k).$$

Второй член в правой стороне учитывает кинематическое взаимодействие. Таким образом, дефектоновый газ "наиболее идеален" вблизи $\epsilon_k = \bar{\epsilon}$ /т.е. примерно в середине зоны/.

Поскольку число дефектонов всегда много меньше числа узлов решетки, все дефектоны могут конденсироваться в одном состоянии с заданным k . Таким образом статистика не препятствует появлению сверхтекучих свойств дефектного газа.

§7. Одномерный случай

Иная ситуация возникает в одномерной решетке. Как показано в ⁷⁵, если для одномерного газа паулионов ограничиться только взаимодействием между ближайшими соседями, то гамильтониан такой системы можно представить в виде гамильтониана идеального ферми-газа. Действительно, гамильтониан в этом случае имеет вид

$$H = A \sum_n (\beta_n^+ \beta_{n+1} + \beta_{n+1}^+ \beta_n).$$

Если ввести новые операторы фермиевского типа

$$F_n = e^{i\pi \sum_{k \leq n} \hat{N}_k} \beta_n, \quad F_n^+ = e^{-i\pi \sum_{k \leq n} \hat{N}_k} \beta_n^+,$$

то

$$\beta_n^+ \beta_{n+1} = F_n^+ F_{n+1},$$

и, следовательно,

$$H = A \sum_n (F_n^+ F_{n+1} + F_{n+1}^+ F_n).$$

Переходя к операторам рождения и уничтожения дефектонов

$$F_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n F_n e^{ikn}, \quad F_k^+ = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n F_n^+ e^{-ikn},$$

получаем гамильтониан идеального ферми-газа

$$H = \sum_k \varepsilon(k) F_k^+ F_k,$$

где $\varepsilon(k) = 2A \cos k$ - закон дисперсии дефектона в одномерной решетке.

Отметим еще раз, что этот результат существенно связан с предположением о взаимодействии только между ближайшими соседями, чего не предполагалось в трехмерном случае.

"В том-то все дело - сказал великий инквизитор, - в нашем ремесле недостаточно найти доказательства, надо еще знать, что эти доказательства доказывают."

Луи Арагон. "Пожар"

§ 8. Теплоемкость дефектонного газа

Изменение энергетического спектра любой системы неизбежно приводит к изменению ее термодинамических характеристик и, в частности, ее теплоемкости. С другой стороны, большая точность, с которой можно измерять теплоемкость, позволяет получать полезную информацию о характеристиках спектра. В этом параграфе мы рассмотрим кратко влияние параметров дефектонного спектра на теплоемкость квантовых кристаллов гелия и остановимся более подробно на так называемой высокотемпературной аномалии теплоемкости окс ^3He ⁶⁹.

Поскольку температура вырождения дефектонного газа мала, статистику дефектонов можно считать бoльцмановской, и для нахождения теплоемкости можно исходить из классического статистического интеграла

$$Z = \frac{V^n}{n!} \left\{ \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{-\frac{\varepsilon(\vec{k})}{T}} d^3k \right\}^n \quad /1/$$

где $V = Na^3$ - объем кристалла, n - число дефектонов. Закон дисперсии запишем в виде

$$\varepsilon(\vec{k}) = \varepsilon_0 + \alpha \omega(\vec{k}), \quad /2/$$

где $\omega(\vec{k})$ - безразмерная функция квазиволнового вектора, а ε - энергия образования локализованного дефекта. Величина α имеет порядок туннельной частоты A . Таким образом

$$Z = \frac{N^n}{n!} e^{-\frac{\varepsilon_0}{T} n} Z_c^n \quad \text{где} \quad Z_c = \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{-\frac{\alpha}{T} \omega(\vec{k})} d^3k. \quad /3/$$

Тогда свободная энергия на ячейку кристалла равна

$$F = n \varepsilon_0 + n T \ln \frac{x}{e} - n T \ln Z_c, \quad /4/$$

а химический потенциал

$$\mu = \varepsilon_0 + T \ln x - T \ln Z_c. \quad /5/$$

Рассмотрим сначала случай, когда число дефектонов сохраняется. Такая ситуация имеет место для примесей. В этом случае теплоемкость

$$C = n \frac{\alpha^2}{T^2} \left\{ \frac{Z_c''}{Z_c} - \left(\frac{Z_c'}{Z_c} \right)^2 + \frac{T}{\alpha} \frac{Z_c'}{Z_c} \right\}, \quad /6/$$

где штрихом обозначена производная по аргументу α/T .

Величину Z_c можно найти в аналитическом виде только для простой кубической решетки. Тогда

$$\omega(\vec{k}) = \cos k_x + \cos k_y + \cos k_z \quad /7/$$

и Z_c выражается через модифицированную функцию Бесселя $I_0(t)$:

$$Z_c = I_0^3 \left(\frac{A}{T} \right). \quad /8/$$

Таким образом, для простой кубической решетки

$$C = \frac{3}{2} n \frac{A^2}{T^2} \left\{ 1 + \frac{I_2}{I_0} - 2 \frac{I_1}{I_0^2} \right\}. \quad /9/$$

Если $T_0 \ll T \ll A$, то $C \approx \frac{3}{2} n \frac{A^2}{T^2} x$, а при $T \gg A$ $C \approx \frac{3}{2} n x$.

Теплоемкость /9/ сравнивается с дебаевской при температуре

$$T_1 \approx \left(\frac{5}{8\pi^4} A^2 \theta^3 \right)^{1/5} x^{1/5}. \quad /10/$$

В случае примесей коэффициент при $x^{1/5}$ порядка 10^{-1} , а $T_1 \approx 10^{-2}$ К. К сожалению, именно в этой области температур происходит фазовое расслоение твердого раствора $^3\text{He} - ^4\text{He}$, что сильно затрудняет наблюдение примесонной теплоемкости.

Рассмотрим теперь вакансионную теплоемкость. Поскольку число вакансионных не сохраняется, а определяется из условия термодинамического равновесия, то $\mu = 0$, а теплоемкость дается выражением³⁰

$$C = \frac{\xi_0^2}{T^2} e^{-\frac{\xi_0}{T}} Z_0 \left\{ 1 - 2 \frac{\alpha}{\xi_0} \frac{Z_0'}{Z_0} + \frac{\alpha^2}{\xi_0^2} \frac{Z_0''}{Z_0} \right\} \quad /11/$$

Для простой кубической решетки, с помощью /8/ получаем

$$C = \frac{\xi_0^2}{T^2} e^{-\frac{\xi_0}{T}} I_0^3 \left\{ 1 - 6 \frac{A}{\xi_0} \left(1 + \frac{T}{2\xi_0} \right) \frac{I_1}{I_0} + 3 \frac{A^2}{\xi_0^2} + 6 \frac{A^2}{\xi_0^2} \frac{I_1^2}{I_0^2} \right\} \quad /12/$$

При $T_0 < T \ll A$ это выражение переходит в

$$C_0 = \left(\frac{2\pi A}{T} \right)^{1/2} \left(\frac{\varphi}{2\pi A} \right)^2 e^{-\varphi/T} \quad /13/$$

где $\varphi = \xi_0 - 3A$ - энергия дна вакансионной зоны. В другом предельном случае $A \ll T < T_k$ /

$$C_\infty = \nu \left(\frac{\xi_0}{T} \right)^2 e^{-\xi_0/T}, \quad \nu = 1 + \left(\frac{3}{2} \frac{A}{\xi_0} \right)^2 \quad /14/$$

Если пренебречь шириной вакансионной зоны, то /14/ переходит в известную формулу Шотки для теплоемкости двухуровневой системы:

$$C_s = \left(\frac{\varphi}{T} \right)^2 e^{-\varphi/T} \quad /15/$$

Формула Шотки использовалась Грейуоллом⁶⁹ для объяснения "высокотемпературной" аномалии теплоемкости в окк ^3He . Эта аномалия состоит в невозможности объяснить экспериментальные данные только на основе фоновой /дебаевской/ и спиновой теплоемкости. Несмотря на качественное описание экспериментальной кривой, закон /15/ не в состоянии объяснить аномалию количественно, что по существу указывает на конечность ширины зоны. Гайер³¹ предложил поправку к /15/ в виде множителя

$$F_6(T) = \left(I_0 e^{-\frac{A}{T}} \right)^3 \quad /16/$$

Однако, согласно⁶⁹, такой множитель только ухудшает согласие с экспериментом. Происхождение поправки Гайера легко увидеть, если записать теплоемкость /12/ в виде

$$C = C_s F(T), \quad /17/$$

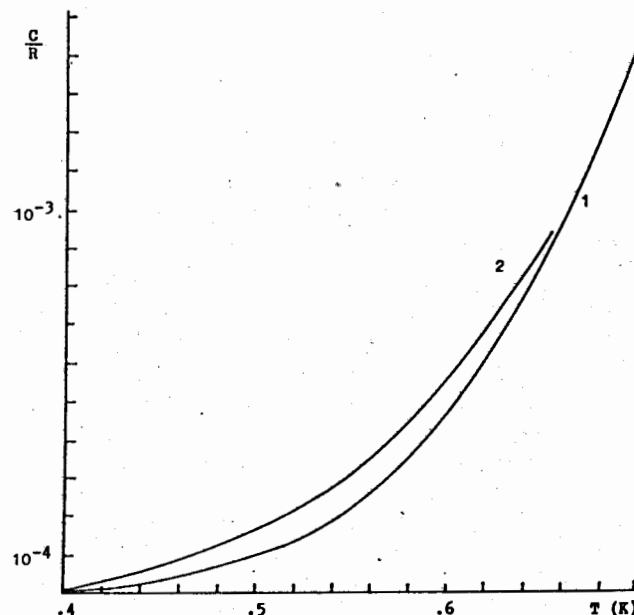


Рис. 5. Вакансионная теплоемкость для окк ^3He с $V_m = 24,454 \text{ см}^3$ 1 - по формуле Шотки /15/ с $\varphi = 5,99 \text{ К}$, 2 - по формуле /20/ с $\xi_0 = 6,65 \text{ К}$ и $\Delta = 6,42 \text{ К}$. В этом масштабе кривая 2 неотличима от экспериментальной.

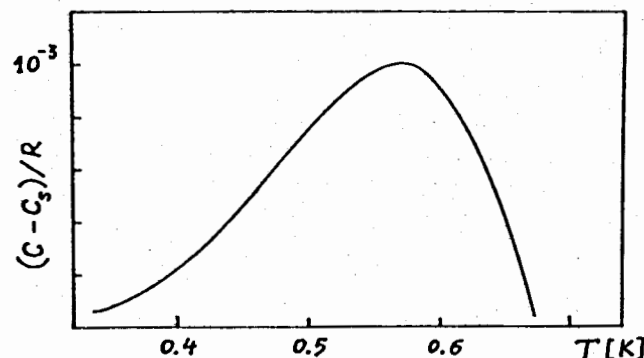


Рис. 6. Отклонение экспериментально измеренной теплоемкости от закона Шотки /15/ с $\varphi = 5,99 \text{ К}$, связанное с конечностью ширины зоны.

где

$$F(T) = \left(\frac{\varepsilon_0}{\varphi}\right)^2 \left(I_0 e^{-\frac{A}{T}}\right)^3 \left\{ 1 - 6 \frac{A}{\varepsilon_0} \left(1 + \frac{T}{2\varepsilon_0}\right) \frac{I_1}{I_0} + 3 \frac{A^2}{\varepsilon_0^2} \left(1 + 2 \frac{I_1^2}{I_0^2}\right) \right\} \quad /18/$$

Прежде чем пойти дальше, заметим, что при температурах эксперимента кристалл находится в парамагнитном состоянии и, следовательно, не обладает трансляционной инвариантностью. Поэтому квазиимпульс не является хорошим квантовым числом, и настоящей вакансионной зоны нет. Вакансионный спектр состоит из плотно расположенных локальных уровней. Для теплоемкости важно лишь распределение этих уровней, а не их характер — зонный или локальный. С другой стороны, как было показано Андреевым²⁶, вокруг вакансии в гелии всегда создается небольшая область с ферромагнитным упорядочением спинов. Даже в том случае, если она охватывает только первые координационные сферы, она существенным образом влияет на систематику уровней в спектре. Поэтому можно считать, что распределение уровней в зоне сохраняется таким, каким оно было бы в трансляционно-инвариантной решетке. Другими словами, нарушение трансляционной инвариантности влияет на возможность введения хорошего квазиимпульса, но не влияет на систематику уровней, которая, как и закон дисперсии, определяется симметрией элементарной ячейки.

Запишем закон дисперсии вакансиона в оцк решетке в виде

$$\varepsilon(\vec{k}) = \varepsilon_0 + \alpha \cos \frac{k_x}{2} \cos \frac{k_y}{2} \cos \frac{k_z}{2}. \quad /19/$$

Тогда¹⁰

$$C_{\text{оцк}} = \frac{\varepsilon_0^2}{T^2} e^{-\frac{\varepsilon_0}{T}} \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi/2} I_0^2 \left\{ \left(1 - \frac{\Delta}{\varepsilon_0} \frac{I_1}{I_0} \cos x\right)^2 + \frac{\Delta^2}{2\varepsilon_0^2} \cos^2 x - \frac{T\Delta}{\varepsilon_0^2} \frac{I_1}{I_0} \cos x \right\} dx, \quad /20/$$

где $I_k = I_k(\beta \cos x)$, а $\beta = \Delta/4T$. Сравнение с результатами работы⁶⁹ показывает, что формула /20/ описывает высокотемпературную аномалию в оцк ³He с высокой точностью. Из сравнения теории с экспериментом, в частности, можно получить ε_0 и ширину зоны Δ . Для молярного объема $V_m = 24,45 \text{ см}^3$ это дает $\varepsilon_0 = 6,65 \text{ К}$ и $\Delta = 6,42 \text{ К}$.

На рис.5 показана вакансионная теплопроводность, рассчитанная по формуле /20/ и по формуле Шотки /15/, а на рис.6 — их разность, о которой есть экспериментальные данные в⁶⁹.

"Есть восемь граней неизвестности и столько же граней у заблуждения".

Ишвар Кришна. "Санкхья Нарика"

Глава III. КИНЕТИКА ДЕФЕКТОНОВ

Наиболее ярко квазичастичное поведение дефектонов проявляется в их кинетике. При достаточно низких температурах активационный механизм диффузии становится менее эффективным по сравнению с туннельным, что приводит к новому явлению, получившему название квантовой диффузии. Явление квантовой диффузии оказалось не только ключом к пониманию поведения водорода в металлах⁷, спиновой диффузии^{11,13-20,22,72,76-79}, и аномалий спин-решеточной релаксации в гелии, но также расслоения твердых растворов ³He — ⁴He, происходящего за доступные эксперименту времена. С этим явлением связана и проблема самолокализации и фононной делокализации дефектов^{37,80}.

§ 9. Исторический обзор

Когда появились первые теоретические работы^{11,13}, предсказывающие основные особенности квантовой диффузии, экспериментальных данных о дефектонной диффузии не было, а некоторые результаты по диффузии дефектов^{18,82} говорили в пользу классического активационного механизма. Не было ясности относительно соотношения "квантовости" и "классичности" в рассматриваемых явлениях, что затрудняло даже правильную постановку задачи. Показательна в этом отношении работа Флинна и Стоунхэма⁴⁶ о диффузии легких примесей внедрения. Рассматривая влияние деформации решетки вокруг дефекта и роль фононов, авторы практически пренебрегли когерентной квантовой диффузией. Это было следствием неправильной концепции о том, что некогерентному /с участием фононов/ переходу соответствует якобы макроскопически большое число каналов, а когерентному — всего один. В результате они получили абсолютно неправдоподобную оценку для температурной области, в которой можно наблюдать туннельную диффузию, сводящуюся к неравенству $T \lesssim 10^{-17} \text{ К}$.

Предположение о делокализации дефектов означает, что при достаточно малой концентрации и очень низких температурах /см. § 14/ справедлива газокинетическая модель, в которой коэффициент диффузии обратно пропорционален концентрации:

$$D_0 \sim \frac{Aa^2}{h^2 \sigma x}. \quad /1/$$

В работах же^{13,14} был получен закон изменения коэффициента диффузии

с температурой:

$$D_T \sim a s \left(\frac{\Delta}{\theta_p} \right)^2 \left(\frac{\theta_p}{T} \right)^9, \quad \theta_p = \frac{\hbar s}{2a}, \quad /2/$$

область применимости которого позже была расширена⁸¹ до температур, близких к дебаевской*, когда длина свободного пробега квазичастицы становится порядка, или даже меньше постоянной решетки.

Можно было ожидать, что такое быстрое возрастание диффузии с понижением температуры будет легко обнаружено экспериментально. Однако как эксперименты по диффузии вакансий в ³Ne⁸², так и по диффузии примесей¹⁸ с концентрацией $x \gtrsim 2\%$ указывали на классическое экспоненциальное убывание диффузии вплоть до температуры расслоения.

Впервые квазичастичное поведение примесей было обнаружено экспериментально в 1972 г. Ричардсом, Поупом и Уайдомом¹⁵ /см. также⁸³/ по концентрационной зависимости /1/ в области низкотемпературного плато, когда преобладает дефектон-дефектонное рассеяние. Однако для туннельной частоты Λ /обозначенной там J_{34} / они получили очень малую величину

$$J_{34} \sim 10^{-3} J_{33} \sim 10^{-7} \text{ К} \quad /3/$$

/ J_{33} - обменный интеграл в чистом ³Ne/, интерпретация которой вызвала определенные трудности, так как физических причин для такой малости нет.

Ландесманом и Винтером¹⁶, а позже и Хуангом и др.⁸⁴, была выдвинута модель /которую они считали альтернативной/, приводящая к другой зависимости коэффициента диффузии от концентрации:

$$D \sim \frac{J a^2}{\hbar x^{4/3}}, \quad J = \frac{J'^2}{K}, \quad /4/$$

где J' - обменный интеграл в чистом веществе, а K - феноменологический параметр, описывающий отталкивание атомов в одном узле. В качестве применимости закона /4/ авторы¹⁶ указали $x > 10^{-6}$, оставляя газокинетической теории экспериментально недоступную область $x < 10^{-6}$. Точность эксперимента, однако, оказалась недостаточной для того, чтобы отличить концентрационные зависимости /1/ и /4/, если неизвестна туннельная частота. Необходимую дополнительную информацию могла дать только температурная зависимость /2/.

* Этот результат имеет принципиальное значение, указывая на квазичастичное поведение дефектов в условиях динамического сбоя уровней. Для твердого гелия, однако, он носит формальный характер, так как кристалл гелия плавится при температурах значительно ниже дебаевской.

Впервые возрастание коэффициента диффузии с понижением температуры было обнаружено в 1973 г. Григорьевым, Есельсоном, Михеевым и Шульманом¹⁷ /см. также¹⁸/ . Обработка экспериментальных данных по теории¹¹ дала для туннельной частоты значение, согласующееся по порядку с /3/.

Правильное значение туннельной частоты впервые было получено автором²⁰ после обработки данных этих же экспериментов по теории^{13,14}. Туннельная частота оказалась на два порядка больше, чем /3/, а ширина зоны $\Delta \sim 10^{-4}$ К. Одновременно были определены и характерные значения для сечений дефектон-дефектонного рассеяния, которые, в согласии с предсказаниями теории¹³, оказались аномально большими. Были указаны также температурные и концентрационные области применимости законов /1/ и /2/ и те причины, по которым температурная зависимость /2/ не была обнаружена раньше. Дальнейшие эксперименты^{77-79,85,86} подтвердили правильность теории и дали возможность уточнить параметры дефектонной зоны и дефектон-дефектонного рассеяния. Что же касается закона /4/, то, как было показано Андреевым²², он действительно может иметь место, но в другой концентрационной области, и является следствием взаимодействия дефектонов.

Дальнейшее увеличение концентрации дефектов приводит к разрушению когерентного состояния, и дефекты локализуются. Их кинетика в этой области рассмотрена подробно в работах Кагана с сотр.^{38,37,80}.

§ 10. Делокализация дефекта

Разнообразные физические причины могут вызвать образование локализованного точечного дефекта в кристалле. Поэтому процесс делокализации дефекта и его превращения в дефектон представляет определенный интерес.

Рассмотрим временное уравнение Шредингера

$$i \hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi. \quad /1/$$

Нам нужно решение $\Psi_{\vec{z}}(x, t)$, которое при $t=0$ совпадает с функцией, описывающей состояние кристалла с локализованным дефектом:

$$\Psi_{\vec{z}}(x, 0) = \Psi_{\vec{z}}(x). \quad /2/$$

Как было показано в § 4, в качестве собственных функций гамильтониана можно взять дефектонные функции /4.10/. Стационарные же решения уравнения /1/ имеют вид

$$\Psi_k(x, t) = \Psi_k(x) e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon(k)t} \quad /3/$$

Тогда, согласно общим принципам квантовой механики, искомую функцию $\Psi_{\vec{z}}(x, t)$ можно представить в виде суперпозиции функций /3/:

$$\Psi_{\vec{z}}(x, t) = \int G(x, x; t) \Psi_{\vec{z}}(x) dx,$$

где функция Грина

$$G(x, x; t) = \sum_k \Psi_k(x) \Psi_k(x) e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon(k)t}.$$

Для простоты рассмотрим простую кубическую решетку с законом дисперсии /4.15/. Тогда

$$G(x, x; t) = \sum_{\vec{p}} e^{i\frac{\pi}{2}(p_x + p_y + p_z)} J_{p_x}(\omega_0 t) J_{p_y}(\omega_0 t) J_{p_z}(\omega_0 t) \Psi_{\vec{z}}(x) \Psi_{\vec{z}-\vec{p}}(x) \quad /4/$$

и, следовательно

$$\Psi_{\vec{z}}(x, t) = \sum_{\vec{p}} e^{i\frac{\pi}{2}(p_x + p_y + p_z)} J_{p_x}(\omega_0 t) J_{p_y}(\omega_0 t) J_{p_z}(\omega_0 t) \Psi_{\vec{z}+\vec{p}}(x),$$

где $J_p(x)$ - функция Бесселя, $\omega_0 = A/\hbar$.

Вероятность нахождения дефекта в \vec{z} -ой ячейке дается квадратом модуля коэффициента перед $\Psi_{\vec{z}}(x)$:

$$W(\vec{z}+\vec{p}, t) = J_{p_x}^2(\omega_0 t) J_{p_y}^2(\omega_0 t) J_{p_z}^2(\omega_0 t).$$

Естественно,

$$\sum_{\vec{p}} W(\vec{z}+\vec{p}, t) = 1.$$

Дифференцируя W по времени и используя тождество

$$2 \frac{dJ_n(z)}{dz} = J_{n-1} - J_{n+1} \approx -2 \frac{dJ_n}{dn},$$

получаем уравнение непрерывности для процесса делокализации в виде

$$\dot{W} + \vec{v}_0 \nabla W = 0, \quad \vec{v}_0 = \omega_0 a \vec{p} / p$$

или

$$\dot{w} + \text{div}(w \vec{v}_0) = 0,$$

где $w = W/V$ - объемная плотность квазичастиц.

Средний квадрат расстояния, проходимого дефектоном за время t , равен

$$\langle \rho^2 \rangle = \sum_{\vec{p}} \vec{p}^2 W(\vec{p}, t) = v^2 t^2, \quad v = \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{Aa}{\hbar}. \quad /5/$$

Следовательно, фронт волны делокализации движется с постоянной скоростью /5/. С той же скоростью происходит и уменьшение вероятности нахождения дефекта в своем узле в начале процесса делокализации:

$$|\Psi_{\vec{z}}(t)|^2 = |\Psi_{\vec{z}}|^2 (1 - v^2 t^2).$$

Таким образом, характерное время делокализации $\tau_0 \sim \hbar/A$. Для вакансии это время $\tau_0 \sim 10^{-11}$ с., а для примеси $\tau_0 \sim 10^{-7} - 10^{-6}$ с.

Для когерентного поведения квазичастицы необходимо, чтобы все времена свободного пробега были больше времени делокализации. В газокинетическом приближении время пробега τ относительно дефектон-дефектонных столкновений равно

$$\tau = \frac{1}{\chi \sigma v} = \tau_0 \frac{1}{\chi \sigma},$$

где σ - сечение рассеяния /в единицах a^2 /. Тогда условие когерентности принимает вид

$$\chi \sigma < 1. \quad /6/$$

Это условие в дальнейшем будет играть существенную роль, поскольку, как будет показано, сечения σ аномально велики.

§ 11. Рассеяние фононов на дефектах

При нулевой температуре дефектон движется сквозь кристалл без диссипации. Ввиду малости его скорости по сравнению со скоростью звука, существующий в кристалле "газ" нулевых фононов успевает подстраиваться к нему, и дефектон движется вместе с адиабатически подстроенным фононным облаком, который влияет, в основном, на его массу.

При повышении температуры начинается рассеяние тепловых фононов на дефектоне. Так как масса дефектона велика, а время его жизни много больше времени релаксации фононного газа, то рассеяние происходит, как на силовом центре. Поэтому сечение рассеяния фононов на дефектоне можно заменить сечением рассеяния на неподвижном дефекте. Как было показано И.М.Лифшицем⁶⁵, такую задачу можно решить аналитически, благодаря локальному характеру матрицы возмущения /4.3/. В таком случае волновая функция рассеянного фонона дается выражением

$$\chi_{jk}^{\sigma(R)} = \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{1}{m} \sum_i \int \frac{\lambda_{\vec{k}\vec{j}}^{ji} q_i^{\sigma}(\vec{j}) e^{i\vec{j}\vec{R}}}{\omega^2 - \mu_i(\vec{j}) + i0} d^3j, \quad /1/$$

где

$$\lambda_{\vec{k}\vec{h}}^{ji} = \sum_{\substack{R_1, R_2 \\ \sigma_1, \sigma_2}} q_i^{\sigma_1(\vec{h})} e^{-i\vec{h}\vec{R}_1} \Lambda_{R_1, R_2}^{\sigma_1, \sigma_2} \tau_{R_2, j}^{\sigma_2}$$

$$\tau_{R_j}^{\sigma} + \sum_{R_1, R_2} \tau_{R_2, j}^{\sigma_2} \beta_{R_2, R}^{\sigma_2, \sigma} = q_j^{\sigma}(\vec{k}) e^{i\vec{k}\vec{R}} \quad /2/$$

$$\beta_{R_2, R}^{\sigma_2, \sigma} = \frac{V}{(2\pi)^3} \sum_i \frac{1}{m} \int \frac{d^3 h}{\mu_i(\vec{h}) - \omega^2 - i0} \sum_{R_1, \sigma_1} q_i^{\sigma_1(\vec{h})} e^{-i\vec{h}\vec{R}_1} \Lambda_{R_1, R_2}^{\sigma_1, \sigma_2} e^{i\vec{h}\vec{R}_2} q_i^{\sigma_2(\vec{h})}$$

V - объем элементарной ячейки, $\mu_i(\vec{h})$ - закон дисперсии i -й ветви колебаний, $q_i^{\sigma}(\vec{h})$ - векторы поляризации. Видно, что фотон с частотой ω при рассеянии порождает фотоны всех ветвей, для которых $\mu_i(\vec{h}) = \omega^2$. Однако, поскольку твердый гелий существует только при температурах много ниже дебаевской, интерес представляет только рассеяние длинноволновых акустических фотонов. Если длина волны много больше размера неоднородности, то, в силу условия /4.4/, величины $\beta_{RR'}^{\sigma\sigma'}$ малы, а их сумма равна нулю

$$\beta_{RR'}^{\sigma\sigma'} \ll 1, \quad \sum_{R_2} \beta_{R_2, R}^{\sigma_2, \sigma} = 0. \quad /3/$$

Следовательно, в /2/ можно пренебречь суммой. В результате

$$\lambda_{\vec{k}\vec{h}}^{ji} = \sum_{\substack{R_1, R_2 \\ \sigma_1, \sigma_2}} q_i^{\sigma_1(\vec{h})} e^{-i\vec{h}\vec{R}_1} \Lambda_{R_1, R_2}^{\sigma_1, \sigma_2} e^{i\vec{k}\vec{R}_2} q_j^{\sigma_2}(\vec{k}), \quad /4/$$

а функция рассеянного фотона

$$\chi_{jk}^{\sigma}(\vec{R}) = \sum_{\sigma_1, \sigma_2} q_j^{\sigma_2} q_i^{\sigma_1} q_i^{\sigma} \frac{V}{m s_i^2} \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3 h}{k_i^2 - h^2 - i0} \sum_{R_1, R_2} \vec{k}\vec{R}_1 \Lambda_{R_1, R_2}^{\sigma_1, \sigma_2} \vec{h}\vec{R}_2 e^{i\vec{h}\vec{R}}$$

где учтено, что для длинных волн $\mu_i(\vec{h}) = s_i^2 h^2$ и введено обозначение $k_i = \omega/s_i$ / s_i - скорость звука i -й ветви/. Для получения амплитуды рассеяния нужна асимптотика этой функции на больших расстояниях, пропорциональная R^{-1} :

$$\chi_{jk}^{\sigma}(\vec{R}) = \frac{V}{4\pi} \sum_{\sigma_1, \sigma_2} q_j^{\sigma_2} q_i^{\sigma} q_i^{\sigma_1} \frac{1}{m s_i^2} \sum_{R_1, R_2} \vec{k}\vec{R}_1 \Lambda_{R_1, R_2}^{\sigma_1, \sigma_2} \vec{k}_i \vec{R}_2 \frac{e^{i\vec{k}_i \vec{R}}}{R}, \quad \vec{k}_i = \frac{\vec{k}_i \vec{R}}{R}$$

Сечение рассеяния фотона j -й ветви колебаний с поляризацией σ , в результате которого получается фотон i -й ветви с поляризацией σ' , дается выражением ¹³:

$$d\sigma_{j\vec{k}, i\vec{k}'}^{\sigma\sigma'} = \left(\frac{V}{4\pi m s_i^2}\right)^2 (q_i^{\sigma})^2 \left\{ \sum_{\sigma_1, \sigma_2} q_i^{\sigma_1} q_j^{\sigma_2} \sum_{R_1, R_2} \vec{k}\vec{R}_1 \Lambda_{R_1, R_2}^{\sigma_1, \sigma_2} \vec{k}_i \vec{R}_2 \right\}^2 d\Omega' \quad /5/$$

где $d\Omega' = 2\pi \sin\alpha d\alpha$, α - угол между направлениями налетающего и рассеянного фотонов. Усредняя /5/ по ветвям и поляризациям падающих фотонов и суммируя по ветвям и поляризациям рассеянных фотонов, получаем общую формулу для сечения рассеяния фотонов на локальном дефекте любой симметрии

$$d\sigma_{\vec{k}\vec{k}'} = \frac{V^2}{(2\pi)^2} k^4 \sum \vec{n}\vec{n}' d\Omega, \quad /6/$$

где

$$\sum \vec{n}\vec{n}' = \frac{1}{12 m^2 s^4} \sum_{\sigma_1, \sigma_2} \left\{ \sum_{R_1, R_2} \vec{n}\vec{R}_1 \Lambda_{R_1, R_2}^{\sigma_1, \sigma_2} \vec{n}'\vec{R}_2 \right\}^2, \quad \vec{n} = \frac{\vec{k}}{k}, \quad \vec{n}' = \frac{\vec{k}'}{k'} \quad /7/$$

Таким образом, в простых решетках сечение рассеяния $\sigma_{kk'} \sim k^4$.

