

ТЕПЛОПРОВОДНОСТЬ МЕТАЛЛОВ С ГОРЯЧИМИ ЭЛЕКТРОНАМИ

*Н. А. Иногамов**, *Ю. В. Петров*

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

Поступила в редакцию 19 августа 2009 г.

Воздействие ультракороткого лазерного импульса переводит металл в двухтемпературное ($2T$) состояние с разными температурами $T_e \gg T_i$ электронной и ионной подсистем. Вещество в течение существенного промежутка времени пребывает в этом состоянии (от единиц до десятков пикосекунд в зависимости от металла). $2T$ -стадия очень важна, поскольку на ней происходит $2T$ -релаксация с передачей лазерной энергии ионам и, в основном, формируется слой прогрева, играющий важнейшую роль в последующей динамике. Кинетические коэффициенты конденсированной среды с горячими электронами известны плохо — в литературе применяются феноменологические зависимости, составленные из асимптотик при низких и высоких температурах T_e . Между тем без этих коэффициентов невозможно численное моделирование взаимодействия лазерного излучения с веществом. В работе представлен первый расчет коэффициента теплопроводности из кинетического уравнения. Он справедлив в области низких ($T_e \ll T_F = E_F/k_B$, где E_F — энергия Ферми, k_B — постоянная Больцмана) и умеренных ($T_e < T_F$) температур. Предыдущие кинетические вычисления относились к случаю $T_e \ll T_F$, когда расчеты, например, частоты электрон-электронных столкновений, сильно упрощались из-за сведения многократного интеграла к интегрированию в малой окрестности сферы Ферми. В нашем случае при умеренных температурах требуется интегрирование в полном объеме импульсного пространства.

1. ВВЕДЕНИЕ

Из-за большой разницы в массах время $1/\nu_{ee}$ электронной температурной релаксации намного меньше времени t_{eq} выравнивания температур между горячими электронами и ионами. Это обстоятельство лежит в основе двухтемпературного ($2T$) подхода [1–4] к взаимодействию лазерного излучения с веществом. Такой подход необходим для описания воздействия ультракоротких лазерных импульсов, когда длительность τ_L импульса меньше времени t_{eq} , уходящего на $2T$ -релаксацию. Ультракороткие импульсы играют огромную роль в современных прикладных технологиях (обработка поверхности на наномасштабах, лазерное напыление и т. п.) и в фундаментальных исследованиях (см., например, работу [4]). Современная диагностическая техника позволяет следить за эволюцией состояния поверхности после облучения с фемтосекундным временным разрешением (pump-probe technique). Лазерная физика развивается в сторону чрезвычайного умень-

шения длительности τ_L . Получены фемтосекундные импульсы продолжительностью несколько фемтосекунд. Их длительность порядка периода световой осцилляции. Создаются аттосекундные источники с мощной энергетикой. Важностью этих способов нагрева электронной подсистемы обусловлена необходимость детального анализа веществ твердотельной плотности с перегретыми электронами.

Содержательность таких исследований вполне понятна. Соответственно имеется много работ [5–14], посвященных физике воздействия ультракоротких лазерных импульсов. Другой пример конденсированной $2T$ -среды связан с пролетом быстрого иона через образец [15, 16]. Для решения $2T$ -системы гидродинамических уравнений требуются знания о коэффициентах α_{ei} электрон-ионного обмена теплом [3, 6, 7], электронной теплоемкости C_e [3, 6, 7], электронной теплопроводности κ [7] и знания о диэлектрической функции ϵ среды [7, 8]. Обычно применяются феноменологические модели [5, 7, 8, 10, 11, 13, 14], в которых коэффициент теплопроводности κ записывается в виде комбинации из низкотемпературной асимптотики,

*E-mail: nailinogamov@gmail.com

предельной частоты столкновений и плазменной асимптотики [5, 7, 8, 13]. Низкотемпературную асимптотику $T_e \ll T_F = E_F/k_B$ для частоты столкновений представляют в виде $\nu = AT_i + BT_e^2$. Рост частоты с температурой ограничивают предельной частотой, которая порядка атомных частот E_F/\hbar . При высоких температурах $T_e > T_F$ используют формулы для классической плазмы, в которых частота убывает с температурой: $\nu \propto T_e^{-3/2}$. Теплопроводность рассчитывают по модели Друде с помощью частоты столкновений.

