

ЗАВИСИМОСТЬ ФОНОННОГО СПЕКТРА МЕТАЛЛА ОТ ЭЛЕКТРОННОЙ ТЕМПЕРАТУРЫ В НЕРАВНОВЕСНОЙ ЭЛЕКТРОН-ФОНОННОЙ СИСТЕМЕ

*Д. М. Медведев**

*Московский физико-технический институт
141700, Долгопрудный, Московская обл., Россия*

Ю. В. Петров†

*Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау Российской академии наук
142432, Черноголовка, Московская обл., Россия*

Поступила в редакцию 7 июля 1998 г.

Исследована зависимость фононного спектра кристалла и связанных с ним термодинамических функций от температуры электронов в отсутствие равновесия между электронами и решеткой. Рассмотрение проведено в рамках томас-фермиевского приближения для объемно-центрированного кубического кристалла при высоких давлениях.

1. ВВЕДЕНИЕ

Характерной особенностью современных экспериментов по взаимодействию лазерного излучения с твердыми телами при ультракоротких лазерных импульсах является нарушение равновесия между электронной и ионной подсистемами твердого тела [1–4]. Температура поглощающих излучение электронов может на несколько порядков превосходить температуру решетки, так как длительность импульса ($\sim 10^{-14}$ – 10^{-13} с) и время термализации электронной подсистемы ($\sim 10^{-15}$ – 10^{-14} с) много меньше характерного времени обмена энергией между электронами и решеткой ($\sim 10^{-11}$ с) [5, 6]. При этом возникает вопрос о влиянии такой высокой электронной температуры на фононный спектр твердого тела [7, 8]. В работах [9–11] исследовано поведение упругих постоянных кристаллов с щелью в спектре электронных возбуждений, а именно, имеющих решетку типа алмаза C, Si, Ge в зависимости от концентрации возбужденных в зону проводимости электронов. Получено сильное смягчение спектра поперечных акустических фононов с увеличением концентрации электронно-дырочной плазмы. При этом наличие щели в спектре электронных возбуждений, особенно такой большой, как у углерода, приводит к тому, что увеличение вложенной в кристалл энергии сопровождается ростом числа возбужденных электронов без существенного изменения их температуры. В противоположность этому, в металлах, где щель в спектре отсутствует, увеличение интенсивности лазерного импульса приводит к сильному повышению электронной температуры при низкой температуре фононной подсистемы. Мы будем рассматривать зависимость фононных характеристик металлов от температуры электронов T_e , предполагая,

* Адрес в настоящее время: Department of Chemistry, University of California, Davis, California 95616, USA.

† E-mail: petrov@landau.ac.ru

что малое ($\sim 10^{-15}$ – 10^{-14} с при нормальных условиях) время термализации электронов позволяет рассматривать их подсистему как квазиравновесную с этой температурой.

В рамках адиабатического приближения потенциальной энергией для ионов является электронная энергия E_e , зависящая от координат ионов $\{\mathbf{R}(\mathbf{l})\}$ как от параметров (в E_e входит и прямое кулоновское взаимодействие ионов). Уравнение движения иона массы M , находящегося в равновесном положении в узле l решетки с радиус-вектором $\mathbf{R}^0(\mathbf{l})$, можно записать в виде

$$M\ddot{\mathbf{R}}(\mathbf{l}) = -\frac{\overline{\partial E_e}}{\partial \mathbf{R}(\mathbf{l})}. \quad (1)$$

Здесь $\mathbf{R}(\mathbf{l})$ — радиус-вектор иона, смещенного в результате колебаний. Черта означает термодинамическое усреднение по электронному состоянию. Согласно [12],

$$\frac{\overline{\partial E_e}}{\partial \mathbf{R}(\mathbf{l})} = \left(\frac{\partial F_e}{\partial \mathbf{R}(\mathbf{l})} \right)_{T_e, V}, \quad (2)$$

поэтому уравнение движения иона может быть записано в виде

$$M\ddot{\mathbf{R}}(\mathbf{l}) = -\frac{\partial F_e}{\partial \mathbf{R}(\mathbf{l})}(T_e, V), \quad (3)$$

т. е. потенциальной энергией для ионов при заданном объеме кристалла V и заданной температуре электронной подсистемы T_e является свободная энергия $F_e(T_e, V)$ электронов.

2. СВОБОДНАЯ ЭНЕРГИЯ КРИСТАЛЛА ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ

Рассмотрим динамику решетки сжатого кристалла, в соответствии с чем возьмем свободную энергию электронов в томас-фермиевском приближении. Следуя [13], напишем энергию электронов (в атомных единицах) в ячейке фазового пространства в точке с координатой \mathbf{r}_j в виде

$$\epsilon_e(\mathbf{r}_j) = \sum_{\mathbf{p}, \sigma} n(\mathbf{r}_j, \mathbf{p}, \sigma) [\epsilon(\mathbf{p}) - \varphi(\mathbf{r}_j)], \quad (4)$$