В сложных решетках вместо /4/ имеем матрицу

$$\tilde{\lambda}_{\vec{k}\vec{h}}^{ji} = \sum_{\substack{R_1, R_2 \\ s s', \sigma \sigma'}} q_i^{s\sigma}(\vec{h}) e^{-i\vec{h}\vec{R}_1} \Lambda_{R_1, R_2}^{s\sigma s'\sigma'} e^{i\vec{k}\vec{R}_2} q_j^{s'\sigma'}(\vec{k}), \quad /8/$$

элементы которой, вообще говоря, не исчезают при $k \rightarrow 0$. Если, однако, хотя бы один из индексов i или j относится к акустической ветви, то

$\tilde{\lambda}_{oo}^{ij} = 0$. Это следует сразу из /4.4а/, если учесть, что для акустических ветвей векторы поляризации не зависят от номера атома в ячейке s . Таким образом, в этом случае сечение рассеяния определяется формулами /6/ и /7/, где следует сделать замену

$$\Lambda_{R_1, R_2}^{\sigma_1, \sigma_2} = \sum_{s s'} \Lambda_{R_1, R_2}^{s\sigma_1 s'\sigma_2}$$

Таким образом, для акустических фотонов снова $\sigma \sim k^4$, а для оптических $\sigma = const.$

Используя соотношения /4.5/, легко выразить элементы матрицы возмущения через макроскопические характеристики среды. Для вакансии в кубическом кристалле имеем, с учетом /4.5/ ¹³:

$$\sum \vec{n}\vec{n}' = (\vec{n}\vec{n}')^2,$$

а формула /6/ переходит в

$$d\sigma_{\vec{k}\vec{k}'} = \frac{a^2}{(2\pi)^2} (ka)^4 (\vec{n}\vec{n}')^2 d\Omega'. \quad /9/$$

Если дефектом является атом замещения, эту величину нужно умножить еще на "интенсивность" возмущения σ_o . Если основное отличие дефекта связано с его массой, то ⁸⁷ $\sigma_o = (\Delta m/m)^2$. В действительности /см. §2/ дефекты в квантовых кристаллах всегда меняют и силовые постоянные ⁸⁸, вклад которых в интенсивность $\sigma_o = (\Lambda_{oo}/L_{oo})^2$.

§ 12. Температурная зависимость коэффициента диффузии

Для вычисления коэффициента диффузии воспользуемся сечением рассеяния, полученным в предыдущем параграфе. Поскольку в рассматриваемом приближении дефектон взаимодействует только с фононами, то интеграл столкновений легко определить, и коэффициент диффузии можно найти с помощью уравнения Больцмана. Однако специфические особенности поведения дефектона в фононном газе дают возможность решить задачу, не прибегая к кинетическому уравнению, а следуя методу, использованному в работах 13,72.

Поскольку скорость фонона мала по сравнению со скоростью звука в кристалле, основную роль играют двухфононные процессы. При этом законы сохранения энергии и квазиимпульса имеют вид:

$$\mathcal{E}(\vec{p}) + \hbar s k = \mathcal{E}(\vec{p}') + \hbar s k' \quad /1/$$

$$\vec{p} + \vec{k} = \vec{p}' + \vec{k}' + 2\pi \vec{b}. \quad /2/$$

Здесь \vec{k} - волновой вектор фононов, $\mathcal{E}(\vec{p})$ - закон дисперсии дефектона, \vec{b} - вектор обратной решетки. Использование линейного закона дисперсии для фононов оправдано низкими температурами по сравнению с температурой Дебая. Поскольку фононный газ можно считать равновесным, то среднее значение квазиимпульса фонона $\hbar k \sim T/s$. Малость фононного импульса позволяет исключить процессы переброса. В принципе, температура может быть как больше, так и меньше ширины дефектонной зоны. В обоих случаях, однако, относительные изменения энергии и квазиимпульса дефектона при столкновении малы. Обозначим

$$\theta_p = \frac{\hbar s}{2a}. \quad /3/$$

Тогда, если $\Delta \ll T \ll \theta_p$, то из /1/ и /2/ следует

$$\frac{\mathcal{E}(\vec{p}') - \mathcal{E}(\vec{p})}{\Delta} = \frac{\hbar s(k - k')}{\Delta} = \frac{\hbar \vec{v}(\vec{k} - \vec{k}')}{\Delta} \leq \frac{2T\vec{v}}{s\Delta} \sim \frac{T}{\theta_p} \ll 1, \quad /4/$$

$$\frac{|\vec{p} - \vec{p}'|}{p} = \frac{|\vec{k} - \vec{k}'|}{p} \leq \frac{2T}{\hbar s p} \sim \frac{T}{p a \theta_p} \ll 1; \quad \vec{v} = \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \vec{p}}. \quad /5/$$

Если же $T < \Delta < \theta_p$, то закон дисперсии можно считать квадратичным, и использовать приближение эффективной массы

$$\mathcal{E}(\vec{p}) = \frac{\hbar^2 p^2}{2m^*}.$$

В этом случае изменение волнового вектора фонона по величине равно

$$\mathcal{H} \equiv k' - k = \frac{k}{p_0} \vec{p}(\vec{n}' - \vec{n}) - \frac{k^2}{p_0} (1 - \vec{n} \vec{n}'), \quad /6/$$

где $p_0 = \frac{m^* s}{\hbar} = \frac{2\theta_p}{A a}$, а $\vec{n} = \frac{\vec{k}}{k}$ и $\vec{n}' = \frac{\vec{k}'}{k'}$ - направления налетающего и рассеянного фононов. Для переданного при столкновении волнового вектора имеем

$$\vec{q} = \kappa(\vec{n} - \vec{n}') + \mathcal{H} \vec{n}'. \quad /7/$$

Таким образом, относительные изменения энергии и волнового вектора дефектона малы и в этом случае:

$$\frac{\Delta \mathcal{E}}{\mathcal{E}(p)} \sim \frac{\kappa}{p} \sim \frac{\sqrt{AT}}{\theta_p} \ll 1, \quad \frac{q}{p} \sim \frac{\kappa}{p} \ll 1.$$

Что касается волнового вектора фонона, то при каждом столкновении он меняет сильно свое направление, оставаясь практически постоянным по величине. Таким образом, ситуация напоминает движение тяжелой частицы в газе легких.

Найдем сначала коэффициент диффузии дефектона в импульсном пространстве. Очевидно, изменение квадрата импульса в единицу времени дается интегралом

$$\langle q^2 \rangle = \frac{3s}{(2\pi)^3 a^5} \int d^3 k d\sigma_{\vec{k}\vec{k}'} n(\vec{k})(\vec{k} - \vec{k}')^2, \quad /8/$$

где $n(\kappa) = \left\{ \exp \frac{\hbar s \kappa}{T} - 1 \right\}^{-1}$ - функция распределения фононов, а сечение

$d\sigma_{\vec{k}\vec{k}'}$ описывается формулой /10,9/, умноженной на зависящую от типа дефекта интенсивность σ_0 . При низких температурах $T \ll \theta_p$ интеграл /8/ выражается через ζ -функцию Римана:

$$\langle q^2 \rangle = \alpha \frac{\sigma_0 s}{a^3} \left(\frac{T}{\theta_p} \right)^9, \quad \alpha = \frac{\pi^5 \zeta(9)}{240 \zeta(8)} \approx 1,27. \quad /9/$$

Определим время свободного пробега как время, за которое переданный квадрат квазиимпульса становится порядка квадрата начального квазиимпульса частицы:

$$\tau = \tau_0 \frac{1}{\alpha \sigma_0} \frac{\overline{\mathcal{E}(p)}}{\theta_p} \left(\frac{\theta_p}{T} \right)^9, \quad \tau_0 = \hbar / A \quad /10/$$

/черта над буквой означает усреднение по температуре/. Тогда длина свободного пробега выражается как путь, пройденный за время τ :

$$\ell = \frac{\sqrt{2}}{\alpha} \frac{a}{\sigma_0} \frac{\overline{\mathcal{E}(p)}^{3/2}}{\theta_p \sqrt{A}} \left(\frac{\theta_p}{T} \right)^9, \quad /11/$$

а коэффициент диффузии

$$D_T = \frac{as}{3\alpha\sigma_0} \left(\frac{\overline{\varepsilon(\rho)}}{\theta_p} \right)^2 \left(\frac{\theta_p}{T} \right)^9 \quad /12/$$

Наличие девятой степени температуры имеет наглядный физический смысл - три степени связаны с числом фононов, четыре - с сечением рассеяния, и две - с "неэффективностью" столкновений /при рассеянии "легкой" частицы на тяжелой/.

Существенно, что в /10/ - /12/ в качестве температурного параметра входит не температура Дебая /как предполагалось в 11,18,22,51 и др./, а $\theta_p \approx \theta/8$. Таким образом, результаты упомянутых работ отличаются от наших большим множителем $\sim 10^8$ и, естественно, не могли описывать экспериментальные результаты даже приближенно.

Вообще говоря, среднее значение $\overline{\varepsilon(\rho)}$ зависит как от рассматриваемой температурной области, так и от статистики квазичастиц. Поэтому в случае фермиевской статистики

$$D_F \sim \frac{as}{\sigma_0} x^{4/3} \left(\frac{\Delta}{\theta_p} \right)^2 \left(\frac{\theta_p}{T} \right)^9, \quad /13/$$

а в бозевском случае

$$D_B \sim \frac{as}{\sigma_0} \left(\frac{\theta_p}{T} \right).$$

Температура вырождения дефектного газа T_0 , однако, чрезвычайно мала:

$$T_0 \sim Ax^{2/3}. \quad /14/$$

Поэтому практически во всей экспериментально доступной области температур $T_0 \ll T$. Если при этом $T < \Delta$, то применима статистика Больцмана, и $\overline{\varepsilon(\rho)} = \frac{3}{2}T$. В этом случае время свободного пробега и коэффициент диффузии равны

$$\tau_B \approx 1,18 \frac{\tau_0}{\sigma_0} \left(\frac{\theta_p}{T} \right)^8, \quad D_B \approx 0,59 \frac{as}{\sigma_0} \left(\frac{\theta_p}{T} \right)^7 \quad /15/$$

Из последнего выражения и соотношения Эйнштейна можно получить подвижность β дефектона в фоновом газе:

$$\beta = \frac{D_B}{T} = 1,18 \frac{\alpha^2}{\hbar\sigma_0} \left(\frac{\theta_p}{T} \right)^8 \quad /16/$$

Естественно, это же значение подвижности можно получить также из прямого подсчета силы, испытываемой движущейся в газе квазичастицей. Действительно, в системе, в которой дефектон покоится, функция распределения фононов имеет вид $\tilde{n}(\vec{k}) = n(\varepsilon - \hbar\vec{k}\vec{v})$, а силу, действующую на него, можно записать как изменение квазиимпульса за единицу времени:

$$\vec{F} = \frac{3s\hbar}{(2\pi)^3} \int d^3k d\sigma_{\vec{k}\vec{k}'} \tilde{n}(\vec{k}) k(\vec{n} - \vec{n}') = \beta^{-1} \vec{v}.$$

В первом приближении по малому параметру v/s вычисленная таким образом подвижность совпадает с формулой /16/.

Если $T > \Delta$, зона заполнена равномерно, и $\overline{\varepsilon(\rho)} = \Delta$. В этой, наиболее интересной с экспериментальной точки зрения, области,

$$\tau = \frac{\tau_0}{\alpha\sigma_0} \frac{\Delta}{\theta_p} \left(\frac{\theta_p}{T} \right)^9, \quad D_T = \frac{as}{3\alpha\sigma_0} \left(\frac{\Delta}{\theta_p} \right)^2 \left(\frac{\theta_p}{T} \right)^9 \quad /17/$$

Из приведенного вывода следует, что полученные формулы справедливы при $\ell \gg a$, т.е. если длина свободного пробега больше постоянной решетки. Это условие приводит к неравенству $T < T_K$, где

$$T_K = \theta_p \left(\frac{\sqrt{2}\Delta}{\alpha\sigma_0} \frac{\Delta}{\theta_p} \right)^{1/9} \quad /18/$$

При температурах $T > T_K$ длина свободного пробега становится меньше межатомных расстояний, а время пробега τ меньше времени делокализации. В результате дефектон начинает проводить большую часть времени в пределах ячейки, и лишь изредка совершает отдельные переходы /туннельные или активационные/ в соседние узлы. При $T = T_K$ коэффициент диффузии

$$D \sim \frac{a^2\Delta}{\hbar} \quad /19/$$

Его поведение при более высоких температурах требует специального рассмотрения.

§ 13. Рассеяние дефектонов на дефектонах

Рассеяние дефектонов на дефектонах обладает рядом своеобразных особенностей, связанных с шириной дефектонной зоны 13,14,20,72,22,28. Следует различать два предельных случая - узкая примесонная зона, ширина которой $\sim 10^{-4}$ К, много меньше характерной энергии взаимодействия между дефектами $V_0 10^{-2}$ К, и широкая вакансионная зона $\Delta_v \lesssim 10$ К. Рассеяние в этих двух случаях происходит различно.

Важным следствием узости примесонной зоны является то, что рассеяние происходит не на ядре дефекта, а на окружающем его поле деформации. Поэтому методы, основанные на локальности возмущения /см. § 11/, оказываются непригодными. С другой стороны, поведение поля деформации на больших расстояниях одинаково для широких классов твердых тел, что позволяет исследовать рассеяние в общем случае.

Так, в кристаллах точечные дефекты взаимодействуют по закону

$$\varphi(\vec{r}) = V_0 \Gamma(\vec{n}) \left(\frac{a}{r}\right)^3 \quad /1/$$

где $\Gamma(\vec{n})$ - функция направления /порядка единицы/, исчезающая при усреднении по углам. В пространственно-изотропной же среде

$$\varphi(r) = V_0 \left(\frac{a}{r}\right)^6 \quad /2/$$

Рассмотрим сначала общие свойства рассеяния дефектонов в поле

$$\varphi(r) = V_0 \left(\frac{a}{r}\right)^n \quad /3/$$

В случае примесей ^3He в ^4He величина $V_0 \sim 10^{-2}$ К. Она на два порядка больше ширины примесонной зоны и на два порядка меньше ширины вакансионной зоны.

Малая ширина примесонной зоны приводит к своеобразному захвату квазичастиц не только в минимумах упругого поля, но и в местах с большими градиентами. 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 $\varphi(\vec{r})$ на длине постоянной решетки, т.е. если $|\nabla\varphi|a > \Delta$. Подставим сюда φ из /3/ и выразим среднее расстояние между частицами через их концентрацию $x \approx (a/R)^3$. В результате оказывается, что при концентрациях $x > x_c$, где

$$x_c = \left(\frac{\Delta}{nV_0}\right)^{\frac{3}{n+1}}, \quad /4/$$

все дефекты локализованы¹¹. Для изотопических примесей гелия при $n = 3$ получаем, что

$$x_c \approx 1 \div 2\%. \quad /5/$$

Благодаря малой ширине энергетической зоны вокруг дефекта создаются большие области, недоступные для квазичастиц^{13,72}. Их линейный размер можно оценить из соотношения

$$\varphi(R_0) = \Delta, \quad R_0 = a \left(\frac{V_0}{\Delta}\right)^{1/n} \quad /6/$$

Таким образом, для сечения рассеяния в поле /3/ имеем

$$\sigma \approx \pi a^2 \left(\frac{V_0}{\Delta}\right)^{2/n} \quad /7/$$

Эти оценки можно улучшить, если учесть, что в реальных условиях эксперимента температура $T \gg \Delta$ и, следовательно, применимо условие квазиклассического приближения

$$(ka)^{n-2} \gg \frac{A}{V_0} \approx \frac{\Delta}{zV_0} \quad /8/$$

В этом случае сечение

$$\sigma \approx 2\pi a^2 \left(\frac{V_0}{Aka}\right)^{\frac{2}{n-1}} \sim \pi a^2 \left(\frac{V_0}{\Delta}\right)^{\frac{2}{n-1}} \quad /9/$$

принимает /при $n = 3$ / аномально большие значения $\sigma \sim 10^2 a^2$.

При $n = 3$ формула /9/ дает $\sigma \sim \Delta^{-1}$. Такая же пропорциональность следует из теории Ландесмана⁸⁹ и Ямашиты⁹⁰ для сильно взаимодействующих квазичастиц. Этим совпадением можно объяснить отсутствие изменения зависимости коэффициента диффузии от молярного объема с уменьшением концентрации дефектов, обнаруженное в⁷⁹/см. § 14/.

Условию /8/ можно удовлетворить и при выполнении неравенства

$$A(A/V_0)^{\frac{2}{n-2}} \ll T \ll \Delta.$$

В этом случае $ka \sim (T/A)^{\frac{1}{2}}$, и сечение рассеяния

$$\sigma \approx \pi a^2 \left(\frac{V_0}{TA}\right)^{\frac{1}{n-1}} \quad /9a/$$

растет с понижением температуры до значения

$$\sigma_{\max} \approx \pi a^2 (V_0/A)^{\frac{2}{n-2}} \quad /9b/$$

Обратный предельный случай, соответствующий рассеянию медленной частицы на быстроубывающем поле / $n = 6$ /, может иметь место при рассеянии вакансиона при $T \ll \Delta$. В этом случае сечение не зависит от скорости, а следовательно, и от температуры:

$$\sigma \approx 3,65 \pi a^2 \sqrt{V_0/2A}. \quad /10/$$

Формула /10/ хорошо "сшивается" с /9b/ при $n = 6$.

Если вакансион рассеивается на вакансионе, то $V_0 \sim ms^2$, $A \sim 1\text{К}$, и $\sigma \sim 50a^2$.

При рассеянии дефектонов возможны также случаи, когда $\Delta \gg V_0$ /например, при рассеянии вакансиона на изотопической примеси/. В этом случае справедливо борновское приближение, и задача может быть решена до конца с учетом точной угловой зависимости взаимодействия^{14,72}. Для простых кубических кристаллов $\Gamma(\vec{n})$ имеет вид

$$\Gamma(\vec{n}) = \sum_i n_i^4 - \frac{3}{5}, \quad /11/$$

где n_i - компоненты единичного вектора направления в решетке. Согласно общей теории, амплитуда рассеяния

$$F(\vec{n}) = a \frac{V_0}{2\pi A} \int \Gamma(\vec{n}) e^{i\vec{f}\vec{z}} d^3z,$$

где $\vec{f} = \vec{k}' - \vec{k}$ - переданный при столкновении волновой вектор. Оказывается, что амплитуда рассеяния имеет такую же угловую зависимость, что и потенциал рассеяния, а дифференциальное сечение равно

$$d\sigma = \frac{4}{225} a^2 (V_0/A)^2 \Gamma(\vec{n})^2 d\Omega. \quad /12/$$

При этом следует иметь в виду, что использованный потенциал взаимодействия имеет место только на больших расстояниях от дефекта. Рассеяние же на ядре дефекта требует отдельного рассмотрения.

Рассмотрим кратко роль статистики. Если дефектоны подчиняются статистике Ферми-Дирака, то квазиимпульсы сталкивающихся квазичастиц должны оставаться вблизи квазиимпульса Ферми как до, так и после столкновения. Поскольку сечение рассеяния пропорционально числу конечных состояний, оно пропорционально температуре:

$$\sigma = \sigma' T / \varepsilon_F, \quad /13/$$

где ε_F - энергия Ферми. Величина σ' в случае кубического закона взаимодействия в квазиклассическом приближении имеет вид^{71,91}

$$\sigma' = 2\pi^2 \frac{V_0 a}{\hbar v_F}, \quad /14/$$

где v_F - скорость Ферми. Таким образом, сечение рассеяния зависит не только от отношения V_0/A , но и от концентрации:

$$\sigma \sim T \frac{V_0}{A^2 x}, \quad T < Ax^{2/3}. \quad /15/$$

Условие справедливости /14/ и /15/ следует из /8/, в котором следует учесть, что $k_F a \sim x^{1/3}$, и имеет вид

$$x > (A/V_0)^3. \quad /16/$$

Наконец, отметим, что характерное отношение V_0/A сильно зависит от давления, быстро возрастая с уменьшением молярного объема.

§ 14. Низкотемпературная диффузия

С понижением температуры коэффициент диффузии, обусловленный взаимодействием с фононами, возрастает, что связано с уменьшением числа фононов и эффективного сечения рассеяния. Естественным ограничением этого роста являются другие механизмы рассеяния дефектонов, среди которых особый интерес представляет дефектон-дефектонное рассеяние, которое и является определяющим при достаточно низких температурах /соответствующие условия см. в § 15/.

Если концентрация дефектов x достаточно мала, то для вычисления коэффициента диффузии можно использовать газовое приближение. Если через σ обозначить сечение рассеяния дефектона на дефектоне /в единицах a^2 /, то длина свободного пробега

$$l = \frac{a}{\sqrt{2} x \sigma}. \quad /1/$$

Средняя скорость зависит, вообще говоря, от температуры. Если $T \gg \Delta$, что реализуется в экспериментах по диффузии примесей в гелии, то

$$v \approx s \left(\frac{\pi}{2}\right)^{1/2} \frac{A}{\theta_p}.$$

Тогда коэффициент диффузии

$$D_0 = \frac{\sqrt{2}}{3} \frac{A a^2}{\hbar x \sigma} = \frac{1}{6\sqrt{2}} \frac{a s \Delta}{x \sigma \theta_p}, \quad /2/$$

где s - скорость звука.

Для того, чтобы дефектоны были хорошими квазичастицами, их длина свободного пробега должна быть больше постоянной решетки, что выполняется при концентрациях

$$x < x_c \equiv \sigma^{-1}. \quad /3/$$

Это неравенство совпадает с условием когерентности /10.6/.

Как было показано в предыдущем параграфе, сечения рассеяния узкозонных дефектонов большие. Поэтому условие /3/ является более слабым, чем требование применимости газового приближения $x^{-1/3} \gg R \sim \sqrt{\sigma}$. Таким образом, газокинетическая формула /2/ справедлива для концентраций

$$x < \sigma^{-3/2} < \sigma^{-1} = x_c. \quad /4/$$

Концентрация x_c оказывается также не меньше критической концентрации x_c /13.4/. Поэтому процесс локализации можно рассматривать в терминах квазичастиц. Используя результаты предыдущего параграфа, можно выделить следующие концентрационные области в зависимости от степени

малого параметра $\xi = \Delta/V_0$:

- I. $x < \xi^{3/n-1} \lesssim 10^{-3}$ - газовое приближение
- II. $\xi^{3/n-1} < x < (\xi/n)^{3/n+1} \sim 10^{-2}$ - область взаимодействующих квазичастиц
- III. $(\xi/n)^{3/n+1} < x$ - область локализованных дефектонов

/численные значения вычислены для $n = 3$./

Длина свободного пробега во второй области ограничена рассеянием на границах дефектной зоны /рис.7/. Она определяется условием $\ell |\nabla \varphi| = \Delta$, запрещающим нарастанию энергии квазичастицы на длине свободного пробега больше, чем ширина энергетической зоны. Поэтому коэффициент диффузии в этой области ^{16,22,84}

$$D \sim \frac{\Delta^2}{V_0 \times \frac{n+1}{3}} \quad /5/$$

Существенно, что сечения сами зависят от ширины зоны Δ . Это сказывается не только на допустимых значениях концентрации. Знание функции $D(\Delta)$ дает возможность определить зависимость D от молярного объема. Так как в различных концентрационных областях зависимость $D(\Delta)$ разная, то, проследивая ее при изменении концентрации, можно обнаружить смену механизма рассеяния.

Приведем пример. В работе ⁷⁹ было проведено исследование сечения рассеяния σ как функции от молярного объема V_m . Определению подлежала степень ε в выражении

$$\sigma \sim \left\{ V_0(V_m)/\Delta(V_m) \right\}^\varepsilon \quad /6/$$

Различные теории предлагали для ε следующие значения:

- 0 - Сакко и Уайдом ⁹²
- 1/2 - Хуанг и др. ⁸⁴
- 2/3 - Андреев ²² /незаконные примесоны/
- 1 - Ландесман ⁸⁹, Ямашита ⁹⁰, Андреев ²² /взаимодействующие примесоны/, Пушкаров /13.9/

Эксперимент подтвердил значение $\varepsilon = 1$ для очень широкой концентрационной области $10^{-4} \leq x \leq 5 \cdot 10^{-3}$, охватывающей как область II, так и I. Таким образом, с понижением концентрации не было обнаружено изменение в зависимости $\sigma(\Delta)$, предсказываемое в ^{22,84,92}. Это указывает на справедливость в этой области формулы /13.9/. С ее

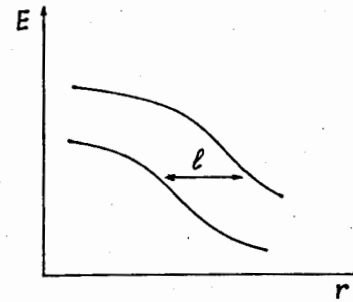


Рис. 7. Изгиб дефектной зоны в поле деформации. Длина свободного пробега ℓ определяется "рассеянием на границах дефектной зоны".

помощью получаем, что коэффициент диффузии в области не взаимодействующих примесонов имеет вид

$$D \sim \frac{a^2 \Delta^2}{\hbar V_0 x} \quad /7/$$

Таким образом, отличие коэффициента диффузии в области I от области II состоит только в их концентрационной зависимости.

В существенно квантовой области ⁷¹ $T < T_0$, диффузия зависит от статистики дефектонов. В случае ферми-статистики коэффициент диффузии в газовом приближении

$$D_F = \frac{1}{3} \ell_F v_F, \quad \text{где } v_F = (3\pi^2)^{1/3} \frac{a A}{\hbar} x^{1/3}, \quad /8/$$

а длина свободного пробега

$$\ell_F = \frac{a}{\sqrt{2} \sigma x_{эфф}}$$

Поскольку в кинетических явлениях принимают участие только дефектоны у поверхности Ферми, то

$$x_{эфф} = x \frac{T}{\varepsilon_F},$$

а сечение рассеяния дается формулами /13.13/ - /13.15/. Поэтому длина свободного пробега ℓ_F и коэффициент диффузии приобретает дополнительный большой множитель $(\varepsilon_F/T)^2$. Окончательно,

$$D_F = \frac{1}{3} \frac{a v_F}{x \sigma_0} \left(\frac{\varepsilon_F}{T} \right)^2 \quad /9/$$

Учитывая /13.14/, формулу /9/ можно переписать также в виде

$$D_F = \frac{3\pi^2 \alpha^2 A^4}{8 \hbar V_0 T^2} x.$$

Оценим еще коэффициент диффузии в бозевском случае. Тогда "действующая" концентрация дефектонов зависит только от температуры:

$$x \approx \frac{1}{6} \left(\frac{T}{A} \right)^{3/2}.$$

Поэтому длина свободного пробега

$$l \approx \frac{6a}{\sqrt{2} \sigma} \left(\frac{A}{T} \right)^{3/2}.$$

Средняя же скорость квазичастицы

$$v \approx 1,75 \frac{a}{\hbar} \sqrt{AT}.$$

Если же длина пробега окажется больше размера образца L , то

$$D \sim \frac{La}{\hbar} \sqrt{AT}.$$

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

По-видимому, диффузия в существенно квантовой области в гелии ненаблюдаема из-за резкого уменьшения концентраций вакансионных /за исключением, может быть, нулевых вакансионных/ с понижением температуры, и из-за фазового расслоения в случае примесей. Для ее наблюдения следует искать другие системы.

§ 15. Сравнение с экспериментом. Определение ширины примесонной зоны из данных по диффузии

Обобщим полученные результаты и сравним их с имеющимися экспериментальными данными по диффузии примесей ^3He в твердом ^4He .

Основные процессы, определяющие диффузию в гелии, это рассеяние на дефектах, приводящее к не зависящему от температуры коэффициенту диффузии /14.2/, и рассеяние на фононах, обуславливающее температурную зависимость диффузии /12.12/ - /12.17/. В интересующем нас случае $T \gg \Delta$,

$$D_T = \frac{\alpha s}{3\alpha \sigma_0} \left(\frac{\Delta}{\theta_p} \right)^2 \left(\frac{\theta_p}{T} \right)^9 \quad /1/$$

Поскольку рассеяние на фононах и дефектах происходит независимо, то полный коэффициент диффузии можно получить ²⁰, складывая /1/ и /12.17/ по "правилу Маттиссена"

$$D^{-1} = D_0^{-1} + D_T^{-1} = \frac{3\theta_p}{\alpha s \Delta} \left\{ 2\sqrt{2} x \sigma + \alpha \sigma_0 \frac{\theta_p}{\Delta} \left(\frac{T}{\theta_p} \right)^9 \right\} \quad /2/$$

Переход с температурного режима /1/ на плато /12.17/ происходит при температуре

$$T^* = T_K \ell^{-1/9} \quad /3/$$

Таким образом, представляющий интерес температурный интервал можно разделить на две части. Область $\Delta < T < T^*$ соответствует примесонно-примесонному рассеянию, а в области $T^* < T < T_K$ преобладает рассеяние на фононах. При $T > T_K$ /12.18/, если кристалл все еще не плавится /наступает классическая активационная диффузия. Ход коэффициента диффузии показан схематически на рис.8. С уменьшением температуры диффузия сначала экспоненциально убывает до температуры T_K , потом быстро возрастает $\sim T^{-9}$, а при $T < T^*$ переходит на плато, зависящее от концентрации /точнее, от произведения $x\sigma$ /. Если $x\sigma \rightarrow 1$, то, согласно /3/, $T^* \rightarrow T_K$, и возрастание диффузии с понижением температуры не наблюдается. Одновременно с этим нарушаются условия, при которых выведена формула /14.2/.

Из экспериментов, не связанных с диффузией примесей, можно определить следующие из входящих в /2/ величин /приводим значения для гпу ^4He с молярным объемом $V = 21 \text{ см}^3$:/

$$\theta = 26 \text{ К}, \quad \theta_p = 10/3 \text{ К}, \quad a = 3,27 \text{ \AA}, \quad s = 320 \text{ м/с} \quad /4/$$

Величина σ_0 с учетом только отличия массы изотопа ²⁰ равна $\left(\frac{\Delta m}{m} \right)^2 = \frac{1}{9}$.

Учет роли изменения констант связи вокруг дефекта ⁸⁸ был бы связан с модельными соображениями и привел бы к поправкам, несущественным по сравнению с экспериментальной точностью.

Подставляя /4/ в /2/, получаем зависимость коэффициента диффузии от ширины зоны Δ и сечения рассеяния при заданных температуре и концентрации

$$D^{-1} = 5,6 \cdot 10^{-4} \frac{x\sigma}{\Delta} + \frac{0,1}{\Delta^2} T^9 \quad /5/$$

Характерные же температуры T^* и T_K /12.18/ равны

$$T_K = 4,2 \Delta^{1/9}, \quad T^* = T_K / \ell^{1/9} \approx T_K (x\sigma)^{1/9} \quad /6/$$

Второй член в /5/, соответствующий закону /1/, позволяет определить ширину зоны Δ только по температурной зависимости, после чего сечение рассеяния можно определить из первого слагаемого.