Коэффициент A в асимптотике $\nu = AT_i + BT_e^2$ определен с достаточной точностью в экспериментах с твердой и жидкой фазами в интервале температур от комнатной до температуры 2–3 кК. Коэффициент A характеризует электрон-ионное рассеяние. Для расплава алюминия проведен квантовомеханический расчет [17] до $T_e = T_i = 10$ кК, выполненный совместно с решением уравнений молекулярной динамики. Соответствующие данные использованы в $2T$ -гидродинамике [7]. Наиболее острым является положение с коэффициентом B в указанной асимптотике. Данный коэффициент характеризует электрон-электронные столкновения с частотой ν_{ee} . С этим членом связан важный вклад в рассеяние при $T_e \sim T_F$. К сожалению, в теоретических оценках по порядку величины [18, 19], использованных в работах [5, 7, 8, 10, 11, 13], значение B изменяется в широких пределах. Это сильно затрудняет количественное моделирование.

В данной работе проведен систематический расчет вклада частоты ν_{ee} в коэффициент теплопроводности κ . При нашем подходе нет настроенного параметра B в частоте ν_{ee} , за счет которого осуществляется подгонка результатов. В этом смысле вычисление является точным в пределах строгости аппроксимации по Томасу–Ферми взаимодействия электронов по закону экранированного кулоновского потенциала при низких и умеренных температурах T_e .

Расчетам частоты ν_{ee} по кинетическим теориям было посвящено много работ в 90-е и 80-е гг. и ранее [20–25]. К сожалению, все эти работы выполнены при малых температурах $T_e \ll T_F$ в сильновырожденных системах, когда динамика релаксации связана с узкой зоной возле поверхности Ферми. Малость T_e накладывает определяющий отпечаток на расчеты. Поэтому предшествующие результаты не могут быть применены в нашей ситуации с горячими электронами, когда вычисление интегралов для частоты столкновений приходится вести по-другому.

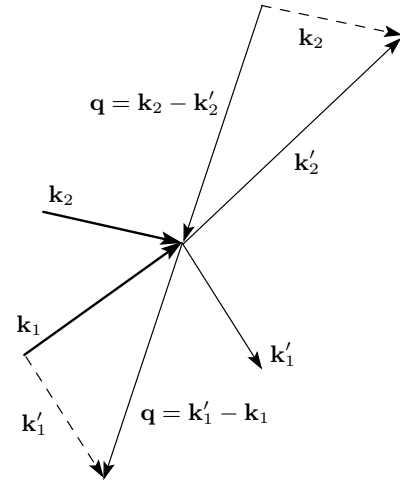


Рис. 1. Волновые векторы электронов 1 и 2 до и после столкновения и импульс $\hbar\mathbf{q}$, переданный электрону 1. Закон сохранения импульса $\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 = \mathbf{k}'_1 + \mathbf{k}'_2$

Последующие разделы посвящены вычислению температурной зависимости $\nu_{ee}(T_e)$ и вклада этих столкновений в теплопроводность $\kappa(T_e)$. Рассматривается показанное на рис. 1 рассеяние электрона 1 на электроне 2 с начальными \mathbf{k}_1 и \mathbf{k}_2 и конечными \mathbf{k}'_1 и \mathbf{k}'_2 волновыми векторами. Основные трудности расчетов связаны с формулой для частоты столкновений $\nu_{ee}(\mathbf{k}_1)$ электрона 1 с фиксированным вектором \mathbf{k}_1 с другими электронами. Поэтому эта формула является основной. Затем по найденной зависимости $\nu_{ee}(\mathbf{k}_1)$ определяется искомый коэффициент $\kappa(T_e)$.