где числа заполнения состояний с импульсом \mathbf{p} , кинетической энергией $\epsilon(\mathbf{p})$ и проекцией спина σ , обозначенные $n(\mathbf{r}_j, \mathbf{p}, \sigma)$, для электронов равны нулю или единице; $\varphi(\mathbf{r}_j)$ — электростатический потенциал в точке \mathbf{r}_j . Полная энергия $N_e = NZ$ электронов (N — число атомов, Z — их атомный номер) равняется

$$E_e = \sum_j \epsilon_e(\mathbf{r}_j) - U_{ee} + U_{ii}. \quad (5)$$

Здесь мы учли, что при сложении $\epsilon(\mathbf{r}_j)$ энергия электрон-электронного взаимодействия U_{ee} учитывается дважды, и добавили прямое кулоновское взаимодействие ядер U_{ii} . Выражение для статистической суммы электронной системы имеет вид

$$Q_e = \sum_{\{n\}} \exp\left(-\frac{E_e}{T_e}\right) = \sum_{\{n\}} \exp\left\{\frac{1}{T_e} \left[U_{ee} - U_{ii} - \mu N_e - \sum_{j,\mathbf{p},\sigma} n(\mathbf{r}_j, \mathbf{p}, \sigma) (\epsilon(\mathbf{p}) - \varphi(\mathbf{r}_j) - \mu) \right]\right\}, \quad (6)$$

где μ — химический потенциал, учитывающий электростатические взаимодействия. В приближении Томаса—Ферми он связан с химическим потенциалом свободного неоднородно распределенного электронного газа, $\mu_0(\mathbf{r})$, соотношением

$$\mu = \mu_0(\mathbf{r}) - \varphi(\mathbf{r}). \quad (7)$$

Суммирование в (6) ведется по всем электронным числам заполнения. Считая их, как и в [13], независимыми и полагая, что величина U_{ee} определяется только термодинамически равновесной (для электронной подсистемы) концентрацией электронов, получаем статистическую сумму в виде

$$Q_e = \exp\left(\frac{U_{ee} - U_{ii} - \mu N_e}{T_e}\right) \prod_{j,\mathbf{p},\sigma} \left[1 + \exp\left(\frac{\mu_0(\mathbf{r}_j) - \epsilon(\mathbf{p})}{T_e}\right)\right]. \quad (8)$$

Тогда из (8) получаем электронную свободную энергию:

$$F_e = -T_e \ln Q_e = \int \mu_0(\mathbf{r})n(\mathbf{r})d\mathbf{r} - \int \varphi(\mathbf{r})n(\mathbf{r})d\mathbf{r} - U_{ee} + U_{ii} + \Omega_0. \quad (9)$$

Здесь термодинамический потенциал Ω_0 неоднородного распределения невзаимодействующих электронов с концентрацией $n(\mathbf{r})$ равен

$$\Omega_0 = -T_e \ln \prod_{j,\mathbf{p},\sigma} \left[1 + \exp\left(\frac{\mu_0(\mathbf{r}_j) - \epsilon(\mathbf{p})}{T_e}\right)\right]. \quad (10)$$

Обозначив через $\varphi_i(\mathbf{r})$ и $\varphi_e(\mathbf{r})$ потенциалы, создаваемые в точке \mathbf{r} ионами и электронами, напишем свободную энергию электронов в виде

$$F_e = \Phi_0 - \int \varphi_e(\mathbf{r})n(\mathbf{r})d\mathbf{r} - \int \varphi_i(\mathbf{r})n(\mathbf{r})d\mathbf{r} - U_{ee} + U_{ii} + \Omega_0 = F_0 + U_{ei} + U_{ee} + U_{ii}. \quad (11)$$

Здесь U_{ei} и U_{ee} — соответственно энергии электрон-ионного и электрон-электронного взаимодействий, Φ_0 и $F_0 = \Phi_0 + \Omega_0$ — термодинамический потенциал Гиббса и свободная энергия неоднородного распределения невзаимодействующих электронов:

$$\Phi_0 = \int \mu_0(\mathbf{r})n(\mathbf{r})d\mathbf{r}. \quad (12)$$

Переходя от суммирования по j и \mathbf{p} к интегрированию по \mathbf{r} и \mathbf{p} , для F_0 получаем

$$F_0 = \int f_0(\mathbf{r})d\mathbf{r}, \quad (13)$$

где

$$f_0(\mathbf{r}) = \frac{\sqrt{2}}{\pi^2} T_e^{5/2} \left[\xi I_{1/2}(\xi) - \frac{2}{3} I_{3/2}(\xi) \right]. \quad (14)$$

Здесь $\xi(\mathbf{r}) = \mu_0(\mathbf{r})/T_e$, а $I_s(\xi)$ — фермиевский интеграл:

$$I_s(\xi) = \int_0^\infty \frac{x^s dx}{e^{x-\xi} + 1}. \tag{15}$$

Таким образом, получаем свободную энергию электронно-ядерной системы при фиксированных положениях ядер $\{\mathbf{R}(\mathbf{l})\}$ в виде функционала от концентрации электронов при заданных удельном объеме на один атом, v , и электронной температуре T_e , который параметрически зависит от $\{\mathbf{R}(\mathbf{l})\}$:

$$F_e = \int f_0(\mathbf{r}) d\mathbf{r} - Z \sum_{\mathbf{l}} \int \frac{n(\mathbf{r})}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}(\mathbf{l})|} d\mathbf{r} + \frac{1}{2} \iint \frac{n(\mathbf{r})n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r} d\mathbf{r}' + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{l}, \mathbf{l}'} \frac{Z^2}{|\mathbf{R}(\mathbf{l}) - \mathbf{R}(\mathbf{l}')|}. \tag{16}$$