Запишем /2/ в виде

$$D^{-1} = B^{-1}x + G^{-1}T^g, \quad /7/$$

где

$$B = D_0 x, \quad G = 2,4 a s \Delta^2 \theta_p^7 = 4,8 \frac{a^2}{\hbar} \Delta^2 \theta_p^8. \quad /8/$$

Коэффициенты B и G являются функциями молярного объема V_m . Их значения приведены в таблице 4.

Таблица 4. Зависимость B , G и σ от молярного объема V_m и концентрации x

x %	V_m см ³	$B \cdot 10^{11}$ см ² /с	$G \cdot 10^{-8}$ см ² с ⁻¹ К ⁻⁹	σ	источник
0,05	20,23	2,8	4,8	173	79
"	20,42	2,2	7,7	162	"
"	20,62	1,1	4,5	104	"
"	20,84	0,625	10	71	"
"	20,98	0,364	10	48	"
0,01	20,95	2,32			93
0,01	21		10		79
0,02	21		10		79
0,0242	20,95	2,35			93
0,0499	20,95	1,9			93
0,05	21		24		77
0,006	20,95	1.	24		76
0,12	21		24		77
0,25	21	0,81			18
0,01	20,70	1,1			93
0,242	20,70	1,2			93
0,0499	20,70	0,9			93

Поскольку зависимость величины θ_p от V_m известна /она характеризуется постоянной Грюнайзена γ для температуры Дебая/, то /8/ дает возможность определить "постоянную Грюнайзена" γ_Δ для ширины зоны:

$$\gamma_\Delta = d \ln \Delta / d \ln V_m = 4\gamma - \frac{1}{3} + \frac{1}{2} \gamma_G. \quad \gamma_G = d \ln G / d \ln V_m. /9/$$

Подставляя значение⁷⁰ $\gamma = 2,6$ и определяя из данных таблицы 4 $\gamma_G \approx 21$, имеем

$$\gamma_\Delta \approx 21. \quad /10/$$

Это значение близко к постоянной Грюнайзена для обменного интеграла в ³He / $\gamma \approx 18$ /, однако точность эксперимента недостаточна для того, чтобы из этого факта можно было сделать определенные заключения.

Обратимся теперь к формуле /14.7/ и запишем постоянную Грюнайзена для коэффициента диффузии в виде

$$\Gamma = d \ln D / d \ln V_m = 2\gamma_\Delta - \gamma_c + \frac{2}{3} \approx 42 - \gamma_c. \quad /11/$$

Экспериментальные значения для этой величины сильно отличаются даже в публикациях одной и той же группы^{18,79,93}. В работе¹⁸ получено значение

$$\Gamma = 47 \pm 11, \quad /12/$$

а в⁷⁹

$$\Gamma = 57 \pm 12. \quad /13/$$

Исходя из сравнения /11/ и /12/, можно заключить, что взаимодействие между примесями /характеризуемое V_0 / относительно слабо зависит от объема: $\gamma_c \approx 5$. Такую зависимость можно получить, если предположить, что $V_0 \sim K_T a^3$, где K_T - изотермический модуль упругости⁹⁴. Сравнение же /11/ с /13/ приводит к очень сильной зависимости $\gamma_c \approx 16$.

Вернемся к данным таблицы 4 и укажем порядок вычисления с их помощью характеристик дефектонов. Оценки проведем для $V_m = 21$ см³. Сравнивая табличные значения G с формулой /8/, определяем ширину зоны Δ . Подставляя найденное значение в формулу для B /первое слагаемое в /5//, получаем сечение рассеяния σ . Знание σ позволяет по формуле /13.9/ определить V_0 . Длину пробега ℓ находим из /14.1/ и проверяем условие когерентности $\ell \gg 1$. Определяем температуры T_K и T^* , связанные условием /6/, и сравниваем их значения с экспериментальной зависимостью $D(T)$. В результате получаем:

$$\Delta \approx 10^{-4} \text{ К}, \quad \sigma \sim 100 a^2, \quad V_0 \sim 10^{-2} \text{ К}, \quad T_K = 1,2 \text{ К}, \quad T^* = 0,7 (10^4 x)^{1/3} /14/$$

Что касается концентрационных областей /§14/, то газовому приближению соответствуют концентрации

$$x < \sigma^{-3/2} \sim 10^{-3}, \quad /15/$$

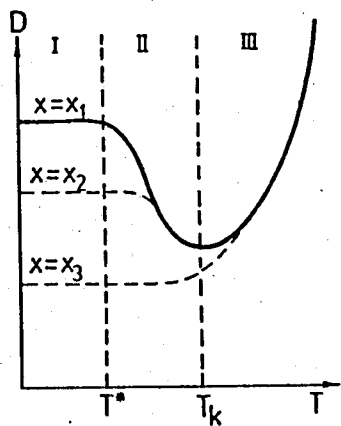


Рис. 8. Схематическое изображение температурной зависимости коэффициента диффузии.

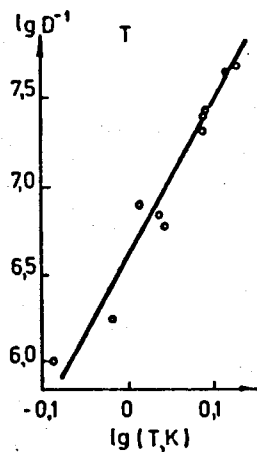


Рис. 9. Зависимость D_T от температуры по данным ⁷⁶. Прямая линия соответствует закону $\lg D_T = 9 \lg T + 6,613$.

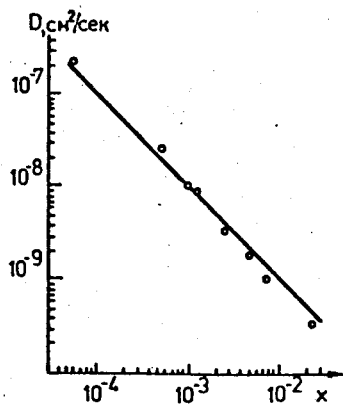


Рис. 10. Концентрационная зависимость коэффициента диффузии ³Ne в твердом ⁴Ne / $V_m = 20,95 \text{ см}^3$ в области низкотемпературного плато согласно результатам ⁷⁶.

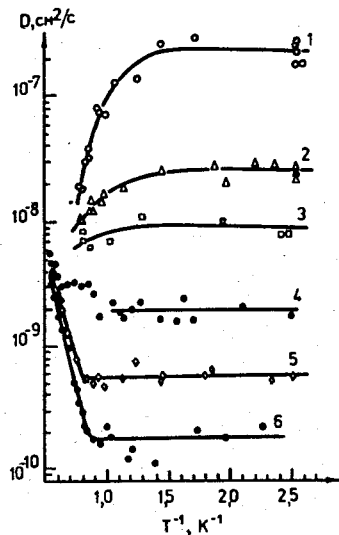


Рис. 11. Температурная зависимость коэффициента диффузии ³Ne в твердом ⁴Ne при различных концентрациях по данным ⁷⁶. 1 - $x = 6 \cdot 10^{-5}$, 2 - $x = 5 \cdot 10^{-4}$, 3 - $x = 1,2 \cdot 10^{-3}$ при $V_m = 20,95 \text{ см}^3$; 4 - $x = 2,5 \cdot 10^{-3}$, 5 - $x = 7,5 \cdot 10^{-3}$, 6 - $x = 2,17 \cdot 10^{-2}$ при $V_m = 20,70 \text{ см}^3$.

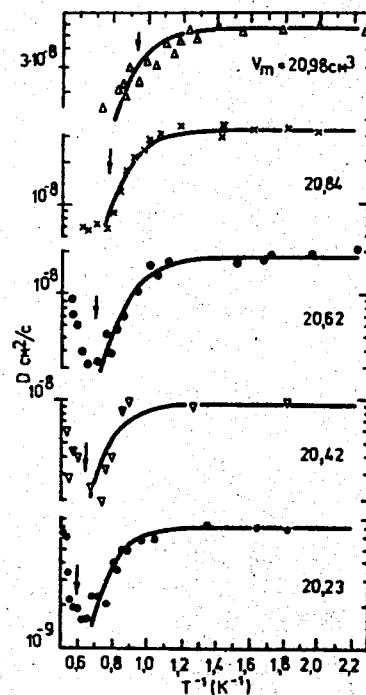


Рис. 12. Температурная зависимость коэффициента диффузии при постоянной концентрации $x = 5 \cdot 10^{-4}$ и различных молярных объемах по данным ⁷⁹.

а область взаимодействующих примесоннов ограничена неравенствами

$$10^{-3} < x < 10^{-2} \quad /16/$$

Сравнение теоретических результатов с результатами ведущих экспериментальных групп^{76,77,79} показано на рис. 9-12. Рис. 9 служит экспериментальным подтверждением девятой степени температуры в законе /1/, на рис. 10 показана концентрационная зависимость коэффициента диффузии в области низкотемпературного плато. Температурная зависимость коэффициента диффузии /2/ при различных концентрациях и молярных объемах показана на рис. 11, 12.

Таким образом, можно сказать, что теория^{13,20,72,10} описывает не только качественно, но и количественно кинетические свойства дефектонов в квантовых кристаллах гелия. Новое явление - квантовой диффузии - предсказанное в^{8,13}, нашло полное экспериментальное подтверждение.

Наконец отметим, во избежание недоразумений, что интерполяционная формула, аналогичная /2/, использовалась также в работах^{18,19} и приведена в книге⁵²:

$$D^{-1} = \frac{\hbar}{Aa^2} \left\{ x + \frac{\theta}{A} \left(\frac{T}{\theta} \right)^9 \right\} \quad /17/$$

У этой формулы два существенных отличия по сравнению с /2/. Во первых, вместо θ_p в /17/ входит температура Дебая $\theta \approx 8\theta_p$. В результате коэффициент при T^9 отличается на 6 порядков. Второе существенное отличие состоит в отсутствии сечения рассеяния σ , роль которого уже неоднократно обсуждалась нами. Такая же ошибка в коэффициенте низкотемпературной диффузии содержится в работах^{15,83} и др. Поэтому в этих работах оценка ширины примесонной зоны оказалась заниженной на 2-3 порядка.

"Ничего в этой жизни не бывает в точности таким, каким мы себе его представляем".

Луи Арагон. "Трое"

Глава IV. СТРУКТУРА КВАНТОВОГО КРИСТАЛЛА С ДЕФЕКТАМИ

В этой главе мы рассмотрим влияние дефектонов на структуру квантового кристалла, обусловленное конечной шириной дефектонной зоны. Будут рассмотрены некоторые вопросы, относящиеся к основному состоянию системы, а также эффекты при $T \neq 0$, не имеющие классических аналогов. Среди них - состояние с нулевыми дефектонами¹¹, вакансионное очищение кристалла от примесей²⁵ и вакансионное образование зародышей новой фазы²⁵.

§ 16. Основное состояние

Делокализация дефекта приводит к уменьшению энергии кристалла с локализованным дефектом ϵ_0 на величину, равную полуширине зоны $\Delta/2$. Если $\epsilon_0 > \Delta/2$, то термодинамически равновесное число дефектонов $\sim \exp(-\varphi/T)$, где $\varphi = \epsilon_0 - \Delta/2$ - энергия дна дефектонной зоны.

Таким образом, при $T=0$ равновесная плотность дефектонов равна нулю. При увеличении вероятности туннельного перехода ширина зоны уширяется, и, в принципе, величина φ может стать отрицательной. Это означает, что должна произойти перестройка основного состояния кристалла¹¹. Новое состояние будет содержать равновесные /нулевые/ дефектоны. Если дефектами являются вакансии, то в состоянии с нулевыми вакансиями число атомов будет меньше числа узлов решетки. Таким образом, появление вакансии в идеальном кристалле понижает его энергию. Естественно, энергия будет уменьшаться с ростом числа вакансионных до тех пор, пока не станет существенным взаимодействие между ними. Если выигрыш в энергии φ мал, то это произойдет при малой концентрации вакансионных, которому можно определить из соотношения

$$\frac{N}{V} = -\frac{\varphi}{U_0}, \quad \varphi < 0, \quad /1/$$

где N - число дефектонов, V - объем, а U_0 - характерная энергия взаимодействия вакансионных. Если квазичастицы подчиняются статистике Бозе-Эйнштейна, они будут конденсироваться на дне зоны, и соотношение /1/ является точным, в чем можно убедиться, минимизируя энергию разреженного бозе-газа

$$E = N\varphi + \frac{1}{2} \frac{N^2}{V} U_0, \quad U_0 = \int U(\vec{r}) d^3r. \quad /2/$$

Второе слагаемое описывает парное взаимодействие квазичастиц, и величину U_0 можно записать через их эффективную массу m^* и амплитуду рассеяния a_0 : $U_0 = 4\pi\hbar^2 a_0 / m^*$. Величину же φ вблизи фазового перехода в новое основное состояние, происходящего при объеме V_0 , можно разложить по степеням $V_0 - V$:

$$\varphi = \lambda \frac{V_0 - V}{V_0}. \quad /3/$$

Подставляя /1/ и /3/ в /2/, получаем

$$E = -\frac{V}{2} \frac{\varphi^2}{U_0} = -V \frac{\lambda^2 m^*}{8\pi a_0 \hbar^2} \left(\frac{V - V_0}{V_0} \right)^2,$$

откуда видно, что происходит фазовый переход второго рода. Можно показать, что при любой конечной температуре этот переход становится переходом первого рода¹¹.

В случае, когда дефектоны подчиняются статистике Ферми, при $T = 0$ заполнены только состояния с $k < k_0$, где $k_0 = \{2m^* \lambda (V - V_0) / V_0\}^{1/2}$. Тогда вклад в энергию равен

$$E = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_0^{k_0} 4\pi k^2 dk \left\{ -\varphi + \frac{k^2}{2m^*} \right\} = -V \frac{(2m^*)^{3/2}}{15\pi^2} \left(\lambda \frac{V - V_0}{V_0} \right)^{5/2}, \quad /4/$$

и в точке $V = V_0$ происходит фазовый переход "2¹/₂" рода⁹⁵.

Рассмотрим теперь основное состояние квантового кристалла, составленного из атомов двух сортов /А и В/ с концентрациями x_A и x_B . Обозначим через τ_A , τ_B , τ_{AB} времена обмена атомов АА, ВВ и АВ, а через τ_{VA} и τ_{VB} - характерные времена обмена атомов с вакансией. Вообще говоря, эти времена зависят от окружения атомов, но для простоты мы пренебрежем этой зависимостью и предположим также, что

$$\tau_A = \tau_B = \tau_{AB} = \tau, \quad \tau_{VA} = \tau_{VB} = \tau_v.$$

Этим временам соответствуют энергии $\varepsilon = \hbar/\tau$ и $\varepsilon_v = \hbar/\tau_v$. Если нет вакансий, то интерес представляют два предельных случая в зависимости от соотношения между ε и энергией упорядочения решетки W .

Если $\varepsilon \ll W$, то при подходящем стехиометрическом соотношении $x_A \sim x_B$ кристалл будет хорошо упорядочен. Если же $x_A \ll x_B$, возможно возникновение сверхрешетки из атомов А в матрице из атомов В. При этом энергия упорядочения сверхрешетки $W' \ll W$. Сверхрешетка устойчива, если $\varepsilon \ll W'$. В случае $\varepsilon \gg W'$ возникает неупорядоченная структура за счет квантового туннелирования атомов А и В.

Поведение вакансии в такой структуре зависит от ширины ее зоны. Если $\varepsilon_v \gg W$, она превращается в хороший вакансион с большой длиной

пробега и малым затуханием, обусловленным "неровностями" потенциала.

Если же вакансия появляется в устойчивой сверхрешетке $\varepsilon < W < \varepsilon_v$, то благодаря ей атомы А совершают колебания с большой по сравнению с постоянной решетки амплитудой. В таком кристалле это самая мягкая ветвь колебаний. Вакансион движется, в основном, по узлам типа В, и учет атомов А можно провести в терминах теории рассеяния.

Если $\varepsilon_v < W$ и отношение концентраций близко к стехиометрическому, вакансионный спектр имеет столько ветвей, сколько атомов содержится в элементарной ячейке. Пусть упорядоченное состояние имеет структуру, показанную на рис. 13. Тогда у вакансионов будут две ветви /А-вакан-

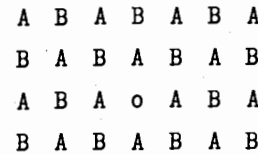


Рис. 13. Кристалл с А-вакансионом /о - обозначение вакансии/. Порядок атомов не нарушается, если вакансия движется по диагоналям. Движение по вертикалям и горизонталям оставляет "след".

сионны и В-вакансионны/, распространяющиеся только по узлам А или В.

Если же $\varepsilon_v > W$, то между вакансиями появляется взаимодействие, которое связано с появлением новых возбуждений. Так, переход атома В в вакантный узел означает уничтожение одного А-вакансиона и появление не только В-вакансиона, но и В-примесона, распространяющегося по А-диагоналям. Дальнейший переход В-вакансиона на следующую А-диагональ связано с уничтожением В-вакансиона и с рождением А-вакансиона и А-примесона и т.д. При этом вакансион оставляет за собой "след" из неправильно расположенных атомов. "Траектория" следа размывается движением примесонов по диагоналям, однако "память" о его длине /т.е. о числе переставленных атомов/ остается, так как в данной модели движение, например, атомов В по узлам А, не связано с изменением энергии. Поэтому удаление примесона от родившего его вакансиона не меняет энергию, пока не произойдет новое примесон-вакансионное столкновение.

Поскольку полуширина примесонной зоны обычно меньше энергии локализованного дефекта, рождение новых примесонов невыгодно. На каждый новый примесон вакансион тратит энергию порядка энергии упорядочения. Следовательно, когда число дефектонов станет порядка $N = \Delta/W$, вакансион будет захвачен в созданной им же яме размера $R \sim (\Delta/W)^{1/3}$.

Такая оценка, однако, справедлива далеко не всегда. Дело в том, что создание вокруг вакансии решетки из одинаковых атомов может привести к резкому уширению вакансионной зоны за счет большей вероятности туннельного перехода в ближайший узел по сравнению с переходом по диагонали. Если уширение зоны обозначить через $\delta = \Delta_2 - \Delta_1$, то энергия

системы будет

$$E = \frac{\pi^2 A}{R^2} + \frac{4}{3} \pi R^3 W - \frac{1}{2} S, \quad /5/$$

где первый член описывает кинетическую энергию вакансиона в области радиуса R . Размер области локализации можно определить из условия минимума энергии /5/. Это дает

$$R = \left(\frac{\pi A}{2W}\right)^{1/5}, \quad N = \frac{4\pi}{3} \left(\frac{\pi A}{2W}\right)^{3/5}. \quad /6/$$

Наличие минимума энергии /1/ означает, что в такой модели квантовые эффекты приводят к эффективному притяжению между вакансиями и примесями.

§ 17. Вытеснение примесей вакансиями

Если матрица кристалла состоит из одинаковых атомов, то между вакансиями и примесями при $T \neq 0$ появляется эффективное отталкивание²⁵. Оно связано с понижением энергии кристалла при делокализации вакансии. Для превращения вакансии в квазичастицу, однако, требуется хорошая периодичность решетки. Поэтому вакансион "устраивает" такую периодичность, вытесняя примеси. Найдем число узлов, "очищенных" от примесей одним вакансионом.

Поскольку ширина вакансионной зоны много больше ширины примесонной зоны, то время, за которое вакансион подстраивается к конфигурации примесей, много меньше времени изменения этой конфигурации. Энергию вакансиона, захваченного в области "радиуса" R , можно оценить из соотношения неопределенности:

$$E = \varepsilon_0 - \frac{A}{2} + \frac{\pi^2 A}{R^2}, \quad /1/$$

где ε_0 - энергия локализации вакансии. Тогда свободная энергия

$$F = \varepsilon_0 - \frac{A}{2} + \pi^2 \frac{A}{R^2} + TS \frac{4}{3} \pi R^3, \quad /2/$$

где S - энтропия примесонного газа на одну ячейку. Если концентрация примесей достаточно мала, то для S можно использовать выражение

$$S = -x \ln \frac{x}{e}.$$

Размер очищенной области получается из условия минимума свободной энергии /2/. Таким образом находим

$$R = \left(\frac{\pi A}{2TS}\right)^{1/5}, \quad F_{min} = \varepsilon_0 - \frac{A}{2} + \frac{10\pi}{3} \left(\frac{\pi A}{2}\right)^{3/5} T^{2/5} S^{2/5}. \quad /3/$$

Значение F_{min} должно быть меньше ε_0 , откуда находим ограничение по температуре

$$TS < \left(\frac{3A}{20\pi}\right)^{5/2} \left(\frac{2}{\pi A}\right)^{3/2}. \quad /4/$$

С другой стороны, условием применимости /2/ является $R \gg a$, что приводит к неравенству $TS < \frac{\pi}{2} A$. Это условие всегда выполняется, если выполнено требование $T < \Delta$, использованное при написании /1/. Если воспользоваться соотношением $\Delta = zA$, то оба неравенства практически совпадают, так как /4/ принимает вид

$$TS < \left(\frac{3z}{10\pi}\right)^{5/2} \frac{\pi A}{2}.$$

Если в системе не одна вакансия и число примесей задано, то их концентрация в неочищенной области равна

$$x' = \frac{x}{1 - x_v V_0}, \quad /5/$$

где x_v - концентрация вакансий, а $V_0 = \frac{4}{3} \pi R^3$;

Минимальная работа, необходимая для повышения концентрации раствора от x до x' путем удаления $N(1 - \frac{x}{x'}) = x_v V_0$ частиц "растворителя", находится из общих принципов статистической физики⁹⁶. Термодинамический потенциал до вытеснения примесей

$$\Phi_1 = N\mu_0 + Nx T \ln \frac{x}{e} + Nx \Psi. \quad /6/$$

Термодинамический потенциал раствора с концентрацией примесей x' , распределенных по $N - x_v V_0$ узлам, получается заменой в /6/

$N \rightarrow Nx/x'$ и $x \rightarrow x'$. К нему нужно добавить термодинамический потенциал "чистого растворителя" $(1 - \frac{x}{x'}) N\mu_0$. Окончательно, для термодинамического потенциала после вытеснения получаем

$$\Phi_2 = N\mu_0 + Nx T \ln \frac{x'}{e} + Nx \Psi$$

и, следовательно, минимальная работа

$$\Delta \Phi = Nx T \ln \frac{x'}{x}. \quad /7/$$

Изменение же энтропии равно

$$\Delta S = Nx \ln \frac{x'}{x}. \quad /8/$$

Наличие Nx_v вакансионных меняет энергию кристалла на величину

$$Nx_v \left(-\frac{z}{2} A + \frac{\pi^2 A}{R^2}\right). \quad /9/$$

Таким образом, свободная энергия на узел решетки равна

$$F = (\epsilon_0 - \frac{\pi}{2}A) x_v + \pi^2 \frac{A}{R^2} x_v - xT \ln(1 - x_v \frac{4}{3} \pi R^3). \quad /10/$$

Из условия минимума свободной энергии /10/ получаем размер области, очищенной одним вакансионном:

$$R_{min} = \left(\frac{\pi A}{2Tx} \right)^{1/5}. \quad /11/$$

Если полное число очищенных узлов много меньше числа узлов в решетке, т.е. $x_v V_0 \ll 1$, то $F = x_v f$, где свободная энергия на одну вакансию дается выражением

$$f = \epsilon_0 - \frac{\pi}{2}A + \frac{\pi^2}{R^2}A + TxV_0, \quad /12/$$

а ее минимальное значение равно

$$f_{min} = \epsilon_0 - \frac{A}{2} + \frac{10\pi}{3} \left(\frac{\pi A}{2} \right)^{3/5} (Tx)^{2/5}. \quad /13/$$

В случае примесей ${}^3\text{He}$ с концентрацией $x \sim 10^{-4}$ в твердом ${}^4\text{He}$ /где $A \sim 1 \text{ К}$ / при температуре $T \approx 0,4 \text{ К}$, область, очищенная одной вакансией, охватывает около 10^3 узлов.

Таким образом, видно, что наличие вакансионнов стимулирует фазовое расслоение твердых растворов ${}^3\text{He} - {}^4\text{He}$.

С другой стороны, наличие примесей влияет на равновесную концентрацию вакансионнов. Она описывается выражением

$$x_v = e^{-F/T} = \exp \left\{ -\frac{\epsilon_0 - \frac{A}{2}}{T} - \frac{10\pi}{3} \left(\frac{\pi A}{2T} \right)^{3/5} x^{2/5} \right\}. \quad /14/$$

Обратим внимание, что второй член в экспоненте пропорционален числу вытесненных примесей:

$$\frac{10\pi}{3} \left(\frac{\pi A}{2T} \right)^{3/5} x^{2/5} = \frac{5}{2} V_0 x. \quad /15/$$

§ 18. Вакансионные зародыши новой фазы

Этот эффект связан с разной шириной вакансионной зоны в двух фазах одного и того же вещества /напр. в гпу и оцк фазах гелия/. Как было показано в § 4, ширина вакансионной зоны экспоненциально зависит от числа ближайших соседей, и, следовательно, должна резко возрасти при переходе гпу - оцк. При этом может оказаться, что дно зоны в оцк-решетке расположено ниже, чем в гпу-фазе, независимо от того, в которой

из фаз энергия образования вакансии больше /рис. 14/. Поэтому может оказаться выгодным образование новой фазы вокруг вакансии. Если новая фаза имеет "радиус" R , то изменение свободной энергии равно

$$\Delta F = \Delta \epsilon_0 + \frac{\pi^2}{R^2} A + T \Delta S \frac{4}{3} \pi R^3, \quad /1/$$

где $\Delta \epsilon_0$ - смещение дна вакансионной зоны, а ΔS - разность энтропий двух фаз. Минимизируя F и учитывая, что $T \Delta S$ есть теплота перехода q , получаем размер области

$$R = \left(\frac{\pi A}{2q} \right)^{1/5}. \quad /2/$$

Теплоту перехода можно определить с помощью уравнения Клаузиуса-Клапейрона по экспериментальным данным. Она оказывается $\sim 10^{-2} \text{ К}$. Следовательно, зародыш новой фазы содержит $\sim 10^2$ атомов. Отметим, что вакансионны с такой структурой имеют другую подвижность, зависящую также от кинетики фазового перехода.

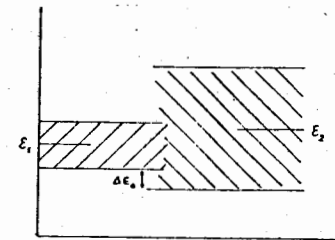


Рис.14. Состояние с локализованной вакансией имеет меньшую энергию в первой фазе, в то время как состояние с делокализованной вакансией энергетически более выгодно во второй фазе. $\Delta \epsilon_0$ - понижение энергии за счет разницы в ширине вакансионных зон.

Глава V. ДИНАМИКА ДЕФОРМИРУЕМОГО КРИСТАЛЛА С КВАЗИЧАСТИЧНЫМИ ВОЗБУЖДЕНИЯМИ

Эта глава посвящена влиянию квазичастиц на динамику деформируемого твердого тела. Мы будем проводить рассмотрение в общем виде для произвольных квазичастиц, не ограничиваясь дефектонами в квантовых кристаллах. Поэтому излагаемая теория применима и к таким традиционным объектам, как электроны в металлах и полупроводниках. Основная характеристика квазичастицы при этом - ее закон дисперсии. Он вычисляться не будет, а будет предполагаться заданным. Основные же задачи теории - построение механики квазичастиц с произвольным законом дисперсии в предположении о квазиклассичности их движения, вывод кинетического уравнения для функции распределения квазичастиц и вывод динамического уравнения теории упругости при наличии квазичастиц. Конечная цель при этом - создание самосогласованной теории на основе полной нелинейной системы из связанных между собой уравнений теории упругости, уравнения Больцмана и уравнений Максвелла.

§ 19. Нелинейная теория упругости

Построение теории динамики твердого тела включает как составную часть формулировку нелинейной теории упругости идеального кристалла. Это удобно сделать, вводя локальную систему отсчета с базисными векторами \vec{a}_α / $\alpha = 1, 2, 3$ /, совпадающими с элементарными трансляциями кристалла. При таком описании каждый узел решетки определяется тремя числами N^α , равными числам "шагов" по решетке с начала координат до данного узла. Тогда вектор $d\vec{z}$, связывающий в данный момент времени два узла решетки, находящихся на расстоянии, большом по сравнению с межатомным, но малым по сравнению с характерными размерами деформации, можно записать в виде

$$d\vec{z} = \vec{a}_\alpha dN^\alpha \quad /1/$$

Уравнение, описывающее изменение базисных векторов во времени, можно получить из чисто геометрических соображений. Оно имеет вид

$$\dot{\vec{a}}_\alpha + (\vec{u} \nabla) \vec{a}_\alpha - (\vec{a}_\alpha \nabla) \vec{u} = 0, \quad /2/$$

где $\vec{u}(\vec{z}, t)$ - вектор деформации. При этом автоматически выполняется необходимое и достаточное условие сохранения векторных линий вектора \vec{a}_α :

$$[\dot{\vec{a}}_\alpha + (\vec{u} \nabla) \vec{a}_\alpha - (\vec{a}_\alpha \nabla) \vec{u}] \times \vec{a}_\alpha = 0$$

/суммирования по α нет, знак \times означает векторное произведение/. Следовательно, уравнение /2/ описывает деформации, которые не приводят к разрывам или пересечениям кристаллографических линий с одинаковыми α . Таким образом, если в решетке нет дислокаций, то функции $N^\alpha(\vec{z}, t)$ однозначны, и вместе с уравнением /2/ полностью описывают расположение узлов решетки. Отметим, что наличие дефектонов не меняет способа описания, так как узлы решетки остаются хорошо определенными.

Введем в рассмотрение также векторы обратной решетки \vec{a}^α . Они удовлетворяют соотношениям

$$\vec{a}^\alpha \vec{a}_\beta = \delta_{\alpha\beta}, \quad a_i^\alpha a_{\alpha k} = \delta_{ik}. \quad /3/$$

Тогда из /1/ и /3/ следует, что $\vec{a}^\alpha d\vec{z} = dN^\alpha$, откуда получаем

$$\vec{a}^\alpha = \nabla N^\alpha \quad /4/$$

Умножая /2/ на \vec{a}^α и используя /3/ и /4/, получаем эволюционное уравнение для векторов обратной решетки

$$\dot{\vec{a}}^\alpha + \nabla(\vec{a}^\alpha \vec{u}) = 0, \quad /5/$$

а также выражение для скорости деформации через производные от N^α :

$$\vec{u} = -\vec{a}_\alpha \dot{N}^\alpha \quad /6/$$

Для дальнейшего удобно ввести метрический тензор $g_{\alpha\beta} = \vec{a}_\alpha \vec{a}_\beta$ и обратный ему тензор $g^{\alpha\beta} = \vec{a}^\alpha \vec{a}^\beta$. Тогда объем элементарной ячейки равен \sqrt{g} , где $g = \det g_{\alpha\beta}$. В этих обозначениях плотность идеального кристалла записывается в виде $\rho_0 = M/\sqrt{g}$, где M - суммарная масса атомов в ячейке. Уравнение непрерывности теперь можно получить, дифференцируя ρ_0 по времени с учетом тождества

$$dg = -g g_{\alpha\beta} dg^{\alpha\beta} \quad /7/$$

и уравнений /2/-/5/. Таким образом получаем

$$\dot{\rho}_0 + \text{div} \vec{j} = 0, \quad /8/$$

где поток массы /импульс единицы объема/ $\vec{j} = \rho_0 \vec{u}$.