2. ОСНОВНАЯ ФОРМУЛА

Выражение для частоты столкновений электрона [18, 19, 21, 26] с волновым вектором \mathbf{k}_1 с другими электронами имеет вид шестимерной суммы по компонентам двух независимых векторов:

$$\nu_{ee}(k_1) = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}_2} \sum_{\mathbf{q}} [U(\mathbf{q})]^2 \delta(\epsilon_1 + \epsilon_2 - \epsilon'_1 - \epsilon'_2) S, \quad (1)$$

где ϵ_1 (ϵ'_1) и ϵ_2 (ϵ'_2) — энергии электронов 1 и 2 до (после) рассеяния. В формуле (1) учтен проиллюстрированный на рис. 1 закон сохранения импульса $\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 = \mathbf{k}'_1 + \mathbf{k}'_2$. Поэтому в ней нет дельта-функции по импульсам и еще одной трехмерной суммы. Вектор \mathbf{k}_1 фиксирован, он входит в правую часть выражения (1) в качестве параметра. Волновые векторы

\mathbf{k}_2 и \mathbf{q} произвольны, вектор $\mathbf{q} = \mathbf{k}'_1 - \mathbf{k}_1$, $\mathbf{q} = \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}'_2$ характеризует переданный импульс (см. рис. 1),

$$\mathbf{k}'_1 = \mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, \quad \mathbf{k}'_2 = \mathbf{k}_2 - \mathbf{q}.$$

Рассматривается однозонный металл с параболическим законом дисперсии

$$\epsilon(\mathbf{k}) = \gamma k^2, \quad \gamma = \hbar^2/2m,$$

соответственно, ситуация является изотропной и функция $\nu_{ee}(\mathbf{k}_1)$ (1) зависит только от модуля $k_1 \equiv |\mathbf{k}_1|$.

Дельта-функция по энергии в выражении (1) возникает вследствие сохранения энергии, S — статистический фактор

$$S = f_2(1 - f'_1)(1 - f'_2) + f'_1 f'_2(1 - f_2), \quad (2)$$

$$f_1 \equiv f(\epsilon_1), \quad f'_1 \equiv f(\epsilon'_1), \quad f_2 \equiv f(\epsilon_2), \quad f'_2 \equiv f(\epsilon'_2),$$

$$f(\epsilon) = \left[1 + \exp\left(\frac{\epsilon - \mu}{T_e}\right) \right]^{-1},$$

где $f(\epsilon)$ — функция Ферми, $\mu(T_e)$ — химический потенциал, способ подсчета которого из условия нормировки описан в Приложении А, константа Больцмана k_B при температуре опущена для краткости. Входящие в выражение (2) множители f и $1 - f$ определяют вероятности того, что начальные состояния заняты, а конечные свободны. В формуле (2) величина S нормирована на один электрон и описывает рассеяние, во-первых, из состояния с \mathbf{k}_1 и, во-вторых, рассеяние в состояние с \mathbf{k}_1 . Представленные ниже расчеты проведены в приближении, аналогичном принятому в работах [21, 23, 24], когда пренебрегают обменным вкладом. В формулу (1) входит компонента Фурье

$$U(q) = 4\pi e^2 / (q^2 + k_s^2) \quad (3)$$

для потенциала U , соответствующего экранированному кулоновскому отталкиванию электронов, где k_s — обратная длина экранирования [18, 19, 21]. В Приложениях В и С представлена несложная процедура быстрого расчета этой длины в случае экранировки по Томасу — Ферми.

3. ИНТЕГРИРОВАНИЕ ПО АЗИМУТАЛЬНЫМ УГЛАМ

Выражение (1) эквивалентно шестимерному интегралу по дифференциалам $d^3q d^3k_2$:

$$\sum_{\mathbf{q}} \rightarrow \frac{d^3q}{(2\pi)^3}, \quad \sum_{\mathbf{k}_2} \rightarrow 2 \frac{d^3k_2}{(2\pi)^3}.$$