При этом $\xi(\mathbf{r})$ определяется из условия

$$n(\mathbf{r}) = \frac{\sqrt{2}}{\pi^2} T_e^{3/2} I_{1/2}(\xi), \tag{17}$$

разрешая которое относительно ξ , получаем

$$\xi(\mathbf{r}) = I_{1/2}^{-1} \left(\frac{\pi^2}{\sqrt{2}} \frac{n(\mathbf{r})}{T_e^{3/2}} \right). \tag{18}$$

Здесь $I_s^{-1}(x)$ — функция, обратная $I_s(x)$, так что $I_s(I_s^{-1}(x)) = x$. Будем искать электронную концентрацию $n(\mathbf{r})$ вариационным образом в виде

$$n(\mathbf{r}, \{\mathbf{R}(\mathbf{l})\}) = \sum_{\mathbf{l}} Z \frac{\gamma^3}{\pi^{3/2}} \exp[-\gamma^2(\mathbf{r} - \mathbf{R}(\mathbf{l}))^2] \tag{19}$$

с вариационным параметром γ , который определим из условия минимума функционала (16) при равновесных положениях ядер $\{\mathbf{R}^0(\mathbf{l})\}$, который обозначим F_e^0 . Выражение (19) должным образом нормировано,

$$\int n(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = NZ, \tag{20}$$

и учитывает в явном виде экранирование заряда ядер, что обеспечивает правильное акустическое поведение в длинноволновом пределе фоновых частот выбираемого нами в качестве фазы высокого давления объемно-центрированного (ОЦК) кристалла.

В рассматриваемом нами приближении удобно ввести приведенные величины \bar{r} для координат соотношением $r = \bar{r}Z^{-1/3}$, концентрации электронов \bar{n} ($n = \bar{n}Z^2$) и электронной температуры \bar{T}_e ($T_e = \bar{T}_e Z^{4/3}$). Тогда (16) принимает вид

$$F_e = Z^{7/3} \bar{F}_e, \tag{21}$$

где приведенная свободная энергия, параметрически зависящая от приведенных координат ядер, равна

$$\begin{aligned} \bar{F}_e = & \int \bar{f}_0(\bar{r}) d\bar{r} - \sum_l \int \frac{\bar{n}(\bar{r}) d\bar{r}}{|\bar{r} - \bar{R}(l)|} + \\ & + \frac{1}{2} \iint \frac{\bar{n}(\bar{r}) \bar{n}(\bar{r}')}{|\bar{r} - \bar{r}'|} d\bar{r} d\bar{r}' + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{R}} \frac{1}{|\bar{R}(l) - \bar{R}(l')|}. \end{aligned} \quad (22)$$

Здесь

$$\bar{f}_0(\bar{r}) = \frac{\sqrt{2}}{\pi^2} T_e^{5/2} \left[\bar{\xi} I_{1/2}(\bar{\xi}) - \frac{2}{3} I_{3/2}(\bar{\xi}) \right], \quad (23)$$

а $\bar{\xi}$ определяется из соотношения

$$\bar{\xi}(\bar{r}) = I_{1/2}^{-1} \left(\frac{\pi^2}{\sqrt{2}} \frac{\bar{n}(\bar{r})}{T_e^{3/2}} \right). \quad (24)$$

При этом

$$\bar{n}(\bar{r}) = \frac{\bar{\gamma}^3}{\pi^{3/2}} \sum_l \exp \left\{ -\bar{\gamma}^2 [\bar{r} - \bar{R}(l)]^2 \right\} \quad (25)$$

с приведенным параметром $\bar{\gamma}$, определяемым соотношением $\gamma = \bar{\gamma} Z^{1/3}$.

Для каждого значения приведенной электронной температуры \bar{T}_e и приведенного удельного объема \bar{v} ($v = \bar{v} Z^{-1}$) мы можем найти значение $\bar{\gamma}$, обеспечивающее минимум функционала \bar{F}_e^0 , получаемого из (22) при равновесных положениях ядер выбранной нами ОЦК решетки. В расчете на один атом выражение для \bar{F}_e^0 может быть записано в виде

$$\begin{aligned} \bar{F}_e^0 = & \frac{\bar{v} \bar{T}_e^{5/2}}{\pi^2} \int_0^1 \int_0^1 \int_0^1 \left[\bar{\xi} I_{1/2}(\bar{\xi}) - \frac{2}{3} I_{3/2}(\bar{\xi}) \right] d\zeta_1 d\zeta_2 d\zeta_3 + \\ & + \frac{1}{2^{1/3} \bar{v}} \left[\sum_l \frac{2 \operatorname{erfc}(q(l)) - \operatorname{erfc}(q(l)/\sqrt{2})}{l} - \frac{2\lambda}{\sqrt{\pi}} \left(1 - \frac{1}{2\sqrt{2}} \right) \right]. \end{aligned} \quad (26)$$

В выражении (26)

$$\operatorname{erfc}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_z^\infty \exp(-x^2) dx, \quad (27)$$

а при вычислении $\bar{\xi}$ из (24) приведенная электронная концентрация берется в виде

$$\bar{n}(\zeta_1, \zeta_2, \zeta_3) = \frac{\lambda^3}{2\pi^{3/2} \bar{v}} \sum_l \exp \left\{ -\frac{\lambda^2}{4} [3(t_1^2 + t_2^2 + t_3^2) - 2(t_1 t_2 + t_1 t_3 + t_2 t_3)] \right\}, \quad (28)$$