Для нахождения потока энергии \vec{Q} и тензора потока импульса Π_{ik} поступаем стандартным образом, требуя, чтобы из закона сохранения массы /8/ и закона сохранения импульса

$$\frac{\partial j_i}{\partial t} + \frac{\partial \Pi_{ik}}{\partial x_k} = 0 \quad /9/$$

с учетом закона возрастания энтропии

$$\dot{S} + \text{div}(S\vec{u} + \frac{\vec{q}}{T}) = \frac{R}{T} \quad /10/$$

/где R - диссипативная функция, а \vec{q} подлежит определению/, следовал закон сохранения энергии

$$\dot{E} + \text{div}\vec{Q} = 0. \quad /11/$$

Энергия E в лабораторной системе отсчета /Л-системе/ равна сумме кинетической и внутренней /E₀/ энергии. Последняя совпадает с энергией в сопутствующей системе /С-системе/, движущейся вместе с решеткой, и является функцией метрического тензора и энтропии. Следовательно,

$$\dot{E} = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial t} (\rho_0 \dot{u}^2) + T\dot{S} - \frac{1}{2} \sigma_{\alpha\beta} \dot{g}^{\alpha\beta}, \quad \sigma_{\alpha\beta} = -2 \left(\frac{\partial E_0}{\partial g^{\alpha\beta}} \right) S. \quad /12/$$

Производные по времени в /12/ можно выразить через пространственные производные с помощью /8/ и /10/. Последний член преобразуем, используя /5/:

$$-\frac{1}{2} \sigma_{\alpha\beta} \dot{g}^{\alpha\beta} = \sigma_{\alpha\beta} a_i^\beta \left(v_k \frac{\partial a_i^\alpha}{\partial x_k} + a_k^\alpha \frac{\partial \dot{u}_k}{\partial x_i} \right). \quad /13/$$

С другой стороны,

$$\nabla_k E_0 = -\sigma_{\alpha\beta} \vec{a}^\beta \nabla_k \vec{a}^\alpha + T \nabla_k S. \quad /14/$$

С помощью /13/ и /14/ выражение /12/ принимает вид

$$\dot{E}_0 = T(\dot{S} + \text{div}(S\vec{u})) - \text{div}(E_0\vec{u}) + (\sigma_{\alpha\beta} + Fg_{\alpha\beta}) a_i^\alpha a_k^\beta \frac{\partial \dot{u}_i}{\partial x_k}, \quad /15/$$

где $F = E_0 - TS$ - свободная энергия единицы объема, совпадающая с точностью до знака с давлением / $P = -F$ /. Окончательно, закон сохранения энергии записывается в виде:

$$\begin{aligned} \dot{E} + \nabla_k \left\{ \frac{1}{2} \rho_0 \dot{u}^2 u_k + \dot{u}_i (\Pi_{ik} - \rho_0 \dot{u}_i \dot{u}_k + E_0 \delta_{ik}) + q_k \right\} = \\ = R + \frac{\vec{q} \nabla T}{T} + \left\{ \Pi_{ik} - \rho_0 \dot{u}_i \dot{u}_k + F \delta_{ik} + \sigma_{\alpha\beta} a_i^\alpha a_k^\beta \right\} \frac{\partial \dot{u}_i}{\partial x_k}. \end{aligned} \quad /16/$$

Отсюда однозначно следует вид тензора потока импульса

$$\Pi_{ik} = (\sigma_{\alpha\beta} + Fg_{\alpha\beta}) a_i^\alpha a_k^\beta + \rho_0 \dot{u}_i \dot{u}_k + \pi_{ik} \quad /17/$$

и потока энергии

$$\vec{Q} = \frac{1}{2} \rho_0 \dot{u}^2 \vec{u} + \vec{a}^\alpha (\vec{a}^\beta \dot{u}) \sigma_{\alpha\beta} + TS\vec{u} + \vec{q}, \quad /18/$$

а также вид диссипативной функции

$$R = -\vec{q} \frac{\nabla T}{T} - \pi_{ik} \frac{\partial \dot{u}_i}{\partial x_k}.$$

Из симметричности Π_{ik} следует симметричность π_{ik} . Следовательно, R зависит только от симметричной части тензора скоростей деформации

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

который, однако, не предполагается малым.

С учетом принципа Онсагера и положительности диссипативной функции имеем

$$R = \kappa_{ik} \frac{\partial T}{\partial x_i} \frac{\partial T}{\partial x_k} + \eta_{iklm} \dot{u}_{ik} \dot{u}_{lm}, \quad /19/$$

где κ_{ik} и η_{iklm} - положительно определенные матрицы, имеющие смысл коэффициентов теплопроводности и вязкости.

Переход к описанию с помощью тензора деформации осуществляется путем разложения по степеням малых деформаций. Для этого следует положить

$$N^\alpha = N_0^\alpha - w^\alpha, \quad /20/$$

где $N_0^\alpha = \vec{a}_0^\alpha \vec{v}$, \vec{a}_0^α - векторы обратной решетки недеформированного кристалла. Тогда вектором смещения обычной теории упругости является величина

$$\vec{w} = \vec{a}_{0\alpha} w^\alpha. \quad /21/$$

Дифференцируя N^α по координатам и времени, находим линейные по \vec{w} отклонения всех величин от их значений в недеформированном кристалле:

$$\delta \vec{a}^\alpha = -\delta \vec{a}_\alpha = -a_{\alpha k}^\alpha \nabla w_k, \quad \vec{u} = \vec{w},$$

$$\delta g_{\alpha\beta} = -\delta g^{\alpha\beta} = 2 w_{ik} a_{\alpha i}^\alpha a_{\beta k}^\beta, \quad /22/$$

где w_{ik} - тензор деформации. При этом введенный нами тензор $\sigma_{\alpha\beta}$ /12/ связан с тензором напряжений σ_{ik} соотношением

$$\sigma_{ik} = \sigma_{\alpha\beta} a_{\alpha i}^\alpha a_{\beta k}^\beta - P \delta_{ik}, \quad /23/$$

где P - давление.

§ 20. Уравнения механики. Энергия и функция Гамильтона квазичастицы

Как уже отмечалось во Введении, основная трудность при создании теории деформируемых тел при наличии квазичастиц связана с описанием динамики квазичастиц. Дело в том, что квазиимпульс и закон дисперсии возбуждения хорошо определены только в идеальной периодической решетке, имеющей "статус" привилегированной системы отсчета, и в общем случае нет преобразований /аналогичных преобразованиям Галилея/ для перехода в лабораторную систему, в которой формулируются основные уравнения и законы сохранения и в которой проводятся измерения.

Существенно, однако, что вид закона дисперсии устанавливается практически на расстояниях порядка нескольких постоянных решетки, в то время как характерные размеры деформации и изменений внешних полей, как правило, много больше их. В таких случаях оказывается возможным ввести локальный закон дисперсии $\mathcal{E}(\vec{k}, \vec{v})$, а квазиимпульс определяется локальным периодом решетки в "точке" \vec{v} . В С-системе закон дисперсии $\mathcal{E}(\vec{k}, \vec{v})$ играет роль функции Гамильтона. Соответственно уравнения движения имеют вид

$$\dot{\vec{v}} = \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \vec{k}}, \quad \dot{\vec{k}} = - \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \vec{v}} \quad /1/$$

/ \vec{v} - координата в С-системе/.

Нас интересуют, однако, уравнения движения в Л-системе:

$$\dot{\vec{v}} = \frac{\partial H}{\partial \vec{p}}, \quad \dot{\vec{p}} = - \frac{\partial H}{\partial \vec{v}}, \quad /2/$$

в которой неизвестна как функция Гамильтона $H(\vec{p}, \vec{v}, t)$, так и связь величины \vec{p} с квазиимпульсом \vec{k} . При этом следует иметь в виду, что функция Гамильтона, вообще говоря, неоднозначна, и смысл величины в большой степени зависит от ее выбора. Отметим также, что ввиду нестационарности деформаций преобразование переменных содержит время, и, следовательно, H уже не совпадает с энергией. Поэтому H не должна быть периодической функцией квазиимпульса. Энергия же, так же как и импульс /поток массы/ и все остальные физические величины, должна быть периодической в любой системе координат. Обратим внимание еще на одно обстоятельство. Величина \vec{k} в уравнениях /1/ является канонически сопряженной непрерывной координате \vec{v} и в этом смысле дублирует импульс. Настоящий же квазиимпульс должен быть сопряженным некой дискретной координате /типа N^α /, учитывающей дискретность решетки.

Прежде чем перейти к нахождению функции Гамильтона и энергии \mathcal{E} в Л-системе, заметим следующее. В развиваемой теории предполагается медленность изменения величин \vec{a}_α и \vec{v} /обозначение $\vec{v} = \dot{\vec{u}}$ введено для удобства/ в пространстве и во времени, и производится разложение

по их производным. При этом в выражениях для H и \mathcal{E} достаточно удерживать лишь члены нулевого порядка. В этом приближении величины H и \mathcal{E} совпадают с их значениями в решетке с произвольными, но постоянными значениями \vec{v} и \vec{a}_α , т.е. в однородно деформированном и равномерно движущемся кристалле /ситуация аналогична переходу в моментно-инерциальную систему в гидродинамике и теории относительности/.

Пусть сначала $\vec{v} = 0$. Волновая функция квазичастицы, принадлежащей определенной энергетической зоне и совершающей квазиклассическое движение, рассматриваемая как функция дискретных координат N^α , имеет вид

$$\Psi(N^\alpha, t) \sim e^{\frac{i}{\hbar} S_0(N^\alpha, t)}, \quad /3/$$

где S_0 - классическое действие. В периодической неподвижной решетке, о которой сейчас идет речь, функция Гамильтона совпадает с энергией $\mathcal{E}(k_\alpha, g^{\alpha\beta})$, являющейся функцией инвариантного квазиимпульса k_α с периодом $2\pi\hbar$ и зависящей от инвариантных характеристик элементарной ячейки, определяемых величинами $g^{\alpha\beta}$. Производные действия, при этом, по определению, дают

$$\left(\frac{\partial S_0}{\partial t}\right)_{N^\alpha} = -\mathcal{E}(k_\alpha, g^{\alpha\beta}), \quad \left(\frac{\partial S_0}{\partial N^\alpha}\right)_t = k_\alpha. \quad /4/$$

При $v \neq 0$ действие S можно найти с помощью известного закона преобразования одночастичных волновых функций⁹⁹ при преобразованиях Галилея. Таким образом,

$$S = S_0 + m\vec{v}\vec{v} - \frac{1}{2}m v^2 t, \quad /5/$$

где m - масса частицы.

Новую каноническую переменную \vec{p} , сопряженную координате \vec{v} , находим путем дифференцирования действия /5/:

$$\vec{p} = \left(\frac{\partial S}{\partial \vec{v}}\right)_t = k_\alpha \nabla N^\alpha + m\vec{v} = \vec{a}^\alpha k_\alpha + m\vec{v}, \quad /6/$$

откуда

$$k_\alpha = \vec{a}_\alpha (\vec{p} - m\vec{v}). \quad /7/$$

Аналогичным образом находим функцию Гамильтона

$$H(\vec{p}, \vec{v}, t) = -\left(\frac{\partial S}{\partial t}\right)_{\vec{v}} = -k_\alpha N^\alpha + \mathcal{E} + \frac{1}{2}m v^2 = \mathcal{E} + \vec{p}\vec{v} - \frac{1}{2}m v^2, \quad /8/$$

где $\mathcal{E} = \mathcal{E}(\vec{a}_\alpha (\vec{p} - m\vec{v}), g^{\alpha\beta})$ - периодическая функция \vec{p} с периодами $2\pi\hbar \vec{a}^\alpha$, определяемыми локальными значениями векторов обратной решетки. Именно указанная периодичность дает основание назвать величину \vec{p} квазиимпульсом в Л-системе.

Энергия квазичастицы определяется формулой преобразования Галилея

$$\mathcal{E} = \frac{1}{2} m v^2 + \vec{p}_0 \vec{v} + \varepsilon, \quad \vec{p}_0 = m \frac{\partial \varepsilon}{\partial \vec{p}}, \quad /9/$$

где \vec{p}_0 - среднее значение импульса квазичастицы в системе с $v = 0$. Оно равно произведению массы частицы на ее скорость. Сравнивая /8/ и /9/, получаем связь между энергией и функцией Гамильтона в Л-системе:

$$H(\vec{p}, \vec{z}, t) = \mathcal{E}(\vec{p}, \vec{z}, t) + (\vec{p} - m \frac{\partial \varepsilon}{\partial \vec{p}}) \vec{v} - m v^2. \quad /10/$$

Полученному с помощью действия S преобразованию соответствует производящая функция⁴⁵

$$\phi = (\vec{p} - m \vec{v}) \vec{z}' + (\vec{p} - \frac{1}{2} m \vec{v}) \vec{v} t, \quad /11/$$

приводящая к "галилеевским" преобразованиям

$$\vec{z} = \vec{z}' + \vec{v} t, \quad \vec{k} = \vec{p} - m \vec{v}, \quad /12/$$

$$H = \varepsilon(\vec{p} - m \vec{v}, g^{\alpha\beta}) + \vec{p} \vec{v} - \frac{1}{2} m v^2. \quad /13/$$

Для сравнения укажем, что в работах⁴³⁻⁴⁴ была использована другая производящая функция

$$\tilde{\phi} = (\vec{z}' + \vec{u}(\vec{z}', t)) \vec{p}, \quad /14/$$

приводящая к другим соотношениям:

$$\vec{k} = \vec{p} + \frac{\partial}{\partial \vec{z}'} (\vec{u} \vec{p}), \quad \tilde{\mathcal{E}}(\vec{k}, \vec{z}', t) = \tilde{H}(\vec{p}, \vec{z}, t) - \vec{u} \vec{p}, \quad /15/$$

где $\vec{u}(\vec{z}', t)$ - вектор деформации. Функция Гамильтона /15/ оказалась несовместимой с кинетическим уравнением Больцмана, а также не описывала эффект Стюарта-Голмена в металлах, что привело к необходимости искусственно ввести поправки на неинерциальность С-системы, нарушив, таким образом, преобразование Галилея для средней энергии /см.⁴² формулы /2.3/ и следующие за ними/.

Если линеаризовать /8/ с помощью /19.22/, то функция Гамильтона

$$H_{лин} = \varepsilon_0(\vec{p}) + (\lambda_{i,k}(\vec{p}) + p_i \frac{\partial \varepsilon}{\partial p_k}) \frac{\partial u_k}{\partial x_i} + \vec{u} (\vec{p} - m \frac{\partial \varepsilon_0}{\partial \vec{p}}), \quad /16/$$

где $\varepsilon_0(\vec{p})$ и $\lambda_{i,k}(\vec{p})$ есть соответственно значения функции $\varepsilon(\vec{a}_\alpha \vec{p}, g^{\alpha\beta})$ и ее производных по $u_{i,k}$ при $u_{i,k} = 0$. Формула /16/ была получена впервые Ландау /см. сноску в⁴³/ и использовалась Конторовичем^{42, 43}. Отметим, однако, что совпадение /16/ с формулами в указанных работах имеет место только по форме; трансформационные же законы для квазиимпульса различны.

§ 21. Кинетическое уравнение

Кинетическое уравнение для функции распределения квазичастиц $f(\vec{p}, \vec{z}, t)$ в Л-системе можно записать в виде

$$\frac{\partial f}{\partial t} - \frac{\partial f}{\partial \vec{z}} \frac{\partial H}{\partial \vec{p}} - \frac{\partial f}{\partial \vec{p}} \left(\frac{\partial H}{\partial \vec{z}} - \vec{F} \right) = \hat{I} f, \quad /1/$$

где \hat{I} - оператор столкновений, а функция Гамильтона дается выражением /20.8/. Таким образом, кинетическое уравнение полностью определено, если известен закон дисперсии квазичастицы в С-системе. Необходимо еще показать, что оно совместимо с условием периодичности функции распределения в р-пространстве:

$$f(\vec{p} + 2\pi\hbar \vec{\alpha}^\alpha, \vec{z}, t) = f(\vec{p}, \vec{z}, t). \quad /2/$$

Такая необходимость возникает потому, что уравнение /1/ содержит непериодические члены $(\frac{\partial f}{\partial \vec{p}} \frac{\partial H}{\partial \vec{z}})$, связанные с непериодичностью самой функции Гамильтона /20.8/. В том, что непериодическая функция Гамильтона совместима с условием периодичности /2/ и с условием инвариантности кинетического уравнения /1/, можно убедиться прямой подстановкой /20.8/ в /1/. При этом все дополнительно возникающие члены уничтожат друг друга в силу эволюционного уравнения /19.5/, и функция

$f(\vec{p} + 2\pi\hbar \vec{\alpha}^\alpha, \vec{z}, t)$ удовлетворяет тому же уравнению, что и $f(\vec{p}, \vec{z}, t)$.

Покажем, что непериодические члены в /1/ можно полностью исключить из рассмотрения. Для этой цели в качестве аргумента f вместо \vec{p} введем компоненты инвариантного квазиимпульса k_α , представляющие проекции квазиимпульса \vec{k} в С-системе на векторы решетки \vec{a}_α :

$$k_\alpha = \vec{k} \vec{a}_\alpha = \vec{a}_\alpha (\vec{p} - m \vec{u}). \quad /3/$$

В этих переменных функция Гамильтона имеет вид

$$H = \varepsilon(k_\alpha, g^{\alpha\beta}) + k_\alpha \vec{a}_\alpha \vec{u} + \frac{1}{2} m \vec{u}^2. \quad /4/$$

Для перехода к новым переменным в /1/ полезны соотношения, следующие из формул § 19:

$$\dot{k}_\alpha = \vec{a}_\alpha \{ \kappa_\beta \nabla(\vec{a}^\beta \vec{u}) - m \dot{\vec{u}} \}, \quad /5/$$

$$\frac{\partial f}{\partial \vec{p}} = \vec{a}_\alpha \frac{\partial f}{\partial k_\alpha}, \quad \frac{\partial H}{\partial \vec{p}} = \vec{a}_\alpha \frac{\partial H}{\partial k_\alpha} = \vec{a}_\alpha \frac{\partial \varepsilon}{\partial k_\alpha} + \vec{a}_\alpha (\vec{u} \vec{a}^\alpha), \quad /6/$$

$$\left(\frac{\partial f}{\partial \vec{z}}\right)_{\vec{p}} = \left(\frac{\partial f}{\partial \vec{z}}\right)_{k_\alpha} + \frac{\partial f}{\partial k_\alpha} \left\{ k_\beta a_k^\beta \nabla a_{\alpha k} - m a_{\alpha k} \nabla \dot{u}_k \right\}, \quad /7/$$

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\vec{p}} = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{k_\alpha} + \frac{\partial f}{\partial k_\alpha} \left\{ k_\beta \dot{a}_\alpha \nabla (\vec{a}^\beta \dot{u}) - m \dot{a}_\alpha \dot{u} \right\}, \quad /8/$$

$$\left(\frac{\partial H}{\partial \vec{z}}\right)_{\vec{p}} = \left(\frac{\partial H}{\partial \vec{z}}\right)_{k_\alpha} + \frac{\partial H}{\partial k_\alpha} \left\{ k_\beta a_k^\beta \nabla a_{\alpha k} - m a_{\alpha k} \nabla \dot{u}_k \right\}. \quad /9/$$

С их помощью кинетическое уравнение /1/ принимает вид

$$\frac{Df}{Dt} + \vec{a}_\alpha \frac{\partial \varepsilon}{\partial k_\alpha} \left(\frac{\partial f}{\partial \vec{z}}\right)_{k_\alpha} - \vec{a}_\alpha \frac{\partial f}{\partial k_\alpha} \left\{ m \frac{D\dot{u}}{Dt} + (\nabla \varepsilon)_{k_\alpha} - m \frac{\partial \varepsilon}{\partial k_\beta} [\vec{a}_\beta \text{rot} \dot{u}] - \vec{F} \right\} = \hat{I}f, \quad /10/$$

где $\frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + (\dot{u} \nabla)$, и дифференцирование всех величин по координатам и времени происходит при постоянных k_α .

Член $m \frac{D\dot{u}}{Dt}$ учитывает неинерциальность локальной С-системы.

В отличие от линейных теорий, в которых его приходится вводить искусственно, здесь он получается естественным образом. Этот член ответствен за инерционные явления типа эффекта Стюарта-Толмена в металлах. Видно, что инерционная сила пропорциональна "голой" массе частицы.

Кинетическое уравнение в форме /10/ не содержит неперiodических членов. Обратим внимание на то, что из вида функции Гамильтона /20.8/ следует, что скорость $\partial H / \partial \vec{p}$ также удовлетворяет условию периодичности.

Таким образом, в /10/ допустимы и внешние силы \vec{F} , зависящие от скорости и ее производных. Такова, например, сила Лоренца

$$\vec{F} = -e\vec{E} - \frac{e}{c} \frac{\partial \varepsilon}{\partial k_\alpha} [\vec{a}_\alpha \vec{B}] - \frac{e}{c} [\dot{u} \vec{B}], \quad /11/$$

где \vec{E} и \vec{B} - напряженности электрического и магнитного полей. Подставляя /11/ в /10/ и используя /19.3/, получаем кинетическое уравнение для заряженных частиц с зарядом $-e$:

$$\frac{Df}{Dt} + \vec{a}_\alpha \nabla f \frac{\partial \varepsilon}{\partial k_\alpha} - \frac{\partial f}{\partial k_\alpha} \left\{ \vec{a}_\alpha \nabla \varepsilon + \vec{a}_\alpha e \vec{E}' + \frac{e}{c} \frac{\partial \varepsilon}{\partial k_\beta} [\vec{a}_\alpha \vec{a}_\beta] \vec{B}' \right\} = \hat{I}f, \quad /12/$$

где

$$e \vec{E}' = e \vec{E} + m \frac{D\dot{u}}{Dt} + \frac{e}{c} [\dot{u} \vec{B}]$$

$$\vec{B}' = \vec{B} - \frac{mc}{e} \text{rot} \dot{u} = -\frac{e}{c} \text{rot} (m \dot{u} - \frac{e}{c} \vec{A}) \quad /13/$$

/ \vec{A} - векторный потенциал /.

В дальнейшем, нам понадобится интегрировать плотность различных величин /энергии, импульса, массы и др./ по зоне Бриллюэна, а также дифференцировать и преобразовывать такие интегралы по частям. Однако границы зоны Бриллюэна при нестационарных деформациях зависят от координат и времени /а в общем случае и от скорости/, что приводит к некоммутативности операций интегрирования по $d^3\rho$ и дифференцирования по \vec{z} и t . Коммутаторы выражаются некоторыми интегралами от функции распределения по границе зоны Бриллюэна. В случаях, когда температура не мала по сравнению с шириной энергетической зоны квазичастицы Δ /а это наиболее часто встречающаяся ситуация для дефектного газа/, так же как и при сильном отклонении от равновесия, функция распределения f отлична от нуля на границе зоны, и указанная некоммутативность существенна. Аналогичная ситуация возникает и в металлах с открытыми или дырочными поверхностями Ферми. Эта трудность хорошо заметна в линейных теориях, в которых при разложении по малым деформациям появляется кажущаяся неперiodичность в выражениях для физических величин /напр., второе слагаемое в /20.16/, появившееся от разложения энергии/.

Все эти трудности можно избежать, если вместо $f(k_\alpha, \vec{z}, t)$ ввести в рассмотрение перенормированную функцию

$$\varphi = f(k_\alpha, \vec{z}, t) / \sqrt{g}. \quad /14/$$

Кинетическое уравнение для функции φ имеет вид

$$\dot{\varphi} + \text{div} \left\{ (\dot{u} + \vec{a}_\alpha \frac{\partial \varepsilon}{\partial k_\alpha}) \varphi \right\} - \frac{\partial}{\partial k_\alpha} \left\{ \varphi \vec{a}_\alpha (\nabla \varepsilon + m \frac{D\dot{u}}{Dt}) - m \varphi \frac{\partial \varepsilon}{\partial k_\beta} [\vec{a}_\alpha \vec{a}_\beta] \text{rot} \dot{u} - \vec{a}_\alpha \vec{F} \varphi \right\} = \hat{I}\varphi. \quad /15/$$

Если \vec{F} - сила Лоренца, то в /15/ необходимо подставить

$$-\vec{a}_\alpha \vec{F} = e \vec{E} \vec{a}_\alpha + \frac{e}{c} \frac{\partial \varepsilon}{\partial k_\beta} [\vec{a}_\alpha \vec{a}_\beta] \vec{B} + \frac{e}{c} \dot{u} [\vec{B} \vec{a}_\alpha]. \quad /16/$$

В этих переменных дифференцирование по \vec{z} и t проводится при постоянных k_α и, следовательно, коммутирует с интегрированием по k_α . Результат приводится к обычным переменным / \vec{k} или \vec{p} / заменой

$$\vec{a}_\alpha \frac{\partial}{\partial k_\alpha} \longrightarrow \frac{\partial}{\partial \vec{k}} \longrightarrow \frac{\partial}{\partial \vec{p}}. \quad /17/$$

При этом интегралы по зоне Бриллюэна связаны соотношениями:

$$\begin{aligned} \langle f \dots \rangle &\equiv \int \frac{d^3\rho}{(2\pi\hbar)^3} f(\vec{p}, \vec{z}, t) \dots = \frac{1}{\sqrt{g}} \int \frac{d^3k_\alpha}{(2\pi\hbar)^3} f(k_\alpha, \vec{z}, t) = \\ &= \int \frac{d^3k_\alpha}{(2\pi\hbar)^3} \varphi(k_\alpha, \vec{z}, t) \dots \equiv \langle\langle \varphi \dots \rangle\rangle, \end{aligned} \quad /18/$$

а интегралы по координатам преобразуются следующим образом:

$$\int d^3z \dots = \int d^3N^\alpha \sqrt{g} \dots \quad /19/$$

Из проведенного анализа следует, что правильные результаты можно получать и прямо из уравнения /1/, если формально считать все потоки физических величин через поверхность зоны Бриллюэна равными нулю, несмотря на кажущуюся неперидичность подынтегрального выражения.

Для проведения конкретных вычислений использование кинетического уравнения /15/ и формул /17/-/19/ обладает рядом преимуществ. Продемонстрируем их на примере вычисления изменения плотности энергии квазичастиц во времени:

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle \varepsilon f \rangle = \langle \dot{\varepsilon} \varphi \rangle + \langle \varepsilon \dot{\varphi} \rangle,$$

где

$$\dot{\varepsilon} = \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} \right)_{k_\alpha} = \frac{1}{2} \lambda_{\alpha\beta} \dot{g}^{\alpha\beta} = -\lambda_{\alpha\beta} a_i^\alpha a_k^\beta \frac{\partial \dot{u}_i}{\partial x_k} - \dot{u} (\nabla \varepsilon)_{k_\alpha}, \quad /20/$$

$$\lambda_{\alpha\beta} = 2 \frac{\partial \varepsilon}{\partial g^{\alpha\beta}} = \lambda_{\beta\alpha}.$$

Имеем

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \langle \varepsilon f \rangle &= \langle \varepsilon \dot{f} \rangle - \text{div} \left\{ \dot{u} \langle \varepsilon \varphi \rangle + \vec{a}_\alpha \langle \varepsilon \frac{\partial \varepsilon}{\partial k_\alpha} \varphi \rangle \right\} + \\ &+ \vec{a}_\alpha \langle \dot{F} \frac{\partial \varepsilon}{\partial k_\alpha} \varphi \rangle - m \dot{u} \vec{a}_\alpha \langle \frac{\partial \varepsilon}{\partial k_\alpha} \varphi \rangle - \frac{\partial \dot{u}_i}{\partial x_k} \left\{ m \dot{u}_k a_{\alpha i} \langle \varphi \frac{\partial \varepsilon}{\partial k_\alpha} \rangle + \right. \\ &+ \left. a_i^\alpha a_k^\beta \langle \lambda_{\alpha\beta} \varphi \rangle \right\} = \langle \varepsilon \dot{f} \rangle - \text{div} \left\{ \dot{u} \langle \varepsilon f \rangle + \langle \varepsilon \frac{\partial \varepsilon}{\partial \vec{p}} \varphi \rangle + \right. \\ &+ \left. \langle \dot{F} \frac{\partial \varepsilon}{\partial \vec{p}} \varphi \rangle - m \dot{u} \langle \frac{\partial \varepsilon}{\partial \vec{p}} \varphi \rangle - \frac{\partial \dot{u}_i}{\partial x_k} \left\{ m \dot{u}_k \langle f \frac{\partial \varepsilon}{\partial \vec{p}} \rangle + a_i^\alpha a_k^\beta \langle \lambda_{\alpha\beta} f \rangle \right\} \right\}. \end{aligned} \quad /21/$$

Для сравнения достаточно записать только $\dot{\varepsilon}$ в переменных \vec{p}, \vec{z}, t , используемых в /1/. Тогда вместо /20/ имеем

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} \right)_{\vec{p}} &= -\lambda_{\alpha\beta} a_i^\alpha a_k^\beta \frac{\partial \dot{u}_i}{\partial x_k} - m \dot{u} \frac{\partial \varepsilon}{\partial \vec{p}} - \dot{u} (\nabla \varepsilon)_{\vec{p}} + \\ &+ \left(p_i \frac{\partial \varepsilon}{\partial p_k} - m \dot{u}_i \frac{\partial \varepsilon}{\partial p_k} - m \dot{u}_k \frac{\partial \varepsilon}{\partial p_i} \right) \frac{\partial \dot{u}_i}{\partial x_k}. \end{aligned} \quad /22/$$

Кроме громоздкости выражения, в /22/ появляются и неперидические члены, присутствие которых создает дополнительные трудности.

§ 22. Законы сохранения и уравнения динамики

В этом параграфе из законов сохранения и кинетического уравнения будут получены уравнения динамики твердого тела при наличии квазичастиц. Для определенности будем говорить о дефектонах ⁴⁵.