Множитель 2 возникает из-за спина электрона. Введем сферические системы координат в векторных пространствах \mathbf{q} и \mathbf{k}_2 :

$$d^3q = q^2 dq d\psi_q dt, \quad t = -\cos \widehat{\mathbf{k}_1 \mathbf{q}},$$

$$d^3k_2 = k_2^2 dk_2 d\psi_{k_2} dt_2, \quad t_2 = -\cos \widehat{\mathbf{q} \mathbf{k}_2}.$$

Здесь ψ_{k_2} и ψ_q — азимутальные углы. Угол $\widehat{\mathbf{q} \mathbf{k}_2}$ является полярным углом в пространстве векторов \mathbf{k}_2 , в котором за полярную ось принят вектор \mathbf{q} . В свою очередь, в сферических координатах в пространстве \mathbf{q} полярный угол $\widehat{\mathbf{k}_1 \mathbf{q}}$ отсчитывается от вектора \mathbf{k}_1 .

Покажем, что подынтегральное выражение в формуле (1) не зависит от азимутальных углов. Для переданной энергии введем обозначения

$$\alpha = \epsilon_1 - \epsilon'_1, \quad \beta = \epsilon'_2 - \epsilon_2, \quad (4)$$

где

$$\alpha = \gamma k_1^2 - \gamma(\mathbf{k}_1 + \mathbf{q})^2 = 2\gamma q k_1 t - \gamma q^2,$$

$$\beta = \gamma(\mathbf{k}_2 - \mathbf{q})^2 - \gamma k_2^2 = 2\gamma q k_2 t_2 + \gamma q^2.$$

Косинусы t , t_2 полярных углов и коэффициент γ в законе дисперсии были выписаны выше. С учетом определения статистического фактора S (2) после преобразования $S = f_2(1 - f'_1 - f'_2) + f'_1 f'_2$ подынтегральное выражение в (1) в обозначениях (4) принимает вид

$$U^2(q) \delta(\alpha - \beta) S, \quad (5)$$

$$S = f(k_2)[1 - f(\gamma k_1^2 - \alpha) - f(\gamma k_2^2 + \beta)] + f(\gamma k_1^2 - \alpha)f(\gamma k_2^2 + \beta). \quad (6)$$

Проведем в (1) интегрирование сначала по d^3k_2 , а потом по d^3q . Видим, что подынтегральное выражение (5), (6) не зависит, во-первых, от азимутального угла ψ_{k_2} и, во-вторых, от азимутального угла $d\psi_q$. Следовательно,

$$\begin{aligned} \iiint \iiint \iiint \dots d^3q d^3k_2 &= \\ &= (2\pi)^2 \iiint \iiint \dots q^2 dq dt k_2^2 dk_2 dt_2. \end{aligned} \quad (7)$$

4. ПОЛЯРНЫЕ УГЛЫ, ПЕРЕДАННАЯ ЭНЕРГИЯ И СОХРАНЕНИЕ ЭНЕРГИИ

Интегрирование по косинусам полярных углов dt и dt_2 в четырехкратном интеграле (7) выполняется при фиксированных значениях k_2 и q . Вектор \mathbf{k}_1 , входящий в этот интеграл, является постоянным.

Поэтому малые изменения косинусов, dt_2 и dt , вызывают малые изменения потерянной и приобретенной энергий α и β (4) вида

$$d\alpha = 2\gamma q k_1 dt, \quad d\beta = 2\gamma q k_2 dt_2. \quad (8)$$

С учетом (8) перепишем формулы для дифференциалов в интеграле (7):

$$2\pi k_2^2 dk_2 dt_2 = \frac{\pi}{\gamma} \frac{k_2}{q} dk_2 d\beta,$$

$$2\pi q^2 dq dt = \frac{\pi}{\gamma} \frac{q}{k_1} dq d\alpha.$$

Преобразуя выражение (1) в форме (7) от косинусов к переданным энергиям, получаем

$$\nu_{ee}(k_1) = \frac{1}{2(2\pi)^3 \hbar \gamma^2} \times$$

$$\times \iiint U^2(q) \delta(\alpha - \beta) S(k_1, k_2, \alpha, \beta) \times$$

$$\times \frac{k_2}{k_1} dq dk_2 d\alpha d\beta, \quad (9)$$

где S дается выражением (6), а U — формулой (3).