где $t_i = \zeta_i - l_i$ ($i = 1, 2, 3$), а l_i — целые компоненты вектора $\mathbf{R}^0(l)$ в базисе $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ ОЦК решетки с ребром кубической элементарной ячейки a :

$$\mathbf{R}^0(l) = \sum_{i=1}^3 l_i \mathbf{a}_i, \quad (29)$$

$$\mathbf{a}_1 = \frac{a}{2}(-1, 1, 1), \tag{30}$$

$$\mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}(1, -1, 1), \tag{31}$$

$$\mathbf{a}_3 = \frac{a}{2}(1, 1, -1). \tag{32}$$

В (26) $\bar{v} = \bar{a}^3/2$, где $\bar{a} = aZ^{1/3}$, и вместо $\bar{\gamma}$ введен другой (безразмерный) вариационный параметр $\lambda = \bar{\gamma}\bar{a}$;

$$l = \sqrt{3(l_1^2 + l_2^2 + l_3^2) - 2(l_1l_2 + l_1l_3 + l_2l_3)}, \tag{33}$$

$$q(l) = \lambda l/2. \tag{34}$$

Выражение (26) определяет приведенную статическую свободную энергию ОЦК кристалла при заданных значениях приведенных удельного объема \bar{v} и температуры электронов \bar{T}_e . Статическая свободная энергия кристалла из атомов с атомным номером Z при удельном объеме v и электронной температуре T_e может быть найдена из скейлингового соотношения

$$F^0(T, v) = Z^{7/3} \bar{F}_e^0(\bar{T}, \bar{v}) = Z^{7/3} \bar{F}_e^0(Z^{-4/3} T_e, Zv). \tag{35}$$

3. ДИНАМИКА РЕШЕТКИ

При рассмотрении динамики решетки разложим электронную свободную энергию (16) по степеням отклонения ионов от их положения в идеальной ОЦК решетке, $\mathbf{u}(\mathbf{l}) = \mathbf{R}(\mathbf{l}) - \mathbf{R}^0(\mathbf{l})$, ограничиваясь квадратичными членами. Возникающая при этом матрица силовых постоянных $B_{\alpha\beta}(\mathbf{l})$ ($\alpha, \beta = 1, 2, 3$) выражается через соответствующую приведенную матрицу $\bar{B}_{\alpha\beta}(\mathbf{l})$ скейлинговым равенством

$$B_{\alpha\beta}(\mathbf{l}) = Z^3 \bar{B}_{\alpha\beta}(\mathbf{l}). \tag{36}$$

Здесь матрица приведенных силовых констант есть

$$\bar{B}_{\alpha\beta}(\mathbf{l}) = \left. \frac{\partial^2 \bar{F}_e}{\partial \bar{R}_\alpha(0) \partial \bar{R}_\beta(\mathbf{l})} \right|_{\{\mathbf{R}^0(\mathbf{l})\}} \tag{37}$$

и может быть представлена в виде

$$\bar{B}_{\alpha\beta}(\mathbf{l}) = \bar{B}_{\alpha\beta}^k(\mathbf{l}) + \bar{B}_{\alpha\beta}^p(\mathbf{l}), \tag{38}$$

где

$$\begin{aligned} \bar{B}_{\alpha\beta}^k(\mathbf{l}) = & \frac{\lambda^5}{2^{5/3} \pi \bar{v}^{5/3} \bar{T}_e^{1/2}} \exp\left(-\frac{q^2(l)}{2}\right) \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\rho_1^2) d\rho_1 \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\rho_2^2) d\rho_2 \times \\ & \times \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\rho_3^2) \left(\rho_\alpha + \frac{\lambda}{2\sqrt{2}} w_\alpha(\mathbf{l})\right) \left(\rho_\beta - \frac{\lambda}{2\sqrt{2}} w_\beta(\mathbf{l})\right) \frac{d\rho_3}{I_{-1/2}(\xi(\bar{\mathbf{r}}))}. \end{aligned} \tag{39}$$

В выражении (39)

$$\rho = \gamma\sqrt{2} \left[\mathbf{r} - \frac{\mathbf{R}^0(\mathbf{l})}{2} \right], \quad (40)$$

$$w_1(\mathbf{l}) = -l_1 + l_2 + l_3, \quad (41)$$

$$w_2(\mathbf{l}) = l_1 - l_2 + l_3, \quad (42)$$

$$w_3(\mathbf{l}) = l_1 + l_2 - l_3. \quad (43)$$

Второе слагаемое в (38) может быть представлено в виде

$$\begin{aligned} \bar{B}_{\alpha\beta}^p(\mathbf{l}) = & \frac{\lambda^3}{2\bar{v}} \left\{ n_\alpha n_\beta \left[\frac{G_2(q(\mathbf{l})/\sqrt{2}) - 4G_2(q(\mathbf{l}))}{2q(\mathbf{l})} - \right. \right. \\ & - \frac{3 \left[G_1(q(\mathbf{l})/\sqrt{2}) - 2\sqrt{2}G_1(q(\mathbf{l})) \right]}{\sqrt{2}q^2(\mathbf{l})} + \frac{3 \left[\operatorname{erfc}(q(\mathbf{l})/\sqrt{2}) - 2\operatorname{erfc}(q(\mathbf{l})) \right]}{q^3(\mathbf{l})} \left. \right] + \\ & + \delta_{\alpha\beta} \left[\frac{G_1(q(\mathbf{l})/\sqrt{2}) - 2\sqrt{2}G_1(q(\mathbf{l}))}{\sqrt{2}q^2(\mathbf{l})} - \frac{\operatorname{erfc}(q(\mathbf{l})/\sqrt{2}) - 2\operatorname{erfc}(q(\mathbf{l}))}{q^3(\mathbf{l})} \right] \left. \right\}. \quad (44) \end{aligned}$$