Уравнение непрерывности для квазичастиц следует из /21.15/:

$$m \dot{n} + \text{div} \vec{J}_0 = 0, \quad /1/$$

где $n = \langle f \rangle = \langle \varphi \rangle$ - плотность числа квазичастиц, а поток их массы /плотность импульса/ равна

$$\vec{J}_0 = m n \dot{u} + \vec{j}_0, \quad \vec{j}_0 = m \left\langle \frac{\partial \varepsilon}{\partial \vec{p}} f \right\rangle. \quad /2/$$

Поток массы, включающий и массу атомов решетки, есть сумма

$$\vec{J} = \vec{J}_0 + \vec{j} = \rho \dot{u} + \vec{j}_0, \quad /3/$$

где $\rho = \rho_0 + m n$ - полная плотность кристалла с дефектонами. В силу /19.8/ и /1/ величины ρ и \vec{J} связаны уравнением непрерывности

$$\dot{\rho} + \text{div} \vec{J} = 0. \quad /4/$$

Полный же импульс системы \vec{J}' включает и импульс поля \vec{g} :

$$\vec{J}' = \vec{J} + \vec{g} = \rho \dot{u} + \vec{g} + m \vec{a}_\alpha \langle \frac{\partial \varepsilon}{\partial k_\alpha} \varphi \rangle. \quad /4a/$$

Для получения замкнутой системы динамических уравнений необходимо определить еще тензор потока импульса Π_{ik} и поток энергии \vec{Q} . Их можно получить с помощью стандартной процедуры, использованной в § 19. Законы сохранения импульса и энергии следует записать, при этом, для всей системы, включая поля:

$$\dot{J}'_i + \nabla_k \Pi_{ik} = 0, \quad /5/$$

$$\dot{E} + \text{div} \vec{Q} = 0. \quad /6/$$

Полная энергия в Л-системе равна сумме

$$E = \frac{1}{2} \rho_0 \dot{u}^2 + E_0(g^{\alpha\beta}) + \langle \dot{E} \varphi \rangle + W, \quad /7/$$

где \mathcal{E} - энергия квазичастицы /20.9/, W - энергия поля, а энергия решетки E_0 является функцией только от метрического тензора. Производная по времени от энергии /7/ равна

$$\begin{aligned} \dot{E} &= \rho \dot{u} \dot{u} + \frac{1}{2} \rho \dot{u}^2 + \sigma_{\alpha\beta} a_i^\alpha a_k^\beta \frac{\partial \dot{u}_i}{\partial x_k} - \dot{u} \nabla E_0 + \frac{\partial}{\partial t} \langle \varepsilon \varphi \rangle + m \dot{u} \vec{a}_\alpha \langle \varphi \frac{\partial \varepsilon}{\partial k_\alpha} \rangle + \\ &+ m \dot{u} \vec{a}_\alpha \langle \varphi \frac{\partial \varepsilon}{\partial k_\alpha} \rangle + m \dot{u} \vec{a}_\alpha \langle \varphi \frac{\partial \dot{\varepsilon}}{\partial k_\alpha} \rangle + m \dot{u} \vec{a}_\alpha \langle \dot{\varphi} \frac{\partial \varepsilon}{\partial k_\alpha} \rangle + \dot{W}, \end{aligned} \quad /8/$$

где использованы формулы /19.13-14/ при $S = 0$. С другой стороны, производная от потока массы /3/ по времени дает

$$0 = -\dot{\vec{J}}' + \rho \dot{\vec{u}} + \dot{\rho} \vec{u} + m \dot{\vec{a}}_\alpha \ll \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \kappa_\alpha} \varphi \gg + m \dot{\vec{a}}_\alpha \ll \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \kappa_\alpha} \dot{\varphi} \gg + m \dot{\vec{a}}_\alpha \ll \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \kappa_\alpha} \varphi \gg + \dot{\vec{g}} \quad /9/$$

Умножая /9/ на $-\vec{u}$ и добавляя результат к правой стороне /8/, получаем

$$\dot{E} = \vec{u} \dot{\vec{J}}' - \rho \frac{\dot{u}^2}{2} + \sigma_{\alpha\beta} a_i^\alpha a_k^\beta \frac{\partial u_i}{\partial x_k} - m \vec{u} \dot{\vec{a}}_\alpha \ll \varphi \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \kappa_\alpha} \gg - \vec{u} \nabla E_0 + \dot{W} - \vec{u} \dot{\vec{g}} + \frac{\partial}{\partial t} \ll \mathcal{E} \varphi \gg \quad /10/$$

Последний член был получен нами в § 21 и дается формулой /21.21/. Выражая производные по времени $\dot{\vec{J}}'$ и $\dot{\rho}$ через производные по координатам по формулам /4/ и /5/, после соответствующих преобразований получаем окончательно

$$\begin{aligned} \dot{E} + \nabla_\kappa \left\{ \frac{1}{2} \rho \dot{u}^2 \dot{u}_\kappa + \dot{u}_i (\Pi_{i\kappa} - \rho \dot{u}_i \dot{u}_\kappa + E \delta_{i\kappa} + \langle \mathcal{E} f \rangle \delta_{i\kappa}) - \right. \\ \left. - \frac{1}{2} m \dot{u}^2 \langle \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \rho_\kappa} f \rangle + \langle \mathcal{E} \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \rho_\kappa} f \rangle \right\} = \\ = \frac{\partial \dot{u}_i}{\partial x_\kappa} \left\{ \Pi_{i\kappa} - \rho \dot{u}_i \dot{u}_\kappa + \sigma_{\alpha\beta} a_i^\alpha a_k^\beta - \langle \lambda_{\alpha\beta} f \rangle a_i^\alpha a_k^\beta + E_0 \delta_{i\kappa} - \right. \\ \left. - \dot{u}_i j_{0\kappa} - \dot{u}_\kappa j_{0i} \right\} + \langle \mathcal{E} \dot{I} f \rangle + \langle \vec{F} \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \vec{p}} f \rangle + \dot{W} - \vec{u} \dot{\vec{g}} \end{aligned} \quad /11/$$

Если \hat{I} есть оператор упругих столкновений квазичастиц между собой или с другими дефектами, то $\langle \mathcal{E} \hat{I} f \rangle = 0$. При наличии столкновений и с фононами энергия дефектонов не сохраняется, и необходимо включить в рассмотрение и фононы. Все полученные уравнения, включая кинетическое уравнение /21.1/, фактически применимы к любым квазичастицам, и, в частности, к фононам. Для учета фононов достаточно в формулы, содержащие интегралы от функции распределения, подставить сумму соответствующих интегралов от дефектной и фононной функций распределения /с учетом, конечно, нулевой массы фононов/. При этом вместо члена с оператором столкновений в /11/ появится сумма

$$\langle \mathcal{E} \hat{I} f \rangle + \langle \varepsilon_{ph} \hat{I}_{ph} f_{ph} \rangle = 0 \quad /12/$$

в силу сохранения суммарной энергии квазичастиц при столкновениях.

Вид членов в /11/, описывающих изменение энергии поля и влияние внешних сил, зависит от конкретного типа взаимодействия. Эти члены будут использованы в следующем параграфе при построении теории металлов, а пока их рассматривать не будем.

Неизвестные потоки энергии и импульса определяются однозначно из сравнения /11/ с /6/:

$$\vec{Q} = \vec{u} \left(\frac{1}{2} \rho \dot{u}^2 + \langle \mathcal{E} f \rangle + \dot{u} \vec{j}_0 \right) + \vec{a}^\alpha (\vec{a}^\beta \vec{u}) (\langle \lambda_{\alpha\beta} f \rangle - \sigma_{\alpha\beta}) + \langle f \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \vec{p}} (\mathcal{E} - \frac{1}{2} m \dot{u}^2) \rangle \quad /13/$$

$$\Pi_{i\kappa} = -(\sigma_{\alpha\beta} + E_0 \delta_{\alpha\beta} - \langle \lambda_{\alpha\beta} f \rangle) a_i^\alpha a_\kappa^\beta + \rho \dot{u}_i \dot{u}_\kappa + \dot{u}_i j_{0\kappa} + \dot{u}_\kappa j_{0i} \quad /14/$$

Уравнение теории упругости /5/ тогда принимает вид

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \dot{u}_i) = - \frac{\partial \Pi_{i\kappa}}{\partial x_\kappa} - \frac{\partial j_{0i}}{\partial t} \quad /15/$$

Оно содержит дополнительную силу в виде производной от квазичастичного тока относительно решетки /в С-системе/.

Таким образом, полная система динамики кристалла с незаряженными квазичастицами состоит из кинетического уравнения /21.1/ или /21.15/, динамического уравнения теории упругости /15/ с потоком импульса /14/ и уравнения непрерывности в форме /1/ или /4/.

§ 23. Уравнения динамики металлов

Если квазичастицы заряжены /для определенности будем говорить об электронах/, то полученную в § 22 систему динамических уравнений необходимо дополнить уравнениями Максвелла

$$\text{rot } \vec{E} = - \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t}, \quad /1/$$

$$\text{rot } \vec{B} = \frac{4\pi}{c} \vec{j} + \frac{1}{c} \frac{\partial \mathcal{E} \vec{E}}{\partial t}, \quad /2/$$

$$\text{div} (\mathcal{E} \vec{E}) = 4\pi (q - en), \quad /3/$$

$$\text{div } \vec{B} = 0, \quad /4/$$

где \vec{B} - магнитное поле / $\mu = 1$, $q = eZ\rho_0/M$ - плотность ионного заряда, Ze - заряд иона, а плотность тока

$$\vec{j} = (q - en) \vec{u} + \vec{j}_e, \quad /5/$$

$$\vec{j}_e = -e \langle \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \vec{p}} f \rangle = - \frac{e}{m} \vec{j}_0 \quad /6/$$

Из /2/ и /3/ следует уравнение непрерывности для заряда

$$\dot{q} - en + \text{div } \vec{j} = 0. \quad /7/$$

В металлах нужно учитывать условие квазинейтральности

$$q = en \quad \text{или} \quad z \frac{\rho_0}{M} = \langle f \rangle. \quad /8/$$

Если учесть, что $M = \rho_0 \sqrt{g}$, то это условие можно записать в более удобной форме

$$Z = \langle f \rangle \equiv 2(2\pi\hbar)^{-3} \int f(k_\alpha, \vec{z}, t) d^3k_\alpha. \quad /9/$$

Как видно из /5/ и /7/, условие /9/ эквивалентно равенствам

$$\text{div } \vec{j} = \text{div } \vec{j}_e = \text{div } \vec{j}_o = 0. \quad /10/$$

Если рассматривать электроны в металлах, то током смещения в уравнениях Максвелла следует пренебречь ¹⁰⁰ как следствием неравенства

$\omega \ll \sigma |\hat{E}|^{-1}$ / ω - характерная частота полей/, всегда выполняющегося ввиду большого значения проводимости σ . Учет током смещения был бы превышением точности. Тогда плотность энергии электромагнитного поля равна $W = B^2/8\pi$, а ее производная по времени

$$\dot{W} = -\text{div } \vec{S} - \vec{j}_e \vec{E}, \quad /11/$$

где $\vec{S} = \frac{c}{4\pi} [\vec{E} \vec{B}]$ - вектор Пойнтинга.

Интеграл в /22.11/, содержащий силу Лоренца /21.11/, переписываем в виде

$$\langle \vec{F} \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \vec{p}} f \rangle = \vec{j}_e \vec{E} + \frac{\vec{u}}{c} [\vec{B} \vec{j}_e]. \quad /12/$$

Последний член преобразуем с помощью /2/:

$$\frac{\vec{u}}{4\pi} [\vec{B} \text{rot } \vec{B}] = -\nabla_k (\dot{u}_i t_{ik}) + t_{ik} \frac{\partial \dot{u}_i}{\partial x_k}, \quad /13/$$

где

$$t_{ik} = \frac{1}{4\pi} \left\{ B_i B_k - \frac{1}{2} B^2 \delta_{ik} \right\} \quad /14/$$

максвелловский тензор магнитного поля.

Следовательно, полный вклад в /22.11/ от электромагнитного поля можно записать в виде

$$\dot{W} + \langle \vec{F} \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \vec{p}} f \rangle = -\nabla_k (S_k + \dot{u}_i t_{ik}) + t_{ik} \frac{\partial \dot{u}_i}{\partial x_k}. \quad /15/$$

Вклад от члена $\vec{u} \vec{q}$ в /22.11/ опущен как следствие пренебрежения током смещения.

После этого полные потоки энергии и импульса в металле становятся равными соответственно:

$$Q_i = Q_{oi} + S_i + t_{ik} \dot{u}_k = \quad /16/$$

$$= E_o \dot{u}_i + \langle \mathcal{E} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} \rangle - \frac{1}{2} \dot{u}^2 J_i + (\Pi_{ik} + t_{ik}) + S_i$$

$$\Pi_{ik} = \Pi_{ik}^o - t_{ik} = -(\sigma_{\alpha\beta} - \langle \lambda_{\alpha\beta} f \rangle) + E_o g_{\alpha\beta} a_i^\alpha a_k^\beta - \frac{m}{e} (\dot{u}_i j_{ok} + \dot{u}_k j_{oi}) + \rho \dot{u}_i \dot{u}_k - t_{ik}, \quad /17/$$

где \vec{Q}_o и Π_{ik}^o даются выражениями /22.13/ и /22.14/.

Таким образом, уравнения динамики металлов состоят из уравнений Максвелла, уравнения квазинейтральности /9/, кинетического уравнения /21.12/ и уравнений теории упругости

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \dot{u}_i) = -\frac{\partial \Pi_{ik}}{\partial x_k} - \frac{m}{e} \frac{\partial j_{ei}}{\partial t}. \quad /18/$$

§ 24. Плотность тока в деформируемом металле

Применим результаты предыдущего параграфа для вычисления плотности тока в металле, подвергнутом произвольной нестационарной деформации. В случае исчезающе малой длины ℓ свободного пробега электронов решением кинетического уравнения является локально равновесная функция $f_o = f_o(\mathcal{E} - \mu(\vec{z}, t))$, где $\mu(\vec{z}, t)$ - химический потенциал,

f_o - фермиевская функция распределения. Для простоты будем рассматривать металл при $T=0$. Зависимость μ от координат и времени определяется условием квазинейтральности /23.6/. В силу симметрии относительно изменения знака времени, закон дисперсии является четной функцией квазиимпульса. Поэтому в нулевом приближении $f = f_o$ плотность тока /23.6/ обращается в нуль, а тензор потока импульса /23.17/ принимает вид

$$\Pi_{ik} = -t_{ik} - (\sigma_{\alpha\beta} - \langle \lambda_{\alpha\beta} f_o \rangle) + E_o g_{\alpha\beta} a_i^\alpha a_k^\beta - \rho \dot{u}_i \dot{u}_k. \quad /1/$$

Чтобы найти $\langle \lambda_{\alpha\beta} f \rangle$, вычислим производную по $g^{\alpha\beta}$ от плотности электронной энергии, соответствующей локально равновесной функции

$$\mathcal{E}_{el} = \langle \mathcal{E} f_o \rangle = \bar{g}^{-1/2} \langle \mathcal{E} f \rangle. \quad /2/$$

Имеем

$$\frac{\partial \mathcal{E}_{el}}{\partial g^{\alpha\beta}} = \mathcal{E}_{el} \sqrt{g} \frac{\partial g^{-1}}{\partial g^{\alpha\beta}} + \bar{g}^{-1/2} \left\{ \frac{1}{2} \langle \lambda_{\alpha\beta} f_o \rangle + \langle \mathcal{E} \frac{\partial f_o}{\partial \mathcal{E}} \frac{\partial (\mathcal{E} - \mu)}{\partial g^{\alpha\beta}} \rangle \right\}. \quad /3/$$

В силу δ -образного характера производной $\partial f_c / \partial \varepsilon$ и условия квазинейтральности /23.9/ последний член в фигурной скобке обращается в нуль. Используя также /19.7/, получаем

$$\langle \lambda_{\alpha\beta} f_0 \rangle = -\varepsilon_{el} g_{\alpha\beta} + \sigma'_{\alpha\beta}, \quad \sigma'_{\alpha\beta} \equiv -2 \frac{\partial \varepsilon_{el}}{\partial g_{\alpha\beta}}. \quad /4/$$

Видно, что член $\langle \lambda_{\alpha\beta} f_0 \rangle$ в /1/ обуславливает просто перенормировку энергии $E_0 \rightarrow E_0 + \varepsilon_{el}$, и уравнения /23.18/ переходят, как и должно быть, в обычные уравнения нелинейной теории упругости.

Для вычисления тока необходимо перейти к следующему по ℓ^{-1} приближению и учесть отклонение функции распределения от ее локально-равновесного вида f_0 . Неравновесную добавку δf удобно найти из кинетического уравнения /21.12/. Подставляя в него $f = f_0 + \delta f$ и удерживая δf лишь в интеграле столкновений и в члене с полем \vec{B}' , получаем

$$-\vec{a}_\alpha \frac{\partial f_0}{\partial k_\alpha} (e\vec{E}' + \nabla\mu) = \hat{I}\delta f + \frac{\partial \delta f}{\partial k_\alpha} \frac{\partial \varepsilon}{\partial k_\beta} \frac{e}{c} \vec{B}' [\vec{a}_\alpha, \vec{a}_\beta], \quad /5/$$

$$e\vec{E}' = e\vec{E} + \frac{e}{c} [\dot{\vec{u}}\vec{B}] + m \frac{D\dot{\vec{u}}}{Dt}, \quad \vec{B}' = \vec{B} - \frac{mc}{e} \text{rot} \dot{\vec{u}}.$$

В левой части этого уравнения опущены члены, четные относительно инверсии $k_\alpha \rightarrow -k_\alpha$. Эти члены были бы существенны при вычислении электронной вязкости. В выражение же для тока они вклада не дают. Учитывая то, что

$$\frac{\partial \delta f}{\partial k_\alpha} \frac{\partial \varepsilon}{\partial k_\beta} [\vec{a}_\alpha, \vec{a}_\beta] = \frac{\partial}{\partial k_\alpha} \left\{ \delta f \frac{\partial \varepsilon}{\partial k_\beta} [\vec{a}_\alpha, \vec{a}_\beta] \right\},$$

перепишем /5/ в виде

$$\frac{\partial}{\partial k_\alpha} \left\{ \frac{e}{c} \delta f \frac{\partial \varepsilon}{\partial k_\beta} \vec{a}_\alpha [\vec{B}'\vec{a}_\beta] - \vec{a}_\alpha (e\vec{E}' + \nabla\mu) f_0 \right\} = \hat{I}\delta f,$$

откуда видно, что плотность тока, равная $-e \langle \delta f \frac{\partial \varepsilon}{\partial \vec{p}} \rangle$, может быть записана в виде

$$\vec{j} = \hat{\sigma}(\vec{B} - \frac{mc}{e} \text{rot} \dot{\vec{u}}) \left\{ \vec{E} + \frac{1}{c} [\dot{\vec{u}}\vec{B}] + \frac{1}{e} \nabla\mu + \frac{m}{e} \frac{D\dot{\vec{u}}}{Dt} \right\}, \quad /6/$$

где $\hat{\sigma}(\vec{B})$ - тензор проводимости неподвижного однородно деформированного металла. Величина

$$\vec{E} + \frac{1}{c} [\dot{\vec{u}}\vec{B}]$$

представляет просто электрическое поле в движущейся системе координат. Аргумент же тензора проводимости можно записать в виде

$$\vec{B}' = -\frac{c}{e} \text{rot} (m\dot{\vec{u}} - \frac{e}{c} \vec{A}),$$

где \vec{A} - векторный потенциал, а $m\dot{\vec{u}}$ - импульс электрона, движущегося

вместе с решеткой. Плотность тока, как и должно быть в нейтральной системе, галилеевски инвариантна.

§ 25. "Закон сохранения" квазиимпульса

Вывод уравнения движения для плотности квазиимпульса представляет особый интерес в связи с большой ролью, которую эта величина играет при рассмотрении любого квазичастичного газа. Здесь мы получим "закон сохранения квазиимпульса" непосредственно из кинетического уравнения без каких-либо приближений. Для этой цели умножим уравнение /21.15/ на k_y и проинтегрируем по зоне Бриллюэна:

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle k_y \varphi \rangle + \text{div} \left\{ \dot{\vec{u}} \langle k_y \varphi \rangle + \vec{a}_\alpha \langle \varphi \frac{\partial \varepsilon}{\partial k_\alpha} k_y \rangle \right\} +$$

$$+ \vec{a}_y \langle \varphi \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial \vec{k}} \right)_{k_\alpha} \rangle + m \langle \varphi \rangle \vec{a}_y \frac{D\dot{\vec{u}}}{Dt} - \vec{a}_y \vec{F} \langle \varphi \rangle -$$

$$- m a_{\beta k} a_{y\ell} \langle \varphi \frac{\partial \varepsilon}{\partial k_\beta} \rangle \left(\frac{\partial \dot{u}_k}{\partial x_i} - \frac{\partial \dot{u}_i}{\partial x_k} \right) = \langle k_y \hat{I} \varphi \rangle, \quad /1/$$

где мы раскрыли смешанное произведение по формуле

$$[\vec{a}_y, \vec{a}_\beta] \text{rot} \dot{\vec{u}} = a_{\beta k} a_{y\ell} \left(\frac{\partial \dot{u}_k}{\partial x_i} - \frac{\partial \dot{u}_i}{\partial x_k} \right). \quad /2/$$

Плотность квазиимпульса \vec{K} в С-системе по определению равна

$$\vec{K} = \langle \vec{k} f \rangle = \vec{a}^t \langle k_y \varphi \rangle. \quad /3/$$

Умножая /1/ на a_i^t и суммируя по y , получаем

$$\dot{K}_i + \langle k_y \varphi \rangle a_k^t \frac{\partial \dot{u}_k}{\partial x_i} + \text{div} \left\{ \dot{\vec{u}} \langle k_i f \rangle + \langle k_i \frac{\partial \varepsilon}{\partial \vec{k}} f \rangle \right\} +$$

$$+ m \langle f \rangle \frac{D\dot{\vec{u}}}{Dt} + m \langle \varphi \frac{\partial \varepsilon}{\partial k_\alpha} \rangle a_{\alpha k} \left(\frac{\partial \dot{u}_i}{\partial x_k} - \frac{\partial \dot{u}_k}{\partial x_i} \right) -$$

$$- F_i \langle f \rangle + \langle \varphi \left\{ (\nabla_i \varepsilon)_{k_\alpha} + \vec{k} \frac{\partial \varepsilon}{\partial k_\alpha} \frac{\partial \vec{a}_\alpha}{\partial x_i} \right\} \rangle = \langle k_i \hat{I} f \rangle. \quad /4/$$

При выводе /4/ использованы тождества, следующие из /19.2/ - /19.5/:

$$\langle \varphi \frac{\partial \varepsilon}{\partial k_\beta} k_y \rangle \vec{a}_\alpha \nabla \alpha_i^t = \langle \varphi \frac{\partial \varepsilon}{\partial k_\alpha} k_y \rangle \vec{a}_\alpha \nabla_i \vec{a}^t =$$

$$= - \langle \varphi \frac{\partial \varepsilon}{\partial k_\alpha} k_y \rangle \vec{a}^t \nabla \vec{a}_\alpha = - \langle \vec{k} \frac{\partial \varepsilon}{\partial k_\alpha} \varphi \rangle \frac{\partial \vec{a}_\alpha}{\partial x_i} \quad /5/$$

/как везде, греческие индексы относятся к инвариантному квазиимпульсу

K_α , а латинские - к компонентам квазиимпульса в декартовой системе: $K_\alpha = a_\alpha^\alpha K_\alpha$ / . Последние члены в левой стороне /4/ представляют производную от энергии при постоянном квазиимпульсе \vec{k} :

$$(\nabla_i \varepsilon)_{\vec{k}} = (\nabla_i \varepsilon)_{K_\alpha} + \frac{\partial \varepsilon}{\partial K_\alpha} \left(\frac{\partial K_\alpha}{\partial x_i} \right)_{\vec{k}} = (\nabla_i \varepsilon)_{K_\alpha} + \vec{k} \frac{\partial \varepsilon}{\partial K_\alpha} \frac{\partial \vec{a}_\alpha}{\partial x_i} \quad /6/$$

Плотность же квазиимпульса в Л-системе равна

$$\vec{P} = \langle \vec{p} f \rangle = \vec{K} + m \vec{u} \langle f \rangle. \quad /7/$$

Окончательно, уравнение переноса квазиимпульса принимает вид⁴⁵

$$\dot{P}_i + \frac{\partial}{\partial x_k} \langle P_i \frac{\partial H}{\partial P_k} f \rangle + \langle f (\nabla_i \varepsilon - F_i) \rangle = \langle P_i \hat{I} f \rangle \quad /8/$$

или, выражая интегралы через соответствующие величины в С-системе,

$$\dot{P}_i + \nabla_k \{ L_{ik} + K_i \dot{u}_k + \dot{u}_i j_{ok} + m \langle f \rangle \dot{u}_i \dot{u}_k \} - \langle (\varepsilon + U) \nabla_i f \rangle = \langle P_i \hat{I} f \rangle, \quad /9/$$

где потенциал внешних сил $\nabla U = -\vec{F}$, а тензор

$$L_{ik} = \langle K_i \frac{\partial \varepsilon}{\partial K_k} f \rangle + \langle (\varepsilon + U) f \rangle \delta_{ik} \quad /10/$$

можно назвать тензором потока квазиимпульса в С-системе.

Если отклонения от равновесия невелики, то L_{ik} можно выразить с помощью термодинамических функций газа⁴⁵. Если для определенности рассматривать квазичастицы, подчиняющиеся статистике Бозе-Эйнштейна, то функция распределения имеет вид

$$f = \left(\exp \frac{\varepsilon - \vec{k} \vec{V} - \mu}{T} - 1 \right)^{-1} \quad /11/$$

Тогда

$$\langle K_i \frac{\partial \varepsilon}{\partial K_k} f \rangle = T \langle \ln(1+f) \rangle \delta_{ik} = -\Omega \delta_{ik}. \quad /12/$$

С другой стороны, подставляя /11/ в выражение для плотности энтропии бозе-газа

$$S = \langle s \rangle, \quad s = (1+f) \ln(1+f) - f \ln f, \quad /13/$$

получаем $TS = T \langle \ln(1+f) \rangle + \langle (\varepsilon - \mu - \vec{k} \vec{V}) f \rangle = -\Omega - \mu n - \vec{k} \vec{V} + \langle \varepsilon f \rangle$

и, следовательно,

$$L_{ik} = (TS + \mu n + \vec{k} \vec{V}) \delta_{ik}. \quad /14/$$

Аналогично можно преобразовать член $\langle \varepsilon \nabla f \rangle$. Из /13/ получаем

$$\nabla s = \frac{\varepsilon - \mu - \vec{k} \vec{V}}{T} \nabla f, \quad /15/$$

откуда

$$\langle \varepsilon \nabla f \rangle = T \nabla s + \mu \nabla n + V_k \nabla K_k. \quad /16/$$

Окончательно, уравнение движения для плотности квазиимпульса принимает вид

$$\dot{P}_i + S \nabla_i T + n \nabla_i \mu + \vec{k} \nabla_i \vec{V} = -\nabla_k (P_i \dot{u}_k + \dot{u}_i j_{ok}) \quad /17/$$

или

$$\dot{P}_i + \nabla_i \Omega = -\nabla_k (P_i \dot{u}_k + \dot{u}_i j_{ok}).$$

Следовательно, в этом случае тензор потока квазиимпульса вырождается в скалярную функцию, совпадающую с термодинамическим потенциалом единицы объема $\Omega(T, \mu, \vec{V})$.

Если решетка покоится, то в линейном по \vec{V} приближении

$$P_i = \rho_{ie} V_e, \quad \rho_{ie} = \left(\frac{\partial^2 \Omega}{\partial V_i \partial V_k} \right)_{T, \mu}, \quad \rho_{ie}^{-1} = \left(\frac{\partial^2 \langle \varepsilon f \rangle}{\partial P_i \partial P_k} \right)_{S, n}. \quad /18/$$

В этом случае уравнение /17/, вместе с уравнением непрерывности/21.1/ и законом сохранения энергии образуют замкнутую систему уравнений. Она будет использована в § 28 для рассмотрения распространения второго звука.

Учитывая /18/, закон сохранения квазиимпульса можно записать с помощью только производных от потенциала Ω :

$$\frac{\partial^2 \Omega}{\partial V_i \partial V_k} \dot{V}_k = \frac{\partial \Omega}{\partial x_i}. \quad /19/$$

Скорость \vec{V} связана простым образом с потоком квазичастиц

$$j_{oi} = -m V_k \langle P_k \frac{\partial \varepsilon}{\partial P_i} \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \rangle = m n V_i. \quad /20/$$

Подставляя /20/ в /22.15/, мы видим, что в стационарно деформированной решетке квазичастицы газ получает ускорение

$$\dot{V}_i = \frac{1}{m n} \frac{\partial \Sigma_{ik}}{\partial x_k}, \quad /21/$$

где

$$\Sigma_{ik} = (\sigma_{\alpha\beta} + E_0 g_{\alpha\beta} - \langle \lambda_{\alpha\beta} f \rangle) a_i^\alpha a_k^\beta. \quad /22/$$

§ 26. Распределение дефектонов во вращающемся ${}^4\text{He}$

В качестве применения нелинейной теории рассмотрим распределение дефектонов в квантовом кристалле, вращающемся с постоянной скоростью $\vec{\omega}$. Имея ввиду возможное применение теории к твердому ${}^4\text{He}$, будем считать, что твердотельный цилиндр вращается в сверхтекучей жидкости с исчезающе малой плотностью нормальной компоненты. Тогда концентрация вакансий на поверхности определяется из условия термодинамического равновесия $\mu(R)=0$ /где μ - химический потенциал вакансионного газа, а R - радиус цилиндра/. Так как вращение с постоянной скоростью равновесно, то функцию распределения можно искать в виде

$$f = f_0(\varepsilon(\vec{r}, \vec{v}) - \mu(\vec{v})). \quad /1/$$

Тогда из кинетического уравнения /21.10/ получаем

$$\vec{u} \nabla f = - \frac{\partial f}{\partial k_\alpha} \left\{ m \ddot{u}_\alpha + (\vec{u} \nabla) \vec{u} + \vec{a}_\alpha \nabla \mu - 2m \frac{\partial \varepsilon}{\partial k_\beta} \vec{\omega} [\vec{a}_\alpha \vec{a}_\beta] \right\} = 0. \quad /2/$$

Первый член в /2/ равен нулю как скалярное произведение ортогональных векторов, а последний исчезает в силу равенства

$$\frac{\partial f}{\partial k_\alpha} \frac{\partial \varepsilon}{\partial k_\beta} [\vec{a}_\alpha \vec{a}_\beta] = \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \left[\frac{\partial \varepsilon}{\partial \vec{r}} \frac{\partial \varepsilon}{\partial \vec{r}} \right] = 0. \quad /3/$$

Подставляя $\vec{u} = [\vec{\omega} \vec{r}]$ в /2/, получаем $\nabla \mu = -m [\vec{\omega} [\vec{\omega} \vec{r}]]$

и, следовательно,

$$\mu = \frac{m}{2} \omega^2 (r^2 - R^2). \quad /4/$$

Для нахождения функции распределения необходимо знать энергию дефектона как функцию деформации. Уравнения теории упругости для рассматриваемого случая имеют вид

$$\frac{\partial}{\partial x_k} \sum_{ik} + F_i = 0, \quad /5/$$

где $\vec{F} = -\rho [\vec{\omega} [\vec{\omega} \vec{r}]]$ - центробежная сила, ρ - плотность, а \sum_{ik} - матрица упругих коэффициентов /25.22/. Поскольку упругие деформации всегда малы, в качестве \sum_{ik} можно взять тензор напряжений. Если для простоты рассматривать среду как изотропную, то

$$\sum_{ik} = \frac{G}{1+\sigma} (u_{ik} + \frac{\sigma}{1-2\sigma} u_{ll} \delta_{ik}), \quad /6/$$

где σ и G - коэффициент Пуассона и модуль Юнга.