Сохранение энергии $\delta(\alpha - \beta)$ понижает кратность интеграла (9) на единицу. Интегрируя (9) по $d\beta$, записываем

$$\nu_{ee}(k_1) = \frac{1}{2(2\pi)^3 \hbar \gamma^2 k_1} \times$$

$$\times \iint U^2(q) S(k_1, k_2, \alpha, \alpha) k_2 dq dk_2 d\alpha. \quad (10)$$

Интеграл $\int S(k_1, k_2, \alpha, \alpha) d\alpha$ в (10) вычисляется в элементарных функциях. Это еще на одну единицу уменьшает кратность интегрирования. Подставляя (6) и интегрируя, получаем выражение для проинтегрированного статистического фактора:

$$\int S d\alpha = T_e \frac{\exp(\epsilon_1/T_e) + \exp(\mu/T_e)}{\exp(\epsilon_2/T_e) + \exp(\mu/T_e)} \times$$

$$\times \frac{\exp[(\epsilon_2 + \mu)/T_e]}{\exp(2\mu/T_e) - \exp[(\epsilon_1 + \epsilon_2)/T_e]} \times$$

$$\times \ln \frac{\exp(\epsilon_1/T_e) + \exp[(\alpha + \mu)/T_e]}{\exp[(\alpha + \epsilon_2)/T_e] + \exp(\mu/T_e)} =$$

$$= T_e \frac{1 + \exp[(\epsilon_1 - \mu)/T_e]}{1 + \exp[(\epsilon_2 - \mu)/T_e]} \frac{\exp[(\epsilon_2 - \mu)/T_e]}{1 - \exp[(\epsilon_1 + \epsilon_2 - 2\mu)/T_e]} \times$$

$$\times \ln \frac{\exp[(\epsilon_1 - \mu)/T_e] + \exp(\alpha/T_e)}{1 + \exp[(\alpha + \epsilon_2 - \mu)/T_e]} =$$

$$= s(\epsilon_2, \alpha; \epsilon_1, \mu, T_e) = s(\alpha). \quad (11)$$

В аргументах функции s существенные переменные, меняющиеся на плоскости $k_2 q$, отделены точкой с

запятой от параметров, которые остаются неизменными при последующих интегрированиях по dq и dk_2 (10). Для вычисления частоты $\nu_{ee}(k_1; T_e)$ (10) понадобится интеграл (11) в определенных пределах по α . Он имеет вид $\int_{\alpha=A}^{\alpha=B} S d\alpha = s(B) - s(A)$. Поэтому к функции $s(\alpha)$ (11) можно добавить произвольную функцию, не зависящую от α . Таким образом четырехкратный интеграл (9) сводится к интегрированию по плоскости qk_2 .

В работе [26] задача приведена к пятимерному интегралу, который интегрируется методом Монте-Карло. Вычисления выполнены для золота. В этом отношении предложенный здесь метод эффективнее. Для вычислений используется простая программа, выписанная в Приложении С. Читатель может легко ее воспроизвести и проверить выкладки. Программа пригодна для любого однозонного металла. Отметим, что работа [26] относится к случаю, когда световые потоки малы и, соответственно, нагрев электронов невелик (флюенс поглощенного излучения $F_{abs} \sim 10^{-4}$ Дж·см⁻², температуры нагрева 10–100 К). При этом рассматривается пространственно-однородная задача. Пренебречь неоднородностью при наших нагревах можно только в случае сверхтонких фольг толщиной около 10 нм в течение первых пикосекунд после воздействия ультракороткого лазерного импульса [7]. В работе [26] нет расчета теплопроводности. В нашем случае световые потоки большие ($F_{abs} \sim 0.1$ –1 Дж·см⁻²), поэтому температура электронов велика ($T_e \sim T_F$). Для металлов коэффициент отражения R велик, $1 - R \sim 0.1$, соответственно флюенс F_{inc} падающего излучения на порядок превышает F_{abs} . Работа [26] посвящена исследованию важного вопроса об электрон-электронной ($e-e$) релаксации. При малых потоках невелика концентрация n^* возбужденных лазерным полем электронов с энергией порядка энергии светового кванта, $n^* \ll n_{at}$, где n_{at} — концентрация атомов. В такой ситуации $e-e$ -релаксация и межэлектронная термализация затягиваются на сотни фемтосекунд. В нашем случае возбужденных электронов много и $e-e$ -релаксация идет намного быстрее. Типичные частоты при наших температурах порядка обратной фемтосекунды, $\nu_{ee} \sim 10^{15}$ с⁻¹.