Здесь

$$G_1(z) = \frac{d}{dz} \operatorname{erfc}(z) = -\frac{2}{\sqrt{\pi}} \exp(-z^2), \quad (45)$$

$$G_2(z) = \frac{d^2}{dz^2} \operatorname{erfc}(z) = \frac{4}{\sqrt{\pi}} z \exp(-z^2), \quad (46)$$

\mathbf{n} — единичный вектор:

$$\mathbf{n} = (n_1, n_2, n_3) = \mathbf{R}^0(\mathbf{l})/R^0(\mathbf{l}). \quad (47)$$

По приведенной матрице силовых постоянных (38) определим приведенную динамическую матрицу:

$$\bar{D}_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = \frac{1}{M_0} \sum_{\mathbf{l}} \bar{B}_{\alpha\beta}(\mathbf{l}) \exp[i\mathbf{k}\bar{\mathbf{R}}^0(\mathbf{l})], \quad (48)$$

которая позволяет найти приведенные фононные частоты в зависимости от приведенного волнового вектора \mathbf{k} из характеристического уравнения

$$\det [\bar{D}_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) - \bar{\omega}_s^2(\mathbf{k}) \delta_{\alpha\beta}] = 0. \quad (49)$$

В выражении (48) M_0 — атомная единица массы, $M_0 = 1823$. Фононный спектр $\omega_s(\mathbf{k})$ ($s = 1, 2, 3$) монокристалла, состоящего из атомов с порядковым номером Z и массовым числом A , в зависимости от электронной температуры и удельного

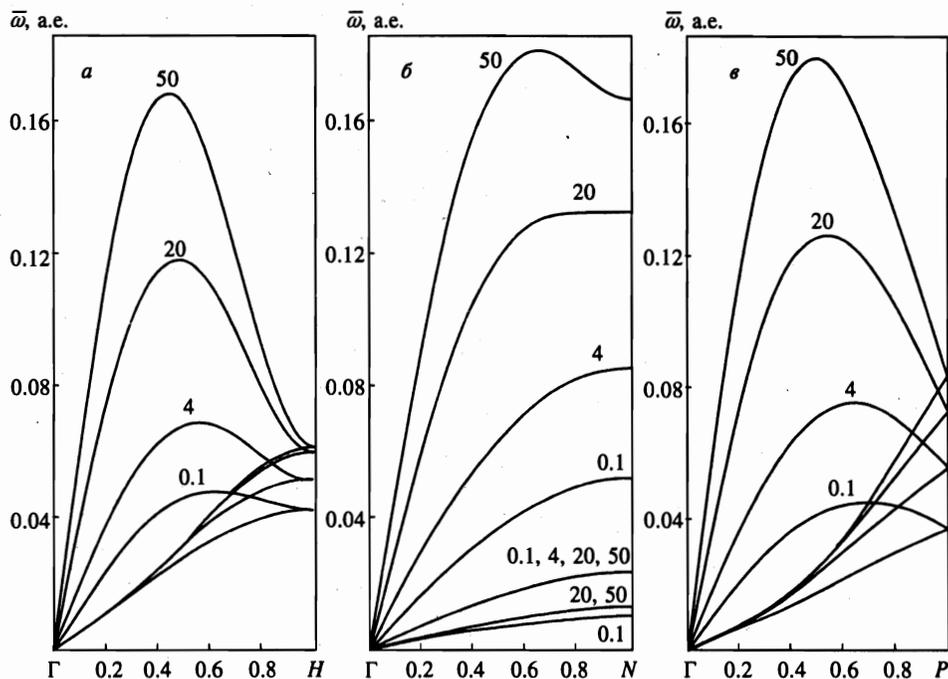


Рис. 1. Приведенные фоновые частоты $\bar{\omega}$ ОЦК кристалла с параметром решетки $\bar{a} = 1.6$ в направлениях *a* — ΓH ([100]); *б* — ΓN ([110]); *в* — ΓP ([111]) при различных значениях приведенной температуры электронов \bar{T}_e , которые указаны (в атомных единицах) около кривых. Фоновые частоты кристалла с заданными Z и A находятся из значений $\bar{\omega}$ с помощью скейлинговых соотношений (50) и (51)