Общее решение /5/ в цилиндрических координатах имеет вид

$$u_r = -\alpha \rho \omega^2 r^3 + \text{const. } r, \quad /7/$$

где

$$\alpha = \frac{1+\sigma}{24K(1-\sigma)}, \quad K = \frac{G}{3(1-2\sigma)}. \quad /8/$$

/K - коэффициент всестороннего сжатия/. Если цилиндрическая поверхность свободна, то, определяя const. из граничного условия $\sum_{rr} = 0$, получаем

$$u_r = \alpha \rho \omega^2 r \{ (3-2\sigma)R^2 - r^2 \}. \quad /9/$$

Не нулевые же компоненты тензора деформации равны

$$u_{rr} = \alpha \rho \omega^2 \{ 3(R^2 - r^2) - 2\sigma R^2 \}, \quad u_{\varphi\varphi} = \frac{u_r}{r}, \quad /10/$$

а локальное изменение объема

$$\text{div } \vec{u} = 2\alpha \rho \omega^2 \{ (3-2\sigma)R^2 - 2r^2 \}. \quad /11/$$

Локальный закон дисперсии дефектона в изотропной среде можно записать в виде

$$\varepsilon(\vec{r}, u_{ik}) = (\eta K + \lambda(\kappa)) \text{div } \vec{u} + \varepsilon_0(\kappa), \quad /12/$$

где η описывает изменение объема кристалла, вызванное введением дефекта, а $\lambda(\kappa)$ - изменение в зонном спектре. Для вакансиона можно считать $\eta \sim a^3$. Ввиду малой ширины вакансионной зоны обычно реализуются неравенства

$$T, \lambda < \eta K. \quad /13/$$

В таких ситуациях можно использовать статистику Больцмана, и для распределения вакансионов получаем

$$n(r) = n(R) \exp\left\{-\frac{\varepsilon(r)}{T} \omega^2\right\}, \quad /14/$$

где

$$n(R) \sim \exp\left\{-\frac{\eta \rho (1+\sigma)(1-2\sigma)}{12(1-\sigma)T} \omega^2 R^2\right\}$$

концентрация вакансий на границе с жидкостью,

$$\varepsilon(r) = \left(\eta \rho \frac{1+\sigma}{6(1-\sigma)} - \frac{m_0}{2}\right) (R^2 - r^2), \quad /15/$$

а $m_0 = \frac{1}{2} m$ - масса атома гелия.

Если $\mathcal{H}(r) > 0$, то концентрация квазичастиц должна возрастать с приближением к границе. В случае вакансионных, по-видимому, всегда $\mathcal{H}(r) < 0$, и они собираются к оси цилиндра. Отметим, что распределение /14/-/15/ зависит только от модуля Пуассона, а от модуля всестороннего сжатия /или модуля Юнга/ не зависит.

§ 27. Интеграл столкновений. Диффузия дефектов во вращающемся квантовом кристалле

Как было показано в § 15, в области $T^* < T < T_K$ основную роль играет взаимодействие дефектов с фононами. Существенны при этом двухфононные процессы рассеяния. Показано также, что при каждом акте рассеяния относительные изменения квазиимпульса и энергии дефекта малы /§ 12/. Таким образом, движение дефекта в фононном газе напоминает движение тяжелой частицы в газе легких. Этим обстоятельством можно воспользоваться при вычислении интеграла столкновений. Следуя¹⁰¹, запишем его в виде

$$\hat{I}f = \left\{ \omega(\vec{p}+\vec{q}, \vec{q}) f(t, \vec{p}+\vec{q}) - \omega(\vec{p}, \vec{q}) f(t, \vec{p}) \right\} d^3q, \quad /1/$$

где $\omega(\vec{p}, \vec{q})$ - вероятность рассеяния, при котором происходит изменение квазиимпульса дефекта $\vec{p} \rightarrow \vec{p} + \vec{q}$. Поскольку рассеяние происходит почти упруго, подынтегральное выражение в /1/ можно разложить по малому отношению q/p . Это дает

$$\hat{I}f = \frac{\partial}{\partial p_i} \left\{ A_i f + \frac{\partial f}{\partial p_k} B_{ik} \right\}, \quad /2/$$

где

$$A_i = \int q_i \omega(\vec{p}, \vec{q}) d^3q + \frac{\partial B_{ik}}{\partial x_k}, \quad B_{ik} = \frac{1}{2} \int q_i q_k \omega(\vec{p}, \vec{q}) d^3q. \quad /3/$$

Поскольку интеграл столкновений зануляется равновесной функцией распределения f_0 , то

$$A_i f_0 = - \frac{\partial}{\partial p_k} (B_{ik} f_0).$$

Вводя отклонение функции распределения от равновесной, согласно

$$f = f_0 \left(1 + \frac{\chi}{T} \right) \quad /4/$$

/где χ может быть и не малой добавкой/, имеем

$$\hat{I}f = \frac{\partial}{\partial p_i} \left(\frac{B_{ik} f_0}{T} \frac{\partial \chi}{\partial p_k} \right). \quad /5/$$

Таким образом, мы получили интеграл столкновений в виде, типичном для уравнения Фоккера-Планка. Коэффициент диффузии в импульсном пространстве B_{ik} для кубических кристаллов диагонален и вычислен нами в § 12. Следовательно,

$$\hat{I}f = \frac{B_0}{T} \frac{\partial}{\partial p} \left(f_0 \frac{\partial \chi}{\partial p} \right), \quad /6/$$

где

$$B_0 = \frac{\alpha \sigma_0 S}{a^3} \left(\frac{T}{\theta_p} \right)^9. \quad /7/$$

Если отклонение распределения от равновесного мало, то /5/ переходит в

$$\hat{I}\chi = \frac{B_{\alpha\beta}}{T} \frac{\partial \varepsilon}{\partial k_\alpha} \frac{\partial \chi}{\partial k_\beta}, \quad B_{\alpha\beta} = B_{ik} a_{\alpha i} a_{\beta k}. \quad /8/$$

Рассмотрим дефектонный поток

$$\vec{j} = m \left\langle \frac{\partial \varepsilon}{\partial \vec{k}} f \right\rangle = - m \vec{a}_\alpha \left\langle f_0 \frac{\partial \chi}{\partial k_\alpha} \right\rangle. \quad /9/$$

Очевидно, для его вычисления достаточно только нечетная /относительно инверсии $k_\alpha \rightarrow -k_\alpha$ / часть χ . Она определяется уравнением

$$\frac{D\chi}{Dt} - \frac{\partial \varepsilon}{\partial k_\alpha} \vec{a}_\alpha (\nabla \mu + (\varepsilon - \mu) \nabla \theta) = \frac{\partial \varepsilon}{\partial k_\alpha} \frac{\partial \chi}{\partial k_\beta} \left(\frac{1}{T} B_{\alpha\beta} + m \text{rot} \vec{u} [\vec{a}_\alpha \vec{a}_\beta] \right) /10/$$

где для интеграла столкновений использовано выражение /8/. Таким образом, к коэффициенту диффузии в импульсном пространстве $B_{\alpha\beta}$ добавляется член $mT [\vec{a}_\alpha \vec{a}_\beta] \text{rot} \vec{u}$. При вращении с постоянной скоростью $\text{rot} \vec{u} = 2\vec{\omega}$. Обозначим

$$mT^2 D_{\alpha\beta}^{-1} = B_{\alpha\beta} + 2mT\omega [\vec{a}_\alpha \vec{a}_\beta], \quad /11/$$

определим $\partial \chi / \partial k_\alpha$ из /10/ и подставим в /5/ с учетом равенства

$$\nabla n = \frac{n}{T} \nabla \mu.$$

В результате для плотности тока получаем следующее выражение:

$$\vec{j}_\alpha = D_{\alpha\beta} a_{\beta i} \nabla_i n. \quad /12/$$

Если перейти к декартовым координатам, то компоненты тензора диффузии можно записать в виде:

$$D_{xx} = D_{yy} = \frac{1}{2} \theta_p \frac{\varkappa t^9}{\varkappa^2 t^{16} + \omega^2}, \quad \varkappa = \frac{\alpha \sigma_0}{m a^2} \hbar, \quad t = \frac{T}{\theta_p}. \quad /13/$$

$$D_{xy} = -D_{yx} = -\frac{1}{2} \theta_p \frac{\omega t}{\omega^2 t^{16} + \omega^2}, \quad D_{zz} = \frac{\theta_p}{2\omega} t^{-7}.$$

Таким образом, мы видим, что с помощью вращения можно изменить температурную зависимость коэффициента диффузии на 16 степеней! При $\omega = 0$ $D \sim T^{-7}$, в то время как при $\omega \gg \omega^2 t^8$ имеем $D \sim T^9$. Естественно, диффузия по оси вращения не меняется.

§ 28. Распространение второго звука

Распространение второго звука в твердых телах рассматривалось неоднократно в литературе. При этом подавляющее большинство работ относится к фоновому второму звуку. Случай квазичастиц с произвольным законом дисперсии рассмотрен в ¹⁰², где предполагалось, что равновесный химический потенциал газа равен нулю. Здесь мы проведем исследование в общем виде, вне зависимости от того, сохраняется ли число квазичастиц при столкновениях, или нет. При этом наш метод имеет то преимущество, что позволяет выразить все результаты непосредственно через термодинамические функции газа.

Бездиссипативная система гидродинамических уравнений получена нами в § 25. Она имеет вид

$$\frac{\partial^2 \Omega}{\partial v_i \partial v_k} \dot{v}_k = \frac{\partial \Omega}{\partial x_i} \quad /1/$$

$$\dot{n} + \text{div}(n \vec{v}) = 0, \quad n = \langle f \rangle \quad /2/$$

$$\vec{E} + \text{div} \vec{Q} = 0, \quad E = \langle \varepsilon(\vec{k}) f \rangle. \quad /3/$$

Поток энергии \vec{Q} получен в /22.13/. Его можно выразить через тепловую функцию W :

$$\vec{Q} = \langle \varepsilon \frac{\partial \varepsilon}{\partial \vec{k}} f \rangle = W \vec{v}. \quad /4/$$

Тензор же эффективной плотности ρ_{ie} /25.18/ записывается с помощью равновесной функции f_0 :

$$\rho_{ie} = \frac{\partial^2 \Omega}{\partial v_i \partial v_e} = -\langle k_i k_e \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \rangle = \frac{1}{T} \langle k_i k_e f_0 (f_0 + 1) \rangle. \quad /5/$$

В общем случае ρ_{ie} непропорциональна числу квазичастиц n . Пропорциональность имеет место только в случае квадратичного закона дисперсии $\varepsilon(\vec{k}) = m_{ie}^{-1} k_i k_e$. Тогда $\rho_{ie} = n m_{ie}$.

Если, как это обычно бывает при низких температурах, закон дисперсии степенной $\varepsilon(\kappa) = \alpha_d \kappa^d$, $d = 1, 2$, то эффективная плотность

$$\rho_{ie} \sim T^{\frac{5-d}{d}}, \quad /6/$$

в то время как $n \sim T^{\frac{3-d}{d}}$. В случае термоактивированных /ненулевых/ вакансионных с законом дисперсии $\varepsilon = \varepsilon_0 + \varepsilon(\kappa)$, зависимость как n , так и ρ_{ie} , экспоненциальна. Их отношение, однако, остается степенной функцией температуры

$$\rho_{ie} / n \sim T^{\frac{2-d}{d}}. \quad /7/$$

Линеаризованная система уравнений /1/-/3/ в переменных T, μ, \vec{K} имеет вид

$$\rho_{ie} \dot{v}_e + S \nabla_i T + n \nabla_i \mu = 0, \quad /8/$$

$$\alpha \dot{T} + \beta \dot{\mu} + n \text{div} \vec{v} = 0, \quad /9/$$

$$\gamma \dot{T} + \alpha \dot{\mu} + S \text{div} \vec{v} = 0, \quad /10/$$

где

$$\alpha = \left(\frac{\partial n}{\partial T} \right)_\mu = \left(\frac{\partial S}{\partial \mu} \right)_T, \quad \beta = \left(\frac{\partial n}{\partial \mu} \right)_T, \quad \gamma = \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_\mu. \quad /11/$$

Комбинируя /9/ и /10/ и учитывая, что теплоемкость единицы объема

$$C_v = T \left(\gamma - \frac{\alpha^2}{\beta} \right), \quad /12/$$

можем заменить /10/ уравнением

$$C_v \dot{T} + T S \left(1 - \frac{\alpha}{\beta} \frac{n}{S} \right) \text{div} \vec{v} = 0. \quad /13/$$

Дальнейшее рассмотрение зависит от того, сохраняется ли число квазичастиц при столкновениях, или нет. Если число частиц не сохраняется, то уравнение непрерывности для числа частиц /9/ следует опустить, а в /8/ и /10/ положить $\mu = 0$. Таким образом получаем систему из двух уравнений

$$\rho_{ie} \dot{v}_e + S \nabla_i T = 0, \quad /14/$$

$$C_v \dot{T} + T S \text{div} \vec{v} = 0, \quad /15/$$

совпадающую формально с уравнениями для фонового второго звука в диэлектриках¹⁰⁴. Из /14/ и /15/ следует закон дисперсии второго звука

$$\omega^2(\vec{q}) = \frac{T S^2}{C_v} \rho_{ie}^{-1} q_i q_e. \quad /16/$$

Если число квазичастиц сохраняется, то решение полной системы уравнений /8/, /9/, /13/ приводит к закону дисперсии

$$\omega^2(\vec{q}) = \frac{TS^2}{C_v} \left\{ \left(1 - \frac{\alpha}{\beta} \frac{n}{S}\right)^2 + \frac{C_v}{\beta T} \frac{n^2}{S^2} \right\} \rho_{ie}^{-1} q_i q_e. \quad /17/$$

Это выражение выглядит проще в переменных T, n :

$$\omega^2(\vec{q}) = \left\{ \frac{T}{C_v} \left(\frac{\partial S}{\partial v_0} \right)_T^2 - \left(\frac{\partial \mu}{\partial v_0} \right)_T \right\} \rho_{ie}^{-1} q_i q_e, \quad /18/$$

где $s = S/n$ и $v_0 = n^{-1}$ - энтропия и объем на одну квазичастицу. Наконец, предполагая уравнение состояния известным и используя соотношения Максвелла

$$\left(\frac{\partial s}{\partial v_0} \right)_T = \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_{v_0}, \quad \left(\frac{\partial \mu}{\partial v_0} \right)_T = v_0 \left(\frac{\partial P}{\partial v_0} \right)_T = v_0 \left\{ \left(\frac{\partial P}{\partial v_0} \right)_s + \frac{T}{C_v} \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_{v_0}^2 \right\},$$

где $c_v = C_v/n$ - теплоемкость на одну квазичастицу, получаем

$$\omega^2(\vec{q}) = \left(\frac{\partial P}{\partial n} \right)_s n \rho_{ie}^{-1} q_i q_e. \quad /19/$$

Этот результат можно было получить прямо из системы /2/, /3/, /8/, записанной в переменных n, s, v . При этом, однако, не сразу виден переход к фононному газу.

Как видно из /19/, скорость второго звука совпадает по форме со скоростью звука в обычном газе только в случае квадратичного закона дисперсии квазичастицы, когда $\rho_{ie} = n \delta_{ie}$.

Будучи точными для бозе-газа, полученные результаты справедливы и в предельном случае Больцмановской статистики. Тогда уравнение состояния имеет вид $P = nT$, а производная

$$\left(\frac{\partial P}{\partial n} \right)_s = \frac{c_p}{c_v} T.$$

Следовательно, $c^2 \approx Tn/\rho$, или, с учетом /7/, $c \sim T^{-1/2}$.

§ 29. Линеаризованное кинетическое уравнение

Для решения многих задач достаточно знания линеаризованного кинетического уравнения, в котором деформации и скорости решетки, а также отклонения от равновесного распределения малы. С другой стороны, представляет интерес сравнение линеаризованного уравнения, полученного из точной теории с результатами линейной теории, полученными менее строгим образом.

Для линеаризации удобно использовать кинетическое уравнение в форме /21.10/. Запишем функцию распределения в виде

$$f = f_0 + \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} \chi,$$

где $f_0(\frac{\epsilon - \mu}{T})$ - равновесная функция распределения. Уравнение для функции χ , если деформации и скорости не считать малыми, имеет вид:

$$\begin{aligned} & \frac{D}{Dt} (\chi + \delta\epsilon + \delta\mu - (\epsilon - \mu)\theta) - \frac{\partial \epsilon}{\partial k_\alpha} \vec{a}_\alpha \left\{ \nabla \mu + (\epsilon - \mu) \nabla \chi - m \frac{D\vec{u}}{Dt} + \right. \\ & \left. - \vec{F} + e\vec{E} + \frac{e}{c} [\vec{u} \vec{B}] \right\} + \frac{\partial \epsilon}{\partial k_\alpha} \vec{a}_\alpha \nabla \chi - \frac{\partial \chi}{\partial k_\alpha} \left\{ \vec{a}_\alpha \nabla \epsilon + \vec{a}_\alpha \frac{D\vec{u}}{Dt} - \vec{a}_\alpha \vec{F} + \right. \\ & \left. + \vec{a}_\alpha e\vec{E} + \frac{e}{c} [\vec{a}_\alpha \vec{u}] \vec{B} - m \frac{\partial \epsilon}{\partial k_\beta} [\vec{a}_\alpha \vec{a}_\beta] \text{rot } \vec{u} + \frac{e}{c} \frac{\partial \epsilon}{\partial k_\beta} [\vec{a}_\alpha \vec{a}_\beta] \vec{B} \right\} = \hat{I} \chi, \quad /1/ \end{aligned}$$

где мы для наглядности отделили неэлектромагнитные силы \vec{F} от силы Лоренца, $\delta\epsilon$ и $\delta\mu$ - добавки к равновесным значениям $\epsilon_0(k_\alpha)$ и μ_0 , а $\theta = \delta T/T$.

Если малыми величинами являются также и скорости и компоненты тензора деформации, то, согласно /20.16/,

$$\delta\epsilon = -m \vec{u} \frac{\partial \epsilon}{\partial \vec{p}} + (\lambda_{ik}(\vec{p}) + \rho_i \frac{\partial \epsilon}{\partial p_k}) \frac{\partial u_k}{\partial x_i}, \quad /2/$$

и линеаризованное уравнение имеет вид

$$\frac{\partial \chi}{\partial t} + \vec{v} \nabla \chi - \hat{I} \chi = -\delta\epsilon + \delta\mu + (\epsilon - \mu)\theta + \quad /3/$$

$$+ \vec{v} \left\{ \nabla \mu + (\epsilon - \mu) \nabla \theta + m \vec{u} - \vec{F} + e\vec{E} + \frac{e}{c} [\vec{u} \vec{B}] \right\},$$

где $\vec{v} = \partial \epsilon / \partial \vec{p}$.

По сравнению с линеаризованными уравнениями, использованными в 42, 43, уравнение /3/ содержит дополнительно лишь производные от температуры. Следовательно, несмотря на некоторую искусственность и непоследовательность при их выводе, полученные в 42, 43 результаты совпадают с нашими в линейном приближении.

"Тот, кто роет яму другому, сам в нее попадает".

Притча.

Глава VI. НЕЛИНЕЙНЫЕ ДЕФЕКТНЫ. ДЕФЕКТОН-РЕШЕТОЧНОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ

В этой главе рассмотрим взаимодействие дефектонов с нулевыми фононами. Наличие дефекта меняет как кинетическую энергию /из-за другой массы дефекта/, так и матрицу упругих коэффициентов, что приводит к деформации кристалла. В квантовом описании делокализованного дефекта смещения узлов меняют матричный элемент туннельного перехода. Это означает, что меняется вероятностное распределение дефектона по узлам решетки, вызывающее со своей стороны "перераспределение" деформации. Таким образом возникает нелинейное взаимодействие /типа самовоздействия/, которое может привести к связанному состоянию дефектона с созданной им же деформацией^{39,40}. С математической точки зрения нелинейный дефектон в одномерном случае - это солитон поляронного типа, движущийся по решетке с постоянной скоростью и без изменения формы сопровождающей его деформации.

§ 30. Модель

Гамильтониан деформируемого кристалла с делокализованным дефектом можно записать в виде

$$H = \sum_{R\alpha} \frac{m}{2} (\dot{\xi}_R^\alpha)^2 (1 + \mu B_R^+ B_R) + \frac{1}{2} \sum_{RR'} L_{RR'}^{\sigma\sigma'} \xi_R^\sigma \xi_{R'}^{\sigma'} + \frac{1}{2} \sum_R \Lambda_R B_R^+ B_R - \frac{1}{2} \sum_{RR'} A_{R-R'} B_R^+ B_{R'}, \quad /1/$$

где ξ_R^α - компонента вектора смещения атома, расположенного в узле \vec{R} ,

$\mu = (M-m)/m$, M и m - массы примеси и собственного атома,

$$\Lambda_R = \sum_{R'} \Lambda_{RR'} (\xi_R - \xi_{R'}) \quad /2/$$

- разность между энергиями взаимодействия дефекта и собственного атома с остальными атомами решетки /4.3/. Вторая сумма описывает потенциальную энергию идеального кристалла в гармоническом приближении; B_R^+ и B_R - операторы рождения и уничтожения дефекта в узле \vec{R} /§ 5/.

Решение уравнения Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi \quad /3/$$

будем искать в виде разложения

$$\Psi = \sum_R a_R(t) \Psi_R, \quad /4/$$

где $\Psi_R = B_R^+ |0\rangle$ - волновая функция системы с локализованным дефектом, $|0\rangle$ - волновая функция идеального кристалла. Естественно, коэффициенты a_R должны удовлетворять условию нормировки

$$\sum_R |a_R|^2 = 1. \quad /5/$$

Величины Λ_R и $A_{R-R'}$ зависят от смещений атомов ξ_R . В линейном по смещениям приближении

$$\Lambda_R = \Lambda + \sum_{p\alpha} \Lambda_p^\alpha \xi_{R+p}^\alpha, \quad \Lambda_p^\alpha = -\Lambda_{-p}^\alpha = \frac{\partial \Lambda_{R,R+p}}{\partial \xi_R^\alpha} \Big|_{\xi_R^\alpha = \xi_{R+p}^\alpha} \quad /6/$$

$$A_{R-R'} = A_{R-R'}^0 + \sum_\alpha A_{R-R'}^\alpha (\xi_R^\alpha - \xi_{R'}^\alpha), \quad A_{R-R'}^\alpha = -A_{R'-R}^\alpha = \frac{\partial A_{R-R'}}{\partial \xi_R^\alpha} \Big|_{\xi_R^\alpha = \xi_{R'}^\alpha} \quad /7/$$

Для простоты будем учитывать только переходы дефекта в ближайшие узлы решетки. Тогда гамильтониан системы принимает вид

$$H = H_D + H_L + H_{int}, \quad /8/$$

где

$$H_D = \frac{1}{2} \Lambda - \frac{1}{2} \sum_{R\delta} A_\delta^0 B_R^+ B_{R+\delta},$$

$$H_L = \frac{m}{2} \sum_{R\delta} (\dot{\xi}_R^\alpha)^2 + \frac{1}{2} \sum_{RR'} L_{RR'}^{\alpha\beta} \xi_R^\alpha \xi_{R'}^\beta,$$

$$H_{int} = \frac{m\mu}{2} \sum_{R\alpha} (\dot{\xi}_R^\alpha)^2 B_R^+ B_R + \frac{1}{2} \sum_{Rp\alpha} \Lambda_p^\alpha \xi_{R+p}^\alpha B_R^+ B_R + \frac{1}{2} \sum_{R\alpha\delta} A_\delta^\alpha (\xi_R^\alpha - \xi_{R+\delta}^\alpha) B_R^+ B_{R+\delta},$$

а δ пробегает только по ближайшим соседям. Обратим внимание на необычный вид H_{int} , содержащий член с кинетической энергией.

Подставляя разложение /4/ в уравнение Шредингера /3/ с гамильтонианом /8/, получаем следующую систему уравнений для амплитуд a_R :

$$i\hbar \frac{\partial a_R}{\partial t} = (\varepsilon_0 + T_0 + U_0 + \frac{1}{2} \sum_{p\alpha} \Lambda_p^\alpha \xi_{R+p}^\alpha) a_R - \frac{1}{2} \sum_\delta A_\delta^0 (a_{R+\delta} - a_R) - \frac{1}{2} \sum_{\delta\alpha} A_\delta^\alpha (\xi_R^\alpha - \xi_{R+\delta}^\alpha) a_{R+\delta}, \quad /9/$$

где $\varepsilon_0 = \frac{1}{2} (\Lambda - z A^0)$, z - число ближайших соседей,

$$T_0 = \frac{m}{2} \sum_{R\alpha} (\dot{\xi}_R^\alpha)^2, \quad U_0 = \frac{1}{2} \sum_{RR'} L_{RR'}^{\alpha\beta} \xi_R^\alpha \xi_{R'}^\beta.$$

Для дальнейшего важно, что скорость дефектона много меньше скорости звука в кристалле, и, следовательно, атомы решетки успевают подстраиваться к его движению. Это означает, что значения переменных ξ_R^α и ξ_R^α можно определить из условия минимума функционала

$$H = \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle = \varepsilon_0 + T_0 + U_0 + \frac{1}{2} m \mu \sum_R \dot{\xi}_R^2 a_R^* a_R - \frac{1}{2} A \sum_{R\delta} (a_{R+\delta} - a_R) a_R^* + \frac{1}{2} \sum_{R\rho\alpha} \Lambda_{\rho}^{\alpha} \xi_{R+\delta}^{\alpha} a_R^* a_R - \frac{1}{2} \sum_{R\delta\alpha} A_{\delta}^{\alpha} (a_R^* a_{R+\delta} + a_R a_{R+\delta}^*), \quad /10/$$

играющего роль функции Гамильтона по отношению к координатам ξ_R^α и импульсам $p_R^\alpha = m(1 + \mu|a_R|^2) \dot{\xi}_R^\alpha$. Для этого пишем уравнения Гамильтона и, исключая переменные p_R^α , получаем систему уравнений для смещений:

$$m \frac{\partial}{\partial t} [(1 + \mu|a_R|^2) \dot{\xi}_R^\alpha] = - \sum_{R'\beta} L_{R-R'}^{\alpha\beta} \xi_{R'}^\beta + \frac{1}{2} \sum_{\rho} \Lambda_{\rho}^{\alpha} |a_{R+\rho}|^2 + \frac{1}{2} \sum_{\delta} A_{\delta}^{\alpha} (a_R^* a_{R+\delta} + a_R a_{R+\delta}^*). \quad /11/$$

Таким образом, необходимо решать совместно уравнения /9/ и /11/. Поскольку в дальнейшем нас будут интересовать только деформации, характерный размер которых много больше постоянной решетки, то удобно перейти к континуальному пределу и рассматривать амплитуды a_R и смещения ξ как функции непрерывной переменной \vec{z} и времени. Тогда уравнения /9/ и /11/ принимают вид:

$$i\hbar \frac{\partial a}{\partial t} = (\varepsilon_0 + T_0 + U_0 + \frac{\mu m}{2} \dot{\xi}^2) a + \frac{1}{2} \sum_{\alpha} A_{\alpha}^{\alpha} \frac{\partial^2 a}{\partial x_{\alpha}^2} + \sum (A^{\alpha} + \Lambda^{\alpha}) \frac{\partial \xi^{\alpha}}{\partial x_{\alpha}} a, \quad /12/$$

$$m \frac{\partial}{\partial t} [(1 + \mu|a|^2) \dot{\xi}^{\alpha}] = \sum_{\beta\gamma\delta} c_{\alpha\beta\gamma\delta} \frac{\partial^2 \xi^{\delta}}{\partial x_{\beta} \partial x_{\gamma}} + (A^{\alpha} + \Lambda^{\alpha}) \frac{\partial |a|^2}{\partial x_{\alpha}}, \quad /13/$$

где

$$T_0 = \frac{m}{2} \int \dot{\xi}^2 d^3z, \quad U_0 = \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \int c_{\alpha\beta\gamma\delta} u_{\alpha\beta} u_{\gamma\delta} d^3z,$$

а $u_{\alpha\beta}$ - компоненты тензора деформации.

Почувительно проследить этот вывод в терминах теории упругости для одномерного случая. Тогда плотность энергии

$$\tilde{\mathcal{H}} = \frac{m}{2} \dot{\xi}^2 + \frac{ms^2}{2} u^2 + \frac{\mu m}{2} \dot{\xi}^2 |a|^2 + \lambda u |a|^2 + \frac{1}{2} A \left| \frac{\partial a}{\partial x} \right|^2, \quad /14/$$

а тензор напряжений

$$\sigma = \frac{\partial \tilde{\mathcal{H}}}{\partial u} = ms^2 u + \lambda |a|^2. \quad /15/$$

Упругая сила равна

$$\frac{\partial \sigma}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} (ms^2 u + \lambda |a|^2), \quad /16/$$

а плотность импульса $p = m(1 + \mu|a|^2) \dot{\xi}$. Приравнявая $\dot{p} = \partial \sigma / \partial x$, получаем уравнения движения в виде

$$m \frac{\partial}{\partial t} [(1 + \mu|a|^2) \dot{\xi}] = \frac{\partial}{\partial x} (ms^2 u + \lambda |a|^2). \quad /17/$$

Выражения /15/ и /17/ находятся в полном согласии с результатами общей нелинейной теории /22.14/ и /22.15/. Отсутствие производной от тока по времени в /17/ связано с адиабатичностью движения.

Если дефектон движется с постоянной скоростью v , то ξ и $|a|^2$ являются функциями только от аргумента $x - vt$. В этом случае

$$u = - \frac{\lambda |a|^2}{ms^2(1 - \beta^2)(1 + \zeta |a|^2)}, \quad \zeta = \frac{\mu \beta^2}{1 - \beta^2}, \quad \beta = \frac{v}{s}. \quad /18/$$

При $v=0$ найденное значение u соответствует отсутствию напряжений /ср. /15//.

Выражение /18/ содержит важную информацию. Оно показывает, что деформация решетки пропорциональна вероятностному распределению дефектона по решетке. Этот результат не является проявлением модельных эффектов или одномерности системы. Он следует прямо из выражения /22.14/, которое в линейном приближении по тензору деформации можно записать в виде

$$\sigma'_{ik} = K u_{\ell\ell} \delta_{ik} + 2\mu_0 (u_{ik} - \frac{1}{3} u_{\ell\ell} \delta_{ik}) + \Lambda \langle f \rangle \delta_{ik}, \quad /19/$$

где μ_0 и K - модули сдвига и всестороннего сжатия идеальной среды. Условие $\sigma'_{ik} = 0$ дает тогда

$$u_{ik} = 0, \quad i \neq k; \quad u_{\ell\ell} = \frac{\Lambda}{K} |a|^2, \quad /20/$$

где учтено, что функция распределения $\langle f \rangle \sim |a|^2$.