5. ОГРАНИЧЕНИЯ НА ПОЛЯРНЫЕ УГЛЫ И ПРЕДЕЛЫ ИНТЕГРИРОВАНИЯ

Введенные выше полярные углы $\widehat{\mathbf{k}_1 \mathbf{q}}$ и $\widehat{\mathbf{q} \mathbf{k}_2}$ входят в системы сферических координат в пространствах \mathbf{q} и \mathbf{k}_2 . Их косинусы t и t_2 изменяются в преде-

лах $[-1, 1]$. С этими пределами связано определение формы области интегрирования в трехмерном пространстве $qk_2\alpha$, где $q = |\mathbf{q}|$, $k_2 = |\mathbf{k}_2|$. Используя определения отданной и полученной энергий (4), находим

$$-1 \leq t_2 \leq 1, \quad \beta' \leq \beta \leq \beta'', \quad (12)$$

$$-1 \leq t \leq 1, \quad \alpha' \leq \alpha \leq \alpha'', \quad (13)$$

где $\beta' = \gamma(q^2 - 2k_2q)$, $\beta'' = \gamma(q^2 + 2k_2q)$, $\alpha' = -\gamma(2k_1q + q^2)$, $\alpha'' = \gamma(2k_1q - q^2)$. Пределы по α и β в (12) и (13) обозначены штрихами вместо цифр, чтобы не путать с номерами сталкивающихся электронов. Возможны четыре случая относительного расположения концов отрезков по α и β . Они представлены на рис. 2. Будем нумеровать их буквами a, b, c и d . Соответственно, имеются четыре вклада в интеграл (1), (9), (10):

$$\frac{\nu_{ee}(k_1)}{\xi} = I_a + I_b + I_c + I_d, \quad \xi = \frac{1}{2(2\pi)^3 \hbar \gamma^2 k_1}. \quad (14)$$

a) $\alpha' \leq \beta' \leq \alpha'' \leq \beta''$. Тогда интегрирование по α в интеграле (11) ведется в пределах

$$\int_{\beta'}^{\alpha''} S d\alpha = s(\alpha = \alpha'') - s(\alpha = \beta'),$$

$$s(\alpha) \equiv s(\epsilon_2, \alpha; \epsilon_1, \mu, T_e)$$

(см. рис. 2). Таким образом приходим к двойному интегралу по dq и dk_2 вместо четырехкратного ин-

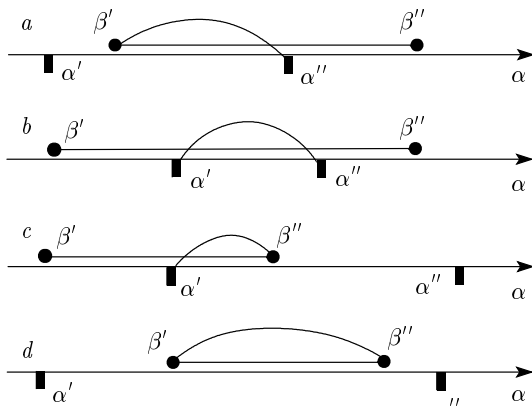


Рис. 2. Взаимное расположение концов отрезков $[\alpha', \alpha'']$ и $[\beta', \beta'']$. Дугой сверху показан интервал по α , по которому ведется интегрирование $\int S d\alpha$ (10), (11)