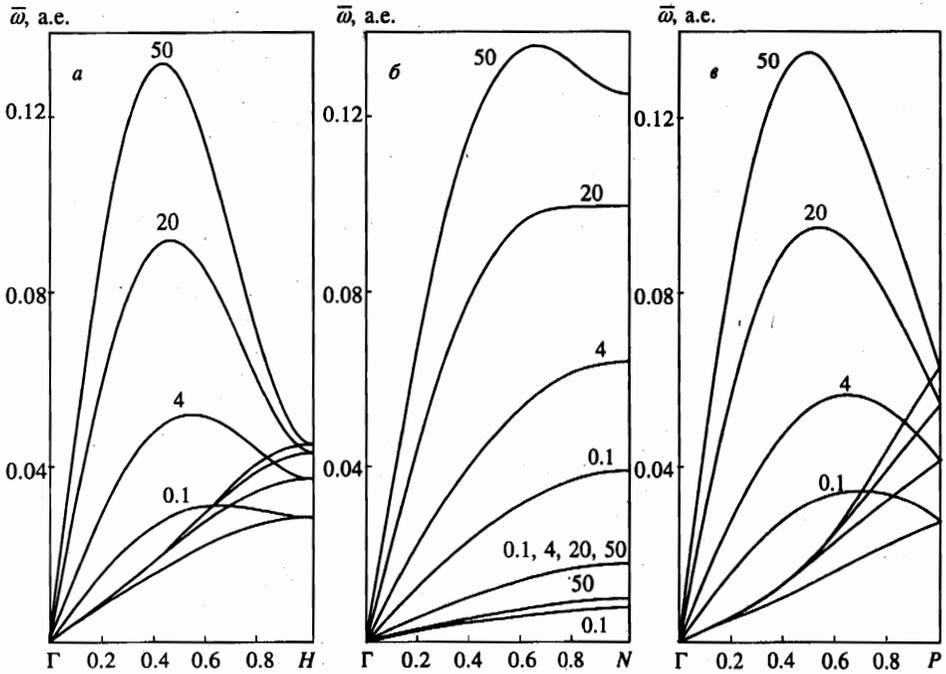
объема может быть затем найден из универсальной зависимости $\bar{\omega}_s(\bar{T}_e, \bar{v}, \bar{\mathbf{k}})$ посредством скейлинга:

$$\omega_s(T_e, v, \mathbf{k}) = Z^{3/2} A^{-1/2} \bar{\omega}_s(\bar{T}_e, \bar{v}, \bar{\mathbf{k}}) = Z^{3/2} A^{-1/2} \bar{\omega}_s(Z^{-4/3} T_e, Zv, Z^{-1/3} \mathbf{k}). \quad (50)$$

Для не слишком тяжелых элементов стабильные по отношению к β -распаду изотопы имеют $A \approx 2Z$. В этом случае получаем скейлинговое соотношение для частот, зависящее только от одного параметра Z :

$$\omega_s(T_e, v, \mathbf{k}) = \frac{Z}{\sqrt{2}} \bar{\omega}_s(\bar{T}_e, \bar{v}, \bar{\mathbf{k}}) = \frac{Z}{\sqrt{2}} \bar{\omega}_s(Z^{-4/3} T_e, Zv, Z^{-1/3} \mathbf{k}). \quad (51)$$

Универсальные кривые приведенного фононного спектра ОЦК решетки для направлений высокой симметрии в зоне Бриллюэна ΓP , ΓN , ΓH для различных значений приведенных удельного объема и температуры электронов представлены на рис. 1 и 2. Приведенная постоянная решетки $\bar{a} = 1.6$ для рис. 1 и $\bar{a} = 2.0$ для рис. 2. Приведенная электронная температура указана около кривых на рис. 1, 2 и составляет 0.1, 4, 20 и 50 а.е.. Частоты фононов кристаллов с заданными Z и A получаются из кривых на рис. 1, 2 с помощью уравнения (50) или, для не слишком тяжелых элементов, (51). Увеличение электронной температуры приводит к росту фоновых частот для всех

Рис. 2. То же, что на рис. 1 для $\bar{\alpha} = 2.0$

направлений в зоне Бриллюэна. Анализ приведенного фононного спектра показывает, что при изменении приведенной электронной температуры в исследованном широком интервале от 0.1 до 50 а.е. наибольшее изменение испытывают самые жесткие из фононных мод, являющиеся продольными. Для направления ΓH максимум спектра увеличивается более чем в три раза. В то же время более мягкие поперечные моды фононного спектра при существенном изменении температуры электронов меняются не столь значительно, особенно в длинноволновой области. При увеличении удельного объема относительное изменение фононных частот при одной и той же электронной температуре растет.

4. ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ ФУНКЦИИ ФОНОННОГО СПЕКТРА

Полученный из решения уравнения (49) приведенный фононный спектр позволяет вычислять термодинамические функции, связанные с колебаниями решетки, в зависимости от удельного объема кристалла и температуры решетки $T_i \neq T_e$. К таким функциям относится изохорная теплоемкость $c_V = (T_i \partial s / \partial T_i)_{T_e, v}$. В расчете на один атом

$$c_V = \sum_s \int_{BZ} \left[\frac{\omega_s(\mathbf{k})}{T_i} \right]^2 \frac{\exp[\omega_s(\mathbf{k})/T_i]}{\{\exp[\omega_s(\mathbf{k})/T_i] - 1\}^2} \frac{v d^3 k}{(2\pi)^3}. \quad (52)$$