§ 31. Одномерный случай. Солитонные решения

Перейдем к более детальному изучению описанной модели в одномерном случае. Отметим, что одномерное движение может возникать как за счет сильной анизотропии, так и за счет специфических особенностей движения комплексов из связанных дефектов^{21, 22}. Есть и экспериментальные указания на одномерную диффузию атомов³ в твердом водороде¹⁰⁵, совершающуюся, по-видимому, вдоль дислокаций. Мы не будем связывать наше рассмотрение с конкретной физической системой, а рассмотрим общие свойства одномерного движения в описанной модели, представляющие также определенный методический интерес. Основное внимание при этом будет уделяться солитонным образованиям.

В одномерном случае уравнение /30.12/ переходит в уравнение

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

где

$$T_0 = \frac{m}{2} \int \xi^2 dx, \quad U_0 = \frac{ms^2}{2} \int \left(\frac{\partial \xi}{\partial x} \right)^2 dx. \quad /2/$$

Подставляя /30.18/ в /1/, получаем следующее интегро-дифференциальное уравнение для амплитуды $a(x, t)$:

$$i\hbar \frac{\partial a}{\partial t} = (\varepsilon_0 + T_0 + U_0) a - \frac{1}{2} A \frac{\partial^2 a}{\partial x^2} - \frac{\lambda^2}{ms^2(1-\beta^2)} \frac{|a|^2 a}{1-\xi|a|^2} - \frac{\xi \lambda^2}{2ms^2(1-\beta^2)} \frac{|a|^4 a}{1-\xi|a|^2}; \quad \xi = \frac{\mu\beta^2}{1-\beta^2}. \quad /3/$$

Если через \mathcal{L} обозначить размер деформации, то из условия нормировки следует, что

$$|a|^2 \sim \mathcal{L}^{-1}. \quad /4/$$

Так как этот размер велик по сравнению с постоянной решетки, то в /3/ можно провести разложение по малому параметру $\mathcal{L}^{-1/2}$. Отбрасывая члены порядка \mathcal{L}^{-1} и выше, получаем нелинейное уравнение Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial a}{\partial t} = (\varepsilon_0 + T_0 + U_0) a - \frac{\lambda^2}{ms^2(1-\beta^2)} |a|^2 a - \frac{1}{2} A \frac{\partial^2 a}{\partial x^2}. \quad /5/$$

В этом приближении $u(x, t)$ дается выражением /ср. /30.18//

$$u(x, t) = - \frac{\lambda}{ms^2(1-\beta^2)} |a(x, t)|^2; \quad /6/$$

где коэффициент при $|a|^2$ равен полному изменению длины цепочки, так как амплитуда a нормирована на единицу.

Решение уравнения /5/, нормированное на единицу и исчезающее на бесконечности, имеет вид

$$a(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\mathcal{L}}} \frac{e^{i(\kappa x - \omega t - \varphi)}}{ch \frac{x - x_0 - vt}{\mathcal{L}}}, \quad /7/$$

где $\kappa = \hbar v / A = m^* v$ совпадает с волновым вектором свободного дефектона, x_0 - координата дефектона, а φ - постоянная, зависящая от начальной фазы. Энергия нелинейного дефектона

$$\hbar \omega = \varepsilon_0 + \frac{\hbar^2 v^2}{2A} - \frac{2}{3} \frac{A}{(2\mathcal{L}_0)^2} \frac{1-5\beta^2}{(1-\beta^2)^3}, \quad /8/$$

а размер деформации равен $2\mathcal{L}$, где

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_0 (1-\beta^2), \quad \mathcal{L}_0 = \frac{ms^2 \Delta}{\lambda^2} \quad /9/$$

$\Delta = 2A$ - ширина дефектонной зоны/. Кинетическая и потенциальная энергия равны соответственно

$$U_0 = \frac{\Delta}{6 \mathcal{L}^2 (1-\beta^2)}, \quad T_0 = \beta^2 U_0. \quad /10/$$

Энергию солитона можно представить как сумму энергии покоя \mathcal{E}_0 и кинетической энергии \mathcal{K}_0 :

$$\mathcal{E}_0 = \varepsilon_0 - \frac{\Delta}{3(2\mathcal{L}_0)^2}, \quad \mathcal{K}_0 = \frac{\hbar^2 v^2}{2A} + \frac{\Delta}{12\mathcal{L}_0^2} \frac{\beta^2(2+3\beta^2-\beta^4)}{(1-\beta^2)^3}. \quad /11/$$

Следовательно, при малых скоростях /при которых только и применимо адиабатическое приближение/ энергия солитона располагается ниже энергии свободного дефектона. При заданной ширине дефектонной зоны связанное состояние тем выгоднее, чем меньше длина деформированной области, т.е. чем сильнее дефектон-фононная связь. Эффективная масса солитонного возбуждения равна

$$M^* = m^* + \frac{A}{3s^2 \mathcal{L}_0^2}. \quad /12/$$

В рассматриваемом приближении больших \mathcal{L} она практически не меняется. С увеличением размера деформированной области солитонное решение /7/ плавно переходит в плоскую волну, описывающую свободный дефектон.

Отметим, что свободный дефектон не может проходить через области, где потенциал меняется больше, чем на ширины зоны. Нелинейный же дефектон может двигаться вместе с созданной им потенциальной ямой, изменение которой на длине постоянной решетки может быть много больше ширины зоны $L' \gg \Delta$, не меняя существенно свою эффективную массу.

Если $A < 0$, что соответствует отрицательной эффективной массе свободного дефектона, полученное выше решение нестабильно. В этом случае существуют стабильные решения в коротковолновой части спектра, которая тогда соответствует низколежащим состояниям^{39, 40}. Это легко видеть, если вместо /30.4/, решение уравнения Шредингера искать в виде

$$\Psi = \sum_n e^{i\pi n} a_n B_n^+ |0\rangle. \quad / 13/$$

§ 32. Изотопический эффект. Высшие степени нелинейности

До сих пор мы ограничивались в /31.3/ только членами разложения до третьей степени по обратной длине солитона. Это было сделано ввиду простоты и наглядности истолкования основных особенностей в солитонном описании дефектона. В этом приближении, однако, не учитывается изотопический эффект /уравнение /31.5/ не содержит массу дефекта/. Для учета массы примеси необходимо разложить последние два члена в /31.3/ с точностью до $\mathcal{L}^{-5/2}$. Тогда получается уравнение

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

Солитонные решения /1/ найдены в^{40, 106} и являются частными случаями решений, рассмотренных в¹⁰⁷. Они зависят от знака μ .

Если $\mu > 0$, что соответствует тяжелому дефекту, нормированное солитонное решение уравнения /1/ можно записать в виде

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

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

$$L = \mathcal{L}_0 (1-\beta^2) \frac{\eta}{\hbar v}, \quad \mathcal{L}_0 = \frac{m s^2 \Delta}{\lambda^2}, \quad /3/$$

$$\eta^2 = \frac{2}{3} \zeta \frac{1}{\mathcal{L}_0 (1-\beta^2)}, \quad \zeta = \frac{\mu \beta^2}{1-\beta^2}, \quad /4/$$

$$\hbar \omega = \varepsilon_0 + \frac{\hbar^2}{2A} v^2 + (1+\beta^2) U_0 - \frac{\Delta}{(2L)^2}, \quad /5/$$

$$U_0 = \frac{\Delta}{(2\mathcal{L}_0)^2} \frac{1}{\eta^2 (1-\beta^2)^3} \left(11 \left(1 - \frac{\hbar v}{\eta} \right) - 3 \hbar^2 v^2 \right). \quad /6/$$

Поскольку в рассматриваемом приближении больших \mathcal{L} величина $\eta \sim \mathcal{L}^{-1/2}$ всегда мала, выражения для энергий U_0 и $\hbar \omega$ можно записать в виде

$$U_0 \approx \frac{\Delta}{6 \mathcal{L}_0^2 (1-\beta^2)^3} (1 + 2\eta^2), \quad /7/$$

$$\hbar \omega \approx \varepsilon_0 + \frac{\hbar^2}{2A} v^2 - \frac{\Delta}{12 \mathcal{L}_0^2 (1-\beta^2)^3} \left\{ 1 - 5\beta^2 - 4 \zeta \frac{1+\beta^2/3}{1-\beta^2} \right\}. \quad /8/$$

Формулы /7/ и /8/ отличаются от /31.8/ и /31.10/ малыми добавками, пропорциональными ζ .

Если $\mu < 0$, что соответствует легкому дефекту, решение уравнения /1/ есть

$$a(x, t) = \left(\frac{1}{L} \frac{\hbar v}{\eta} \right)^{1/2} \frac{e^{i(kx - \omega t - \varphi)}}{\left\{ 1 + \operatorname{sec} \eta \cdot \operatorname{ch} \left(2 \frac{x - x_0 - vt}{L} \right) \right\}^{1/2}}, \quad /9/$$

где

$$L = \mathcal{L}_0 (1-\beta^2) \eta \operatorname{ctg} \eta, \quad \eta^2 = \frac{2|\mu|\beta^2}{3(1-\beta^2)^2} \frac{1}{\mathcal{L}_0}. \quad /10/$$

$$\hbar \omega = \varepsilon_0 + \frac{\hbar^2 v^2}{2A} + \frac{\Delta}{(2\mathcal{L}_0 (1-\beta^2) \eta)^2} \left\{ 11 \frac{1+\beta^2}{1-\beta^2} \left(1 - \frac{\hbar v}{\eta} \right) + 4 \frac{1+\beta^2/2}{1-\beta^2} \operatorname{tg}^2 \eta \right\}, \quad /11/$$

$$U_0 = \frac{\Delta}{4 \mathcal{L}_0^2 (1-\beta^2)^3 \eta^2} \left\{ 11 \left(1 - \frac{\hbar v}{\eta} \right) + 3 \operatorname{tg}^2 \eta \right\}, \quad T_0 = \beta^2 U_0. \quad /12/$$

Отметим, что член $\sim a^5$ в уравнении /1/, так же как и все члены более высокого порядка малости, появляющиеся при разложении по $\mathcal{L}^{-1/2}$ коэффициентов в уравнении /31.3/, содержат дополнительный малый множитель $\mu \beta / \mathcal{L}_0$, и ими можно пренебречь. При малых η , что соответствует малым скоростям или малым изменениям массы, решения /2/ и /9/ непрерывно переходят в /31.7/.

В трехмерном случае точного решения задачи в аналитическом виде нет. Как показано в⁴⁰, вариационная процедура с пробной сферически симметрической функцией для деформации не дает связанного состояния дефектона.

" - Ви Фальстаф?!
 - С тех пор, как я родился,
 никому не удалось придумать для
 меня лучшего имени".

В. Шекспир

Глава VII. КВАНТОВАЯ ТЕОРИЯ КРАУДИОНОВ

Как правило, точечный дефект приводит к объемной деформации кристалла, сдвигая существенно только атомы первых координационных сфер. Существуют, однако, случаи, когда внедренный межузельный атом /того же сорта, что и основные атомы решетки/ образует конфигурацию совершенно другого вида, называемую краудионом /рис.15/. Краудион - это избыточный атом, вызывающий деформацию только вдоль одной кристаллографической линии. Такой атом находится в более или менее плотноупакованном ряду, в котором даже далеко отстоящие от него атомы смещены со своих равновесных положений. Краудионная конфигурация может перемещаться только вдоль этого ряда. При этом движение краудиона совершается за счет небольших смещений атомов и не связано с реальным переходом избыточного атома в место нового центра конфигурации. Как правило, краудион появляется в сложных решетках вдоль направления с минимальным периодом повторяемости. Они обладают большой подвижностью и играют существенную роль в явлениях переноса и, в частности, в длиннопробежной миграции дефектов при низких температурах^{108,109}.

Эффективный потенциальный барьер, разделяющий соседние равновесные положения краудиона, много меньше энергии активации обычного дефекта^{8,110}. Поэтому к краудионам неприменимы методы, использованные для дефектов в гелии, и, в частности, приближение сильной связи.

Из сказанного ясно, что краудион является уникальным примером одномерного образования в трехмерном кристалле, обладающим, тем самым, рядом преимуществ по отношению к квазиодномерным моделям, составленным из слабо взаимодействующих цепочек.

§ 33. Краудионная конфигурация

Для описания краудионов в кристалле будем использовать модель, аналогичную модели Френкеля-Конторовой¹¹¹. Будем предполагать, что атомы краудиона взаимодействуют упругими силами и находятся в периодическом поле $W(\xi)$, созданном остальной частью кристалла. При этом, если кристалл деформирован, то влияние деформации можно учесть как изменение амплитуды и периода этого поля.

Лагранжиан рассматриваемой системы при отсутствии деформации можно записать в виде

$$L = \frac{m}{2} \sum_n \dot{\xi}_n^2 - \sum_n \left(\frac{\alpha}{2} (\xi_{n+1} - \xi_n)^2 + W(\xi_n) \right), \quad \alpha = mc^2, \quad /1/$$

где ξ_n - смещение n -ого атома краудионной цепочки от его положения равновесия в идеальном кристалле, c - скорость звука в цепочке, а постоянная решетки $\alpha = 1$. Соответственно уравнения движения в континуальном пределе имеют вид:

$$\frac{\partial^2 \xi}{\partial t^2} - c^2 \frac{\partial^2 \xi}{\partial n^2} = -\frac{1}{m} \frac{\partial W}{\partial \xi} \quad /2/$$

с граничными условиями $\xi(-\infty) = 1, \xi(\infty) = 0, \frac{\partial \xi}{\partial n} \Big|_{-\infty} = 0$.

Предположим, что одночастичный потенциал имеет вид

$$W(\xi) = \frac{1}{2} A (1 - \cos 2\pi \xi). \quad /3/$$

Подставляя /3/ в /2/, получаем хорошо известное уравнение "синус-Гордон", имеющее солитонные решения произвольного порядка. Интересующее нас односолитонное решение имеет форму кинка

$$\xi(x) = \frac{2}{\pi} \arctg e^{\frac{x_0 - x - vt}{\mathcal{L}}}, \quad /4/$$

где x_0 - центр краудиона, определенный как номер атома, смещенного на половину постоянной решетки, а характерная длина образования

$$\mathcal{L} = \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{\alpha}{2A} (1 - \beta^2)}, \quad \beta = v/c.$$

Для применимости континуального приближения необходимо, чтобы она была много больше постоянной решетки, откуда следует неравенство $\alpha \gg A$.

В этом приближении энергия краудионной конфигурации равна

$$E = \frac{U_0}{\sqrt{1 - \beta^2}}, \quad U_0 = \frac{2mc^2}{\pi^2 \mathcal{L}}. \quad /5/$$

Если скорость невелика $v \ll c$, то солитон можно рассматривать как частицу с эффективной массой

$$\mu = \frac{2m}{\pi^2 \mathcal{L}} \ll m. \quad /6/$$

Таким образом, краудионная эффективная масса уменьшается с увеличением ее размера. Чем больше частиц содержит краудионное образование, тем оно "легче".

В континуальном приближении энергия краудиона /5/ вырождена по координате x_0 . Можно было бы ожидать, что это вырождение будет снято с учетом дискретности решетки. Посмотрим, так ли это.

§ 34. Роль дискретности решетки. Проблема пиннинга

Если $\mathcal{L} \gg 1$, функция /4/ правильно описывает расположение атомов. Поэтому энергию краудионного образования с учетом дискретности цепочки можно вычислить с хорошей точностью, подставляя /4/ в сумму

$$E = \sum_n E_n, \text{ где } E_n = \frac{m}{2} \dot{\xi}_n^2 + \frac{mc^2}{2} \left\{ (\xi_{n+1} - \xi_n)^2 + W(\xi_n) \right\}. \quad /1/$$

Используя стандартную методику, пишем

$$E = \int_{-\infty}^{\infty} dk \sum_n \delta(n-k) E_k = \int_{-\infty}^{\infty} E_k dk + \int_{-\infty}^{\infty} E_k \cos 2\pi k dk + \dots \quad /2/$$

Первый интеграл дает значение энергии /5/ в континуальном приближении, а каждый следующий, как можно показать, содержит дополнительный малый множитель $\exp(-\pi^2 \mathcal{L})$. Поэтому достаточно учесть только первую гармонику, которая при $\nu = 0$ дает ⁹

$$E' = \frac{1}{2} U_1 \cos 2\pi x, \quad U_1 = \gamma mc^2 e^{-\pi^2 \mathcal{L}} \quad /3/$$

Численные значения коэффициента γ , найденные различными приближенными методами, лежат в пределах от 4,5 до 6,5. Мы не станем уточнять здесь его значение, так как оно несущественно для дальнейшего. Отметим только, что при вычислении вклада от упругой энергии нужно сохранить ее разностную форму /7/. Если разность смещений заменить производной, то эта производная должна быть взята в точке $n + 1/2$, и интеграл от нее равен

$$I = \int \frac{mc^2}{2} \left(\frac{\partial \xi}{\partial x} \right)_{x=n+\frac{1}{2}} \cos 2\pi n dn = -\frac{mc^2}{2} \int \left(\frac{\partial \xi}{\partial x} \right)_{x=n}^2 \cos 2\pi n dn = - \int W(\xi(x)) \cos 2\pi x dx,$$

так что в этом приближении $E' = 0$ /а отнюдь не $2I$, как утверждается в ^{112,113} и др./.

Таким образом оказывается, что краудион можно рассматривать как легкую частицу в поле экспоненциально малой глубины. Покажем, что такое поле не может удержать его вблизи определенного узла решетки, и, следовательно, задача о пиннинге краудиона является не классической, а квантовой⁸. В качестве критерия квантовости введем параметр δ , аналогичный параметру де Бюра /В1/:

$$\delta = \frac{U_1}{\pi^2 \hbar^2 / \mu a^2}, \quad /4/$$

представляющий отношение глубины эффективного потенциала U_1 к энергии первого квантового уровня /квантовому случаю соответствует $\delta < 1$ /. Пусть \mathcal{L}_c - критическая длина краудиона, при которой $\delta = 1$. В силу /9/ и /10/ она определяется из соотношения

$$\pi^2 \mathcal{L}_c e^{\pi^2 \mathcal{L}_c} = \gamma \left(\frac{mca}{\pi \hbar} \right)^2 \sim \left(\frac{mc^2}{\theta_D} \right)^2, \quad /5/$$

где θ_D - дебаевская температура цепочки. Видно, что $\mathcal{L}_c < 1$, так что практически во всех разумных ситуациях $\delta \ll 1$, и квантовомеханическое описание обязательно. Пиннинга на решетке нет, а краудион превращается в квазичастицу - краудионную волну⁸.

§ 35. Краудион как квазичастица. Краудионная волна

Отсутствие пиннинга означает, что краудион делокализуется и превращается в квазичастицу нового типа - солитонную волну, состояние которой следует описывать не ее координатой и скоростью, а волновым вектором, законом дисперсии и волновой функцией блоховского типа

$$\Psi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{ikx} u_k(x). \quad /1/$$

Чтобы найти закон дисперсии краудионной волны, необходимо отыскать собственные значения уравнения Шредингера

$$\frac{d^2}{dx^2} \Psi_k + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left(E_k - \frac{1}{2} U_1 \cos 2\pi x \right) \Psi_k = 0, \quad E_k = \varepsilon(k) - U_0, \quad /2/$$

соответствующие решениям в виде блоховских волн. Спектр уравнения /2/ довольно сложен, но для интересующего нас случая $\delta \ll 1$ зависимость энергии от квазимпульса можно найти из уравнения⁸

$$\cos k = \cos(\pi \mathcal{L}) + \frac{\pi^2 \delta^2}{4(1-\mathcal{L}^2)} \frac{\sin(\pi \mathcal{L})}{\pi \mathcal{L}}, \quad \mathcal{L}^2 = \frac{2\mu E}{\pi^2 \hbar^2}. \quad /3/$$

Из /3/ при $\mathcal{L} \ll 1$ получаем закон дисперсии

$$\varepsilon(k) = U_0 + \frac{1}{4} U_1 \delta + \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu^*}, \quad /4/$$

где эффективная масса квазичастицы $\mu^* = \mu \left(1 - \frac{1}{2} \delta^2 \right)$.

Волновая функция при $k = 0$ пропорциональна функции Матье, не имеющей узлов

$$\Psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{N}} ce(x, \delta).$$

При $\delta \ll 1$ она меняется медленно, и при $\delta = 0$, $ce(x) = 1$. Таким образом, низколежащие краудионные возбуждения можно описывать плоскими волнами.

§ 36. Взаимодействие с фононами

Распространение упругой волны в кристалле меняет как глубину, так и период эффективного потенциала /33.3/:

$$W(\xi_n, \Delta) = \frac{1}{2} A(\hat{\Delta}) \left\{ 1 - \cos \left(2\pi \frac{\xi_n - u_n}{1 + \Delta_n} \right) \right\}, \quad /1/$$

где u_n - отклонение узлов матрицы от их равновесных положений /рис. 15б/, $\hat{\Delta}$ - тензор деформации с главными значениями $\Delta_n, \Delta_y, \Delta_z$.

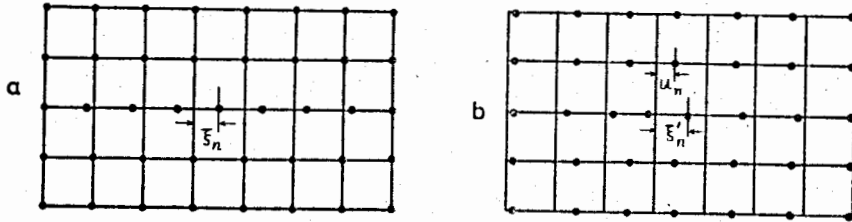


Рис. 15. Расположение атомов краудиона а/ в недеформированном кристалле, б/ при наличии длинноволновой деформации.

В наиболее интересном случае, когда длина волны деформации много больше длины краудиона \mathcal{L} , статическая краудионная конфигурация описывается выражением⁸

$$\xi(n, x) = \frac{2}{\pi} (1 + \Delta_x) \arctg \exp \frac{x - n\mathcal{L}}{\mathcal{L}}, \quad /2/$$

где

$$\mathcal{L} = (1 + \lambda_i \Delta_i) \mathcal{L}_0, \quad \mathcal{L}_0 = \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{\alpha}{2A}}, \quad /3/$$

а амплитуда одночастичного потенциала

$$A(\hat{\Delta}) = A \left\{ 1 - 2(\lambda_1 - 1) - 2\lambda_2(\Delta_2 + \Delta_3) \right\}. \quad /4/$$

Деформация сдвигает и дно краудионной зоны

$$U_0(\hat{\Delta}) = U_0 + \varepsilon_i \Delta_i, \quad \varepsilon_1 = U_0(1 - \lambda_1), \quad \varepsilon_2 = \varepsilon_3 = \frac{\lambda_2}{1 - \lambda_1} U_0. \quad /5/$$

Таким образом, краудионная волна описывается локальным законом дисперсии

$$\varepsilon(k, \hat{\Delta}) = U_0 + \varepsilon_i \Delta_i + \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu^*}. \quad /6/$$

Для того, чтобы краудион был устойчивым образованием, необходимо, чтобы его скорость v была меньше величины c , названной нами условно "скоростью звука в краудионной цепочке". В сложных решетках величина c может сильно отличаться от скорости звука в кристалле s , которая зависит от всех упругих постоянных /не только от α /, и связана со смещением ячейки как целое, а не только с массой m . Наибольший интерес представляет случай $s \ll c$. При этом, если $v \ll s \ll c$, краудион "пульсирует" с фононной частотой, медленно передвигаясь по кристаллу.

Если же $s \ll v \ll c$, возможно "черенковское" излучение фононов⁸. Выбранный нами способ описания позволяет получить вероятности излучения и поглощения фононов методом деформационного потенциала. Не останавливаясь на громоздких выкладках, приведем окончательные результаты.

Если волна распространяется вдоль краудиона, то вероятность W излучения фонона равна

$$W = \frac{\varepsilon_i^2}{2\hbar M s^2 N} \left(\frac{q_x}{2p} \right)^2 \left(\exp \frac{\hbar s q_x}{T} - 1 \right)^{-1}, \quad p = \frac{\mu s}{\hbar}.$$

Поскольку в этом случае излучаются и поглощаются фононы с волновыми векторами $q_x \sim k$, то

$$\frac{\hbar s q_x}{T} \sim \frac{\hbar s k}{T} \sim \left(\frac{\mu s^2}{T} \right)^{1/2}.$$

Таким образом, при $T \gg \mu s^2$

$$W \approx \frac{\varepsilon_i^2}{8 M s^2 N} \frac{q_x}{\mu s} \frac{T}{\mu s^2}.$$

Если же в кристалле возбуждены колебания со всеми возможными направлениями \vec{q} , то $q \sim T/\hbar s$, в то время как $q_x \sim k \sim \sqrt{2\mu T/\hbar}$.

Следовательно,

$$\frac{q_x}{q} \sim \left(\frac{\mu s^2}{T} \right)^{1/2} \sim \frac{s}{v} \ll 1,$$

что указывает на типичный черенковский конус в угловом распределении излучения.

"Все мы знаем, каким должен быть пудинг. Мы не претендуем на то, чтобы уметь его готовить. Это не наше дело. Наше дело - критиковать повара".

Дж.К. Джером. "О том, что не надо слушаться чужих советов"

Глава VIII. СОЛИТОННЫЕ ВОЛНЫ В ПАЙЕРЛСОВСКИХ СИСТЕМАХ

В этой главе рассмотрено влияние квантовых эффектов на структурные дефекты типа кинков в квазиодномерных системах, в которых электрон-фононное взаимодействие приводит к структурному переходу пайерлсовского типа. Эта проблема особенно актуальна в последние годы в связи открытием органических полимеров с большой проводимостью. Есть основания предполагать, что их проводимость обусловлена носителями тока нового типа - заряженными солитонами, во многих отношениях аналогичными краудлонам. Типичный пример такого типа - полиацетилен. Его структура показана на рис. 16. Цепочка углеродных атомов связана чередующимися одинарными σ -электронными и двойными $\sigma + \pi$ связями. Двойная связь короче одинарной, поэтому период решетки включает два атома. Если в некотором месте последовательность связей нарушена, то переход из одной конфигурации к другой "размазывается" на несколько постоянных решетки, образуя протяженный дефект с формой кинка. В самом грубом приближении можно считать, что в зависимости от положения π -связи, для каждого атома имеются два равновесных положения с одинаковой энергией. Таким образом, каждый атом находится в двухъямном потенциале $W(u)$, схематически изображенном на рис. 17. Задача состоит в нахождении потенциала $W(u)$ и в вычислении динамических характеристик солитона.

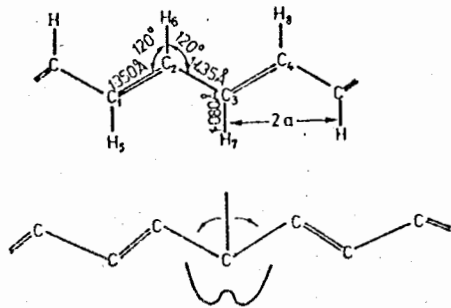


Рис. 16. Транс-полиацетилен по данным ¹¹⁵. Двойная связь короче на 0,085 А. В зависимости от положения подвижной π -связи, атом С находится в левом или правом минимуме двойной ямы.

§ 37. Вычисление солитонных характеристик с помощью только одночастичного потенциала

Имея в виду применение теории не только к полиацетилену, рассмотрим некоторые общие свойства систем с двухъямным потенциалом $W(u)$ /рис.17/, удовлетворяющим условиям

$$W(\pm u_0) = W'(\pm u_0) = 0, \quad /1/$$

$$W(u+a) = W(u), \quad /2/$$

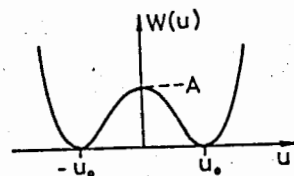


Рис.17. Двухъямный потенциал. и покажем, что динамические характеристики можно вычислить без знания солитонного решения.

Рассмотрим систему, описываемую лагранжианом

$$L = \frac{m}{2} \sum_n \dot{u}_n^2 - \sum_n \left\{ \frac{\alpha}{2} (u_{n+1} - u_n)^2 + W(u_n) \right\}, \quad \alpha = ms^2. \quad /3/$$

Из него следуют уравнения движения

$$m \ddot{u}_n - ms^2 \frac{\partial^2 u_n}{\partial n^2} = \frac{dW}{du_n}. \quad /4/$$

Нас будут интересовать решения в виде волн, распространяющихся с постоянной скоростью v

$$u_n = u(z), \quad z = (n-vt)/\ell. \quad /5/$$

Подставляя /5/ в /4/, имеем

$$\frac{ms^2(1-\beta^2)}{\ell} \frac{d^2 u}{dz^2} = \frac{dW}{du}, \quad \beta = v/s. \quad /6/$$

Умножая уравнение /6/ на du/dz и интегрируя с учетом /1/, получаем

$$\frac{ms^2}{2} \left(\frac{du}{dz} \right)^2 = \frac{\ell^2}{1-\beta^2} W. \quad /7/$$

Поскольку левая сторона /7/ и функция $W(u)$ положительны, то скорость v не может превышать скорость звука s . С другой стороны, уравнение /7/ должно удовлетворяться для любых $v < s$, откуда следует, что

$$\ell = \ell_0 \sqrt{1-\beta^2}. \quad /8/$$

Учитывая /7/, упругую энергию E_{el} можно записать в виде

$$E_{el} = \frac{ms^2}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{du}{dn} \right)^2 dn = \frac{ms^2}{2\ell} \int \frac{du}{dz} dz = \frac{1}{2} \frac{U_0}{\sqrt{1-\beta^2}}, \quad /9/$$

где

$$U_0 = \sqrt{2ms^2} \int_{-u_0}^{u_0} \sqrt{W(u)} du. \quad /10/$$

Аналогично, для кинетической энергии получаем

$$T = \frac{m}{2} \int \dot{u}^2 dn = \beta^2 E_{el}. \quad /11/$$

а для энергии в одночастичном потенциале

$$E_w = \int W(u(n)) dn = \ell \int W(u) \frac{dz}{du} du = \frac{1}{2} U_0 \sqrt{1-\beta^2}. \quad /12/$$

Окончательно, полная энергия и эффективная масса равны

$$E = \frac{U_0}{\sqrt{1-\beta^2}}, \quad m^* = U_0/s^2. \quad /13/$$

Таким образом, энергию солитона и следующую из нее эффективную массу можно получить, не решая нелинейные уравнения /4/, а используя только вид одночастичного потенциала. Обратим внимание также на то, что вклады в эффективную массу от выражений /11/ и /12/ одинаковы по величине и отличаются только знаками. Поэтому эффективную массу можно определить из любого из них, но не из их суммы.

В качестве примера рассмотрим потенциал " φ^4 ":

$$W(u) = \frac{1}{4} \gamma u_0^2 \left\{ \left(\frac{u}{u_0} \right)^2 - 1 \right\}^2. \quad /14/$$

Подставляя /14/ в /10/, находим

$$U_0 = \frac{4ms^2}{3\ell_0} u_0^2, \quad m^* = \frac{4}{3} \frac{m}{\ell_0} u_0^2, \quad /15/$$

где

$$\ell_0 = \left(\frac{2ms^2}{\gamma} \right)^{1/2}. \quad /16/$$

Солитонное решение в этой модели известно:

$$u = u_0 \operatorname{th} \left(\frac{x-vt}{\ell} \right), \quad \ell = \ell_0 \sqrt{1-\beta^2} \quad /17/$$

и, естественно, приводит к тем же результатам.

Разумеется, таким же образом можно рассмотреть краудинный случай /§ 33/, поскольку потенциал /33.3/ удовлетворяет условиям /1/ и /2/ при $u_0=1$.

Сравнивая с результатами, полученными для краудинонов в § 33, видим, что энергия U_0 и эффективная масса $m^*/13/$ содержат дополнительный малый множитель u_0^2 . Такой же параметр появляется и в модели

Шу-Шриффера-Хигера /ШШХ/ 116. Благодаря ему эффективная масса солитона в полиацетилене оказывается равной всего лишь нескольким электронным массам, несмотря на то, что сам солитон состоит из многих СН групп.

Следует специально подчеркнуть, что в рассматриваемых моделях u_0 и ℓ^{-1} не должны быть слишком малы. Точнее, величина u_0 должна быть больше амплитуды нулевых колебаний в каждой из ям одночастичного потенциала. К сожалению, как будет показано в следующем параграфе, именно это условие нарушается в модели ШШХ.

§ 38. Модель Шу-Шриффера-Хигера

В основе модели ШШХ лежит гамильтониан

$$H = \sum_n \left\{ \frac{p_n^2}{2m} + \frac{ms^2}{2} (\xi_{n+1} - \xi_n)^2 \right\} - \sum_{n\sigma} t_{n+1,n} (a_{n+1,\sigma}^+ a_{n\sigma} + a_{n\sigma}^+ a_{n+1,\sigma}), \quad /1/$$

где n нумерует узлы решетки, σ указывает направление спина, $a_{n\sigma}^+$ и $a_{n\sigma}$ - операторы рождения и уничтожения электронов, t_{mn} - матричный элемент перехода электрона в приближении сильной связи, p_n и ξ_n - импульс и смещение атома в узле n .

Так же, как и в §§ 30,31, разложим величину t_{mn} по малым смещениям

$$t_{n+1,n} = t_0 + t_1 (\xi_{n+1} - \xi_n), \quad /2/$$

после чего гамильтониан взаимодействия принимает вид

$$H_{int} = -t_1 \sum_{n\sigma} (\xi_{n+1} - \xi_n) (a_{n+1,\sigma}^+ a_{n\sigma} + a_{n\sigma}^+ a_{n+1,\sigma}). \quad /3/$$

Дальше можно идти двумя путями. Если предположить, что электрон-фононное взаимодействие не меняет структуру, то можно применить метод, использованный в Главе VI, и получить поляронное решение типа /31.7/. В модели же ШШХ предполагается, что электрон-фононное взаимодействие меняет классическое основное состояние и приводит к димеризации решетки. Новое состояние можно получить, формально, вводя в /1/ и /3/ смещения

$$\xi_n = (-1)^n u. \quad /4/$$

В результате, гамильтониан взаимодействия упрощается:

$$H_{int} = -2t_1 u \sum_{ns} (-1)^n (a_{n+1,s}^+ a_{ns} + a_{ns}^+ a_{n+1,s}). \quad /5/$$

Удваивание периода решетки приводит, естественно, к двукратному уменьшению зоны Бриллюэна и к появлению двух энергетических зон - валентной зоны E_κ^v и зоны проводимости E_κ^c , где

$$E_\kappa^c = -E_\kappa^v = 2t_0 \cos \kappa a = \varepsilon(\kappa). \quad /6/$$

Вводя обычным образом операторы рождения и уничтожения электрона в валентной зоне $a_{k_s}^{v+}$, $a_{k_s}^v$ и в зоне проводимости $a_{k_s}^{c+}$, $a_{k_s}^c$, получаем гамильтониан системы в виде

$$H = \sum_{k_s} \left\{ \varepsilon(k) (a_{k_s}^{c+} a_{k_s}^c - a_{k_s}^{v+} a_{k_s}^v) + 4t_1 u \sin ka (a_{k_s}^{c+} a_{k_s}^v + a_{k_s}^{v+} a_{k_s}^c) \right\} + 2Nms^2 u^2, \quad /7/$$

которое после диагонализации с помощью преобразований Боголюбова дает

$$H = \sum_{k_s} E_k (n_{k_s}^c - n_{k_s}^v) + 2Nms^2 u^2, \quad /8/$$

$$E_k = (\varepsilon^2(k) + \Delta_k^2)^{1/2}, \quad \Delta_k = 4t_1 u \sin ka.$$

Основное состояние цепочки с одним π -электроном на узел получается из /8/ при условии $n_{k_s}^v = 1$, $n_{k_s}^c = 0$. Заменяя сумму интегрированием по зоне Бриллюэна, получаем энергию на одну частицу:

$$E_0 = -\epsilon_0 + W(u), \quad /9/$$

где

$$W(u) = \frac{W}{\pi} z_0^2 \left\{ \left(\frac{u}{u_0} \right)^2 \left[\ln \left(\frac{u}{u_0} \right) - 1 \right] + 1 \right\}, \quad /10/$$

$$\epsilon_0 = \frac{W}{\pi} (1 + z_0^2), \quad z_0 = \frac{2}{\theta} e^{-\frac{1}{2\lambda}}, \quad u_0 = \frac{t_0}{t_1} z_0, \quad /11/$$

$W = 4t_0$ - ширина электронной зоны, а постоянная электрон-фононного взаимодействия /ср. /31.9// равна

$$\lambda = \frac{2t_1}{\pi t_0 ms^2}. \quad /12/$$

Значения входящих в /1/-/12/ параметров ¹¹⁶ таковы: $t_0 = 2,5$ эВ, $K = ms^2 = 21$ эВ, $t_1 = 4,1$ эВ/Å, $u_0 = 0,04$ Å, $\lambda = 0,20$.

Таким образом, одночастичный потенциал состоит из двух ям, разделенных барьером A , который удобно записать в виде

$$A = \lambda \frac{m\omega_0^2 u_0^2}{2}, \quad /13/$$

где $\omega_0 = 2\sqrt{K/m}$ - граничная частота акустического спектра в "металлическом" состоянии. Таким образом, каждую из локальных ям /рис. 17/ можно аппроксимировать гармоническим потенциалом с перенормированной в λ раз кривизной. Поэтому первый квантовый уровень в такой яме есть $\frac{1}{2} \hbar \omega = \hbar \sqrt{\lambda K/m}$. Сравнивая с высотой потенциального горба A , имеем

$$\frac{2A}{\hbar \omega} = u_0^2 \frac{\sqrt{\lambda} ms}{\hbar} \ll 1. \quad /14/$$

Это означает, что координаты атомов являются плохими характеристиками состояния, и описание димеризации с помощью использованной модели недостаточно корректно. По-видимому, модель IIIIX можно использовать с большим успехом в квазиодномерных структурах из более тяжелых атомов.

§ 39. Еще раз о пиннинге кинков на решетке

Полученные в § 37 формулы, выражающие динамические характеристики солитонов с помощью одночастичного потенциала, справедливы только в континуальном приближении. Для того, чтобы учесть роль дискретности решетки, необходимо знать соответствующее решение нелинейного уравнения и подставить его в /34.1/ и /34.2/. При этом результат будет тем точнее, чем больше размер солитона ℓ . Для модели φ^4 интегралы /34.2/ можно взять точно ⁹. В результате оказывается, что солитон находится в эффективном потенциале, обладающем периодом решетки:

$$U(x) = \frac{1}{2} U_1 \cos 2\pi x, \quad U_1 = 8\pi^2 \left(\frac{\pi^2}{3} - 1 \right) ms^2 \ell_0^2 u_0^2 e^{-\pi^2 \ell_0} \quad /1/$$

Амплитуда этого потенциала вычислялась в различных работах ^{113,117} и рассматривалась как критическая энергия отрыва солитона. В классической теории она связана с порогом проводимости, так как носителями тока в полиацетилене являются заряженные кинки. Из сравнения пороговой энергии U_1 с энергией взаимодействия солитонов в ¹¹³ вычислялась критическая концентрация, при которой начнется беспороговая проводимость. В ¹¹⁶ эта энергия названа энергией пиннинга и оценена на 20-40 К. В действительности легко видеть, что так же, как и в случае краудина, пиннинг солитонов в полиацетилене на решетке невозможен даже при $T=0$. Для полиацетилена введенный нами параметр квантовости /34.4/ меньше единицы при условии

$$\pi^2 \ell e^{\pi^2 \ell} > 8\pi^2 \left(\frac{\pi^2}{3} - 1 \right) \left(\frac{ms^2}{\theta} \right)^2 \left(\frac{u_0}{a} \right)^4 \ell^2, \quad /2/$$

что выполнено даже при $\ell = 1$.

Таким образом, солитоны в полиацетилене делокализуются и превращаются в квазичастицы - солитонные волны. Поправка к эффективной массе солитона мала $\sim \delta^2$. Поэтому уточнение параметров эффективного решеточного потенциала /1/ не нужно. Более того, его во многих задачах вовсе не следует принимать во внимание.

"На репетиции Бойто, слушая свою оперу, сказал, ни к кому не обращаясь: - Мне кажется, в этой опере есть места, которые не заслуживают свиста".

Влас Дорошевич. "Театральные заметки"

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Заканчивая книгу, я хотел бы еще раз подчеркнуть исключительную жизнеспособность метода квазичастиц. Будучи созданным более полувека назад, он остается актуальным и по сегодняшний день и продолжает совершенствоваться и расширять свою сферу влияния на все новые и новые объекты. Среди них важное место занимают различные "тяжелые" дефекты - вакансии, примеси, краудины, кинки и др., которые и составили основу настоящих лекций. Новым моментом является также квазичастичная динамика в деформируемых твердых телах. К сожалению, ограниченный объем книги не позволяет рассмотреть еще ряд проблем, представляющих определенный интерес с теоретической или экспериментальной точки зрения. Среди них - теплопроводность и сверхтекучесть квантовых кристаллов с дефектами, квантовая диффузия в условиях сильной локализации дефектонов, а также обнаруженная недавно квазиодномерная диффузия примесей. Я не обсуждал также применение метода квазичастиц к легким примесям водорода в металлах, квантовую диффузию мюонов и др. Все это читатель может найти в литературе. Каждая из указанных проблем обладает своей спецификой, изложение которой заняло бы неоправданно много места и усилий и не соответствовало бы стилю и целям лекций. Большинство из этих проблем, так же, как и те, которые рассмотрены в книге, все еще далеки от полного завершения и предоставляют большое поле деятельности. Я был бы очень рад, если бы настоящая книга могла привлечь к ним внимание читателей.

ЛИТЕРАТУРА

1. Ландау Л.Д. Собрание трудов, т.1, М., "Наука", 1969, с. 352.
2. Ландау Л.Д. ЖЭТФ, 1956, 30, 1058.
3. Боголюбов Н.Н. Избранные труды, т.2, Киев, "Наукова думка", 1970, с. 287.
4. Соловьев В.Г. Теория атомного ядра. М., "Энергиздат", 1981.
5. de Wette F.H., Nijboer B.R.A. Phys. Lett., 1965, 18, 19.
6. Мотт Н., Месси Г. Теория атомных столкновений, М., "Мир", 1969.
7. Максимов Е.Г., Панкратов О.А. УФН, 1975, 116, с.385.
8. Пушкарлов Д.И. ЖЭТФ, 1973, 64, 634.
9. Pushkarov D.I. Solid-State Commun. 1985, 54; JINR E17-84-752, Dubna, 1984.
10. Пушкарлов Дмитрий И. Квазичастичный подход в квантовой теории дефектов - Дисс. д-р физ.-мат.наук, Дубна, ОИЯИ, 1986; Автореферат ОИЯИ I7-86-223, Дубна, 1986.
11. Андреев А.Ф., Лифшиц И.М., ЖЭТФ, 1969, 563, 2057.
12. Guyer R.A., Zane L.L. Phys. Rev., Lett., 1970, 24, 660.
13. Пушкарлов Д.И. ЖЭТФ, 1970, 59, 1755.
14. Пушкарлов Дмитрий И. Квантовая теория дефектов в кристаллах при низких температурах. Дисс. канд. физ.-мат.наук, Москва, МГУ, 1972;
15. Richards R.G, Pope J., Widom A. Phys. Rev. Lett., 1972, 29, 708.
16. Landesman A., Winter J.M. in Low Temperature Physics, LT13, v.2, New York, London, Plenum 1974, p. 73.
17. Григорьев В.Н. и др., Письма в ЖЭТФ, 1973, 17, 25.
18. Григорьев В.Н. и др. ЖЭТФ, 1973, 64, 608; ЖЭТФ, 1974, 66, 321; ФНТ, 1975, 1, 5.
19. Grigoriev V.N. et al., J. Low Temp. Phys., 1973, 13(1/2), 65.
20. Пушкарлов Д.И. Письма в ЖЭТФ, 1974, 19, 751.
21. Андреев А.Ф. ЖЭТФ, 1975, 68, 2341.
22. Андреев А.Ф. УФН, 1976, 118, 251.
23. Мейерович А.Э. ЖЭТФ, 1975, 69, 1325.
24. Андреев А.Ф., Мейерович А.Э. ЖЭТФ, 1974, 67, 1559.
25. Пушкарлов Д.И. Письма в ЖЭТФ, 1978, 27, 6.
26. Андреев А.Ф. Письма в ЖЭТФ, 1976, 24, 608.
27. Montambaux G., Heritier M., Lederer P. J. Low Temp. Phys., 1982, 47 (1/2), 39.
28. Пирадашвили И.Н. ЖЭТФ, 1984, 84, 124.
29. Варданян Г. УФН, 1984, 144, 113.
30. Pushkarov D.I. Phys. Stat. Sol (b), 1977, 80, 295.
31. Guyer R.A. J. Low Temp. Phys., 1972, 8, 427.
32. Hetherington J.H., 1978, 32 (1/2), 173.
33. Guyer R.A. Phys. Rev. Lett., 1977, 26, 174

34. Salow W.M. Phys. Rev., 1977, B15, 173.
35. Liu M. Phys. Rev., 1978, B18, 1165.
36. Enz Ch. Rev. Mod. Phys., 1974, 46, 705.
37. Каган Ю., Максимов Л.А. ЖЭТФ, 1983, 84, 792.
38. Kagan Yu., Maksimov L.A., Phys. Lett., 1983, 95A, 242.
39. Pushkarov D.I., Pushkarov Kh.I. J. Phys. C., 1977, 10, 3711.
40. Пушкарлов Д.И., Койнов Зл. ЖЭТФ, 1978, 74, 1845.
41. Pushkarov Kh.I., Pushkarov D.I. Optical and acoustic waves in solids - Morden Topics -ed. M. Borissov, World Sci. Publ. Singapore, 1985, p. 229.
42. Конторович В.М. ЖЭТФ, 1963, 45, 1638; 1970, 59, 2116.
43. Конторович В.М. УФН, 1984, 142, 265.
44. Андреев А.Ф., Пушкарлов Д.И. ЖЭТФ, 1985, 89, 1883.
45. Pushkarov D.I. Preprint JINR: E17-85-531, Dubna, 1985; J. Phys. C., 1986, 19, 6873.
46. Flinn C.P., Stoneham A.M. Phys. Rev. 1970, 1, 3966.
47. Wipf H., Neumaier K. Local diffusion and tunneling of trapped Hydrogen in metals. In.: Electronic structure and properties of Hydrogen in metals, ed P. Jena and C.B. Satterthwaite, Plenum Publ. Corp., New York, 1983,
48. Silvera I.F. Rev. Mod. Phys., 1980, 52, B93.
49. Danilovicz R.L., Etteres R.D. Phys. Rev., 1979, B19, 2321.
50. Dobson J.F., Ashcroft N.W. Phys. Rev., 1977, B16, 5326.
51. Свойства жидкого и твердого гелия. Растворы ^3He - ^4He -справочник, под ред. Б.Н. Есельсона, "Наукова думка", Киев, 1982.
52. Растворы квантовых жидкостей. Б.Н. Есельсон и др. М., "Наука", 1973.
53. Trikey S.E., Kirk W.P., Adams E.D. Rev. Mod. Phys., 1972, 44, 668.
54. Pandorf R.C., Edwards D.O., Phys. Rev., 1968, 169, 222.
55. Абрагам А., Гольдман М. Ядерный магнетизм: порядок и беспорядок. "Мир", Москва, 1984. т. I.
56. Nosanov L.H. Phys. Rev., 1966, 146, Second ser. 120.
57. Hetherington J.H., Mullin W.J., Nosanov L.H. Phys. Rev., 1967, 154, 175.
58. Guer R.A., Zane L.I. Phys. Rev., 1969, 188, 445.
59. Iwamoto F., Namaizawa H., Progs. Theor. Phys., 1966, 37, 38, 234.
60. Mullin W.J., Nosanov L.H., Steinback P.M. Phys. Rev., 1969, 188, 419.
61. Hansan J.P., Levesque D. Phys. Rev., 1968, 165, 293.
62. Yukalov V.I. Annalen d. Phys., 1981, 38, 419.
63. Эшелби Дж. Континуальная теория дислокаций. ИЛ, Москва, 1963.
64. Лифшиц И.М., Таматаров Л.В. Об упругом взаимодействии атомов примеси в кристалле. ФММ, 1961, 12, 331.

65. Лифшиц И.М., ЖЭТФ, 1948, 18, 293.
66. Марадурин А., Монтролл Э., Вейсс Дж. Динамическая теория кристалл. решетки в гармоническом приближении, М., "Мир", 1965.
67. Anderson P.W. Concepts in solids.-ed D.Pines, W.A. Benjamin INC., New York, Amsterdam, 1963.
68. Bernier M.E.R., J. Low Temp. Phys., 1984, 56, 205.
69. Greywall D.S. Phys. Rev., 1977, B15, 2604.
70. Edwards D.O. Pandorf R.C. Phys. Rev., 1965, 140, sec. ser. A 816
71. Pushkarov D.I., Pushkarov Kh.I. Phys. Stat. Sol. (b) 1976, 74, K97.
72. Пушкарлов Д.И. ЖЭТФ, 1975, 68, 1471.
73. Pushkarov D.I. Phys. Stat. Sol (b), 1986, 133, 525.
74. Каплан И.Г. ТМФ, 1976, 27, 254.
75. Chesnut D.B., Suna A., J. Chem. Phys. 1963, 39, 146.
76. Есельсон Б.Н., Михеев В.А., Григорьев В.Н., Михин Н.П. ЖЭТФ, 1978, 74, 2311.
77. Есельсон Б.Н., Михеев В.А., Григорьев В.Н., Михин Н.П. Диффузия примесей в твердых растворах изотопов гелия - в кн.: Материалы 20 Всесоюз. совещ. по физике низких температур- ИТ 20, ч. II, Москва, 1979, с. 236.
78. Allen A.R., Richards M.G. Phys. Lett., 1978, A65, 36.
79. Allen A.R., Richards M.G., Schratte J., Low Temp. Phys., 1982, 47, 289.
80. Kagan Yu.M. Quatum Diffusion in Crystals. In.: Defects in insulating crystals. Proc. Int. Conf. (Riga, May, 1981), Berlin - Heidelberg - New York, Springer Verlag, 1981, p. 17.
81. Kagan Yu.M. Klinder M.I. J. Phys. C., 1974, 7, 2791.
82. Miyoshi D.S., Cotts R.M., Greenberg A.S., Richardson R.C. Phys. Rev., 1970, A2, 870.
83. Widom A., Richards M.G. Phys. Rev., 1972, A6, 1196.
84. Huang W. Goldberg H.A. Guyer R.A. Phys. Rev., 1975, B11, 3374.
85. Михеев В.А., Есельсон Б.Н., Григорьев В.Н., Михин Н.Т. ФНТ, 1977, 3, 385.
86. Sacco J.E., Widom A., Locke D., Richards M.G. Phys. Rev. Lett., 1976, 37, 760.
87. Пушкарлов Д.И. ФНТ, 1975, 1, 586.
88. Стосарев В.А., Стржемячский М.А., Бурахович И.А., ФНТ, 1977, 3, 1229.
89. Landesman A. Phys. Lett., 1975, 54A, 137.
90. Yamashita Y., J. Phys. Soc. Japan, 1974, 37, 1210.
91. Pushkarov D.I. Phys. Stat. Sol. (b), 1977, 80, 295.
92. Sacco J.E., Widom A., Phys. Rev., 1978, B17, 204.
93. Schratte J., Allen A.R., J. Low Temp. Phys., 1984, 57, 179.
94. Wilks J., The Properties of Liquid and Solid Helium. Oxford University Press, 1967.

95. Лифшиц И.М., ЖЭФ, 1960, 38, 1569.
96. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М., Статистическая механика, М., Наука, 1976.
97. Grilly E.R. J. Low Temp. Phys., 1973, II, 33.
98. Кочин Н.Е. Векторное исчисление и начала тензорного исчисления. "Наука", Москва, 1965.
99. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика М., "Наука", 1974.
100. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Электродинамика сплошных сред. М., "Наука", 1979.
101. Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П. Физическая кинетика. "Наука", 1979.
102. Гуржи Р.Н. ФТТ, 1965, 7, 3515.
103. Пушкарров Д.И. Препринт ОИЯИ, P17-85-224, Дубна, 1985.
104. Гуревич В.Л., Эфрос А.Л. ЖЭФ, 1966, 51, 1693.
105. Михеев В.А., Майданов В.А., Михин Н.П. ФТТ, 1981, 7, 670.
106. Pushkarov Kh.I., Pushkarov D.I. Internal Rep. IC/77/I42, Triest, 1977.
107. Pushkarov Kh.I., Pushkarov D.I. Rep. Math, Phys., 1980, I7, 37.
108. Радиационно-активируемые процессы в кремнии. Б. Аскарров, М.А. Зайковская, М. Каримов и др., ФАН, Ташкент, 1977.
109. Koeler J., Phys. Rev., 1978, B18, 5333.
110. 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.
111. Конторова Т.А., Френкель Я.И. ЖЭФ, 1938, 8, 89; ЖЭФ, 1938, 8, 1340.
112. Косевич А.М. Физическая механика реальных кристаллов, "Наукова думка", Киев, 1981, с. 194.
113. Bak P., Pokrovsky V.L., Phys. Rev. Lett., 1981, 47, 958.
114. Лайерлс Р. "Квантовая теория твердых тел, Москва, ИЛ, 1956.
115. Yamable T., et al. J. Phys. C: 1979, I2, L257.
116. Su W.P. Schrieffer J.R., Heeger A.J. Phys. Rev., 1980, B22, 2099.
117. Prelovšek P., Sega I., J. Phys. C. 1981, I4, 5609.

Рукопись поступила в издательский отдел
20 марта 1987 года.

ПЕРЕЧЕНЬ
лекций, вышедших с 1974 в ОИЯИ

- Фаустов Р.Н. Связанная система частиц в квантовой электродинамике. Вып.1. ОИЯИ, Дубна, 1974.
- Синаев А.Н. Современные аппаратные системы модульной структуры, используемые при создании измерительно-вычислительных комплексов /КАМАК, ВЕКТОР/. Вып.2. ОИЯИ, 8507, Дубна, 1975.
- Волков Д.В. Кварки как следствие дуальности. Вып.3. ОИЯИ, P2-8765, Дубна, 1975.
- Пальчик М.Я., Фрадкин Е.С. Введение в теорию конформно-инвариантных квантовых полей. Вып.4. ОИЯИ, 2-8874, Дубна, 1975.
- Замори Э. Микропроцессоры. Вып.5. ОИЯИ, P10-8852, Дубна, 1975.
- Биленький С.М. Вопросы физики нейтрино высоких энергий. Вып.6. ОИЯИ, 2-9026, Дубна, 1975.
- Малкин И.А., Манько В.И. Инварианты, когерентные состояния и динамические симметрии квантовых систем. Вып.7. ОИЯИ, P2-9228, Дубна, 1975.
- Волков М.К., Первушин В.Н. Квантовая теория поля с киральным лагранжианом и физика мезонов низких энергий. Вып.8. ОИЯИ, P2-9390, Дубна, 1976.
- Басиладзе С.Г. Интегральные схемы с эмиттерной связью и их применение в наносекундной ядерной электронике. Вып.9. ОИЯИ, 13-9744, Дубна, 1976.
- Аникин С.А. и др. Перенормированные составные поля в квантовой теории поля. Вып.10. ОИЯИ, P2-10528, Дубна, 1977.
- Шляпников П.В. Множественные процессы и инклюзивные реакции. Вып.11. ОИЯИ, P2-10681, Дубна, 1977.
- Капусцик Э. Галилеева инвариантность в теории поля. Вып.12. ОИЯИ, P2-10677, Дубна, 1977.
- Бутцев В.С. Явление возбуждения высокоспиновых ядерных состояний и механизм поглощения отрицательных p -мезонов. В. 13, ОИЯИ, P15-10847, Дубна, 1977.
- Валуев Б.Н. Применение алгебры Клиффорда к решению задачи Изинга - Онсагера. Вып.14. ОИЯИ, P17-11020, Дубна, 1977.
- Капусцик Э. Нестандартные алгебры квантово-механических наблюдаемых. Вып.15. ОИЯИ, P4-11497, Дубна, 1978.

Блохинцев Д.И. Квантовая механика. Лекции по избранным вопросам. Вып.16. ОИЯИ, P2-11728, Дубна, 1978.

Шрикова Н.Ю. Начиная работать на ЭВМ CDC-6500. Вып.17. ОИЯИ, P11-11739, Дубна, 1978.

Барбашов Б.М., Нестеренко В.В. Непрерывные симметрии в теории поля. Вып.18. ОИЯИ, P2-12029, Дубна, 1978.

Некоторые проблемы физики высоких энергий /сборник/. Вып.19. ОИЯИ, P2-12080, Дубна, 1978.

Басиладзе С.Г. Электронная регистрирующая аппаратура физического эксперимента. Вып.20. ОИЯИ, P13-12151, Дубна, 1979.

Ефремов А.В., Радюшкин А.В. Партоны, жесткие процессы и квантовая хромодинамика. Вып.21. ОИЯИ, P2-12803, Дубна, 1979.

Говорков А.Б. Введение в теорию кварков. Вып.22, ОИЯИ, P2-12803, Дубна, 1979.

Говорков А.Б. Цветные кварки и глюоны. Вып.23. ОИЯИ, P2-80-6, Дубна, 1980.

Исаев П.С. Глубоконеупругое рассеяние лептонов на нуклонах. Партоновая модель нуклона. Вып.24. ОИЯИ, P2-80-325, Дубна, 1980.

Казаков Д.И., Ширков Д.В. Суммирование асимптотических рядов в квантовой теории поля. Вып.25. ОИЯИ, P2-80-462, Дубна, 1980.

Ососков Г.А. Применение методов распознавания образов в физике высоких энергий. Вып.26. ОИЯИ, P10-83-187, Дубна, 1983.

Мальшев В.А. Элементарное введение в математическую физику бесконечно-частичных систем. Вып.27. ОИЯИ, P17-83-363, Дубна, 1983.

Савушкин Л.Н., Фоменко В.Н. Введение в мезонную теорию ядерных взаимодействий и ядерных систем. Вып.28. ОИЯИ, P4-83-369, Дубна, 1983.

Биленький С.М. Осцилляции нейтрино. Вып.29. ОИЯИ, P2-83-441, Дубна, 1983.

Бужек В. Введение в метод стохастического квантования. Вып.30. ОИЯИ, P2-84-419, Дубна, 1984.

Шумовский А.С., Юкалов В.И. Фазовые состояния и переходы. Вып.31. ОИЯИ, P17-85-676, Дубна, 1985.

Владимиров А.А. Введение в квантовые интегрируемые системы. Метод R-матрицы. Вып.32. ОИЯИ, P17-85-742, Дубна, 1985.

Осипов В.А., Федянин В.К. Полиацетилен и двумерные модели квантовой теории поля. Вып. 33; ОИЯИ, P17-85-309, Дубна, 1985.

Шуян Ш. Стохастичность в динамических системах. Вып. 34, ОИЯИ, P17-86-211, Дубна, 1986.

Ефремов А.В. Введение в квантовую хромодинамику. Вып. 35, ОИЯИ, P2-86-212, Дубна, 1986.

Нестеренко В.В., Червяков А.М. Сингулярные лагранжианы. Классическая динамика и квантование. Вып. 36, ОИЯИ, P2-86-323, Дубна, 1986.

Пепельшев Ю.Н. Регистрация нейтронов /современное состояние и перспективы развития/ Вып. 37, ОИЯИ, P13-86-719, Дубна, 1986.

Боголюбов Н.Н./мл./, Шумовский А.С. Светозлучение. Вып. 38, ОИЯИ, P17-87-176, Дубна, 1987.

Пушкарров Д.И. Дефектоны в кристаллах. /Метод квазичастиц в квантовой теории дефектов/. Вып. 39, ОИЯИ, P17-87-177, Дубна, 1987.

Требования, предъявляемые к серии брошюр
"Лекции для молодых ученых ОИЯИ"

Серия брошюр "Лекции для молодых ученых ОИЯИ" издаётся с целью повышения научно-профессионального кругозора и уровня молодых ученых и специалистов ОИЯИ в актуальных областях исследований, ведущихся по тематике Института. Выпуски должны представлять собой законченные циклы лекций, прочитанные в ОИЯИ и ориентированные прежде всего на молодых сотрудников Института.

Лекции должны иметь характер учебного пособия, предназначенного для первого ознакомления с рассматриваемой проблемой, а также содержать обзор её современного состояния. Они должны быть снабжены подробным оглавлением и основной литературой. Большие параграфы рекомендуется разбивать на подпараграфы с вынесенными в оглавление подзаголовками.

Весь текст, включая отдельные главы и параграфы, следует печатать, заполняя каждую страницу целиком.

Рукопись должна быть напечатана на специальных бланках, предназначенных для прямого репродуцирования, которые можно получить в издательском отделе. Все формулы и схемы должны быть вписаны аккуратно и ясно тушью или чернилами черного цвета. Разметка формул не производится, их нумерация должна находиться в конце строки справа в круглых скобках. Текст лекций печатается на машинке с черной (не серой) лентой через 1,5 интервала. Объём лекций не должен превышать 100 страниц машинописного текста.

Рукопись представляется в Редакционный совет серии брошюр "Лекции для молодых ученых ОИЯИ" Советом молодых ученых и специалистов ОИЯИ и Советами молодых ученых и специалистов лабораторий Института. Редакционный совет принимает окончательное решение о целесообразности ее публикации.

Редакционный совет