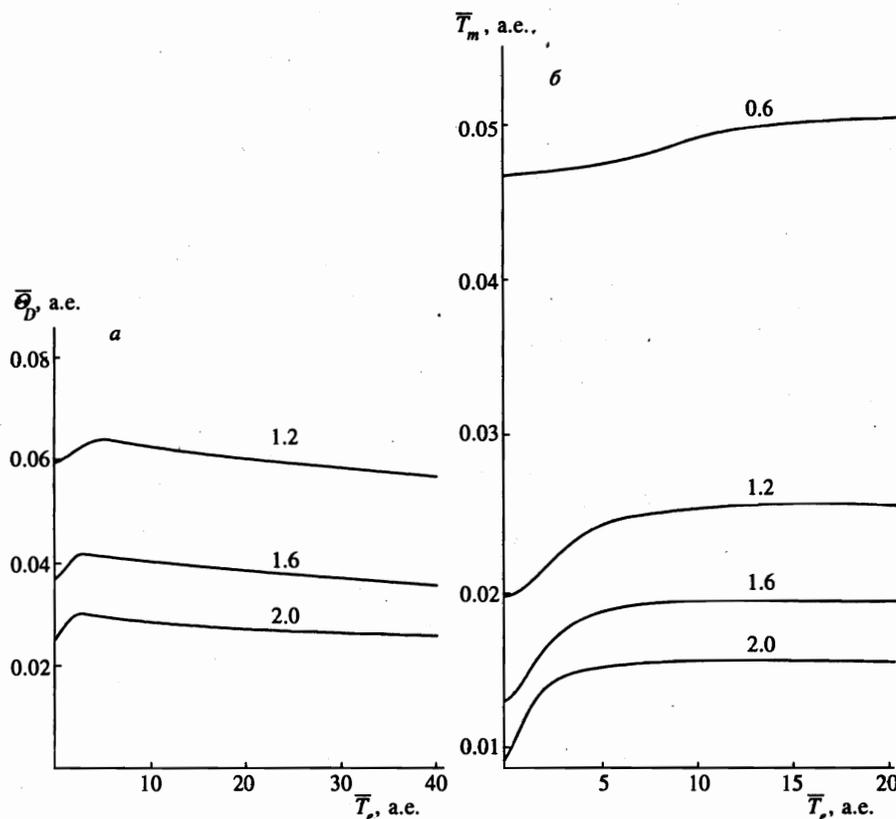


Рис. 3. Приведенные дебаевская температура $\bar{\Theta}_D$ (а) и температура плавления \bar{T}_m (б) ОЦК кристалла в зависимости от приведенной температуры электронов для различных значений приведенной постоянной решетки \bar{a} (указаны у кривых). Температуры Дебая и плавления кристалла с заданными Z и A находятся из соответствующих величин посредством соотношений (55) и (61)

Интегрирование в (52) ведется по зоне Бриллюэна. В низкотемпературном по T_i пределе

$$c_V = \frac{\pi v}{30} T_i^3 \sum_s \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \frac{\sin \theta d\theta}{c_s^3(\theta, \varphi)}, \quad (53)$$

где θ, φ — углы в сферической системе координат для вектора \mathbf{k} , а скорость звука $c_s(\theta, \varphi)$ для длинных волн равняется

$$c_s(\theta, \varphi) = \frac{\omega_s(\mathbf{k})}{k} = \frac{\omega_s(k, \theta, \varphi)}{k}. \quad (54)$$

Выражение (53) позволяет найти определяемую по низкотемпературной теплоемкости температуру Дебая $\Theta_D(T_e, v)$. Она подчиняется скейлинговому соотношению

$$\Theta_D(T_e, v) = Z^{3/2} A^{-1/2} \bar{\Theta}_D(\bar{T}_e, \bar{v}) = Z^{3/2} A^{-1/2} \bar{\Theta}_D(Z^{-4/3} T_e, Zv) \quad (55)$$

с приведенной дебаевской температурой

$$\bar{\Theta}_D(\bar{T}_e, \bar{v}) = 2 \cdot 3^{2/3} \pi \left(\bar{v} \sum_s \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \frac{\sin \theta d\theta}{\bar{c}_s^3(\theta, \varphi)} \right)^{-1/3} \quad (56)$$

Приведенная дебаевская температура в зависимости от приведенной электронной температуры для значений приведенной постоянной решетки $\bar{a} = 1.2, 1.6, 2.0$ показана на рис. 3а. Величина $\bar{\Theta}_D(\bar{T}_e, \bar{v})$ определяется интегрированием по зоне Бриллюэна фононной теплоемкости, низкотемпературной по T_i и пропорциональной T_i^3 . Во всем рассмотренном интервале изменения \bar{T}_e изменение величины $\bar{\Theta}_D$ не превышает 30%, т. е. зависимость дебаевской температуры от температуры электронов в широком интервале \bar{T}_e является слабой. Это объясняется тем, что при таком определении дебаевской температуры наиболее сильно растущие с электронной температурой фононные моды вносят в нее наименьший вклад. В соответствии с большим изменением спектра при больших значениях постоянной решетки изменение дебаевской температуры более существенно при больших \bar{a} . Как функция электронной температуры приведенная температура Дебая $\bar{\Theta}_D$ имеет максимум, смещающийся в сторону больших температур при уменьшении постоянной решетки, т. е. при увеличении энергии Ферми. Поскольку при таком определении дебаевской температуры наиболее жесткие ветви фононных частот при увеличении температуры электронов \bar{T}_e дают малый вклад в $\bar{\Theta}_D$, энергия нулевых колебаний, в основном определяемая как раз наиболее жесткими модами, а в дебаевском приближении равная для ОЦК кристалла $9\bar{\Theta}_D/8$ в расчете на один атом, плохо описывается с ростом электронной температуры приближением Дебая. Это же касается и давления нулевых колебаний.

По полученному фононному спектру определим зависимость температуры плавления кристалла от электронной температуры (напомним, что речь идет о ситуации, когда между электронной подсистемой и решеткой нет равновесия и их температуры T_e и T_i могут существенно различаться). Введя радиус R_s сферы с объемом, равным удельному объему на атом v , так что

$$\frac{4}{3} \pi R_s^3 = v = \frac{a^3}{2},$$

определим относительное среднеквадратичное смещение ядер от их положения в идеальной решетке:

$$\zeta = \langle u^2 \rangle / R_s^2. \quad (57)$$

Здесь среднеквадратичное смещение $\langle u^2 \rangle$ находится интегрированием по зоне Бриллюэна:

$$\langle u^2 \rangle = \sum_s \int_{BZ} \frac{1}{M\omega_s(\mathbf{k})} \left\{ \frac{1}{\exp[\omega_s(\mathbf{k})/T_i] - 1} + \frac{1}{2} \right\} \frac{vd^3k}{(2\pi)^3}. \quad (58)$$

При больших значениях T_i вблизи температуры плавления T_m выражение (58) можно записать в виде

$$\langle u^2 \rangle = \sum_s \int_{BZ} \frac{T_i}{M\omega_s^2(\mathbf{k})} \frac{vd^3k}{(2\pi)^3}. \quad (59)$$

Учитывая скейлинговое равенство (50), получаем

$$M\omega_s^2(\mathbf{k}) = Z^3 M_0 \bar{\omega}_s^2(\bar{\mathbf{k}}). \quad (60)$$

Температуру плавления T_m , согласно критерию Линдемана, определим по критическому значению среднеквадратичного смещения ζ_m , которое мы, следуя [14], выберем равным $\zeta_m = 0.076$. Это дает для температуры плавления

$$T_m(T_e, v) = Z^{7/3} \bar{T}_m(\bar{T}_e, \bar{v}) = Z^{7/3} \bar{T}_m \left(Z^{-4/3} T_e, Zv \right), \quad (61)$$

где приведенная температура плавления \bar{T}_m равняется

$$\bar{T}_m(\bar{T}_e, \bar{v}) = \zeta_m \left(\frac{3\bar{v}}{4\pi} \right)^{2/3} \left[\sum_s \int_{BZ} \frac{\bar{v} d^3 \bar{k}}{(2\pi)^3 M_0 \bar{\omega}_s^2(\bar{k})} \right]^{-1}. \quad (62)$$

Изменение приведенной температуры плавления кристалла с ростом \bar{T}_e в рассмотренном широком интервале изменения \bar{T}_e приведено на рис. 3б. Как и для дебаевской температуры, это изменение оказывается довольно малым, не превышая 40% в рассмотренном диапазоне удельного объема. В выражении (62), как и в (54), фоновые ветви, частоты которых наиболее сильно растут с увеличением электронной температуры, дают наименьший вклад в интеграл по зоне Бриллюэна, в то время как более мягкие моды, дающие основной вклад в этот интеграл, как следует из фоновых спектров на рис. 1, 2, слабо зависят от температуры электронной подсистемы. Это определяет общее не такое значительное, как для жестких ветвей фононного спектра, изменение температуры плавления решетки при увеличении электронной температуры. Таким образом, значительное повышение электронной температуры, на несколько порядков отличающейся от температуры решетки, вызывает повышение фононных частот металла, причем в первую очередь наиболее жестких мод спектра. В то же время связанные с фононным спектром термодинамические характеристики, такие как дебаевская температура и температура плавления, существенно меньше меняются при изменении электронной температуры.

Работа выполнена при содействии Российского фонда фундаментальных исследований и Программы поддержки ведущих научных школ.

Литература

1. С. И. Анисимов, Б. Л. Капелиович, Т. И. Перельман, ЖЭТФ 66, 776 (1974).
2. S. I. Anisimov, N. A. Inogamov, and Yu. V. Petrov, Phys. Lett. A 55, 449 (1976).
3. H. E. Elsayed-Ali, T. B. Norris, M. A. Pessot, and G. A. Mourou, Phys. Rev. Lett. 58, 1212 (1987).
4. D. F. Price, R. M. More, R. S. Wailing, G. Guethlein, R. I. Shepherd, R. E. Stewart, and W. E. White, Phys. Rev. Lett. 75, 252 (1995).
5. W. M. Knox, C. Hirlimann, D. A. Miller, J. Shah, D. S. Chemla, and C. V. Shaak, Phys. Rev. Lett. 56, 1191 (1986).
6. J. R. Goldmann and J. A. Prybyla, Phys. Rev. Lett. 72, 1364 (1994).
7. M. Ross, Rep. Prog. Phys. 48, 1 (1985).
8. R. B. Laughlin, Phys. Rev. A 33, 510 (1986).
9. J. A. Van Vechten, R. Tsu, and F. W. Saris, Phys. Lett. A 74, 41 (1979).
10. P. Staphli and K. H. Bennemann, Phys. Rev. B 42, 7163 (1990).
11. P. Staphli and K. H. Bennemann, Phys. Rev. B 49, 7299 (1994).
12. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Статистическая физика, часть I*, Наука, Москва (1976).
13. R. Latter, Phys. Rev. 99, 1854 (1955).
14. H. Nagara and T. Nakamura, Phys. Rev. B 31, 1844 (1985).