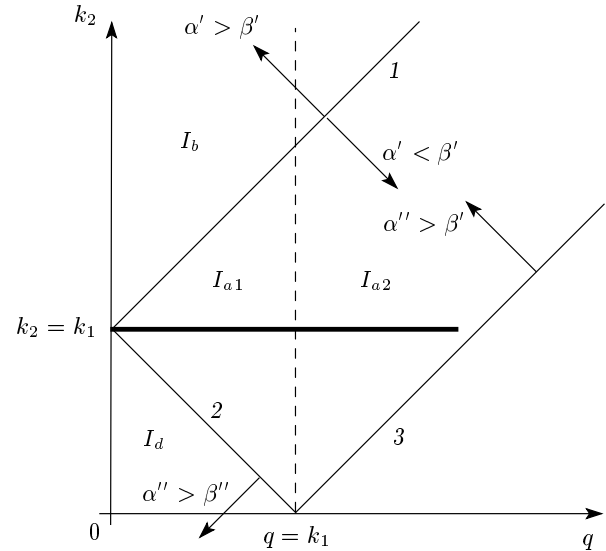


Рис. 3. Области на плоскости qk_2 , по которым берутся интегралы I_{a1}, I_{a2}, I_b, I_d . Цифрами 1, 2 и 3 отмечены границы между этими областями: 1 — $\alpha' = \beta'$, $k_2 = q + k_1$; 2 — $\alpha'' = \beta''$, $k_2 = -q + k_1$; 3 — $\beta' = \alpha''$, $k_2 = q - k_1$. Жирный отрезок — образ поверхности Ферми при $T_c \rightarrow 0$ и $k_1 = k_F$

теграла (9). Область интегрирования по $dq dk_2$ располагается в первом квадранте плоскости qk_2 , поскольку q и k_2 — это модули векторов. Ее границами являются три прямые:

$$\begin{aligned} \alpha' = \beta', \quad k_2 = q + k_1, \quad \beta' = \alpha'', \\ k_2 = q - k_1, \quad \alpha'' = \beta'', \quad k_2 = -q + k_1, \end{aligned} \quad (15)$$

показанные на рис. 3. Формулы (15) для прямых $k_2(q)$ следуют из определений конечных точек (12), (13). Интегрирование по $dq dk_2$ идет по области

$$\begin{aligned} \alpha' < \beta', \quad k_2 < q + k_1, \quad \beta' < \alpha'', \quad k_2 > q - k_1, \\ \alpha'' < \beta'', \quad k_2 > -q + k_1 \end{aligned}$$

внутри полуполосы на плоскости qk_2 , см. рис. 3. Эта полуполоса ограничена слева отрезком $\alpha'' = \beta''$ и упирается в оси q и k_2 в точках $(q = k_1, k_2 = 0)$ и $(q = 0, k_2 = k_1)$.

Интеграл I_a в (14) разобьем на два, $I_a = I_{a1} + I_{a2}$:

$$\begin{aligned} I_{a1} &= \int_0^{k_1} dq \int_{k_2=-q+k_1}^{k_2=q+k_1} dk_2 U^2 k_2 [s(\alpha'') - s(\beta')], \\ I_{a2} &= \int_{k_1}^{\infty} dq \int_{k_2=q-k_1}^{k_2=q+k_1} dk_2 U^2 k_2 [s(\alpha'') - s(\beta')]. \end{aligned} \quad (16)$$

Первый из них берется по треугольнику, образованному сторонами $\alpha' = \beta'$, $\alpha'' = \beta''$ и вертикалью $q = k_1$ (см. рис. 3). Второй интеграл берется по области между прямыми $\alpha' = \beta'$, $\beta' = \alpha''$ и правее вертикали $q = k_1$.

b) $\beta' < \alpha' < \alpha'' < \beta''$. Эта цепочка ограничений означает, что, во-первых, $\beta' < \alpha'$, $k_2 > q + k_1$, во-вторых, $\beta' < \alpha''$, $k_2 > q - k_1$ и, в-третьих, $\alpha'' < \beta''$, $k_2 > -q + k_1$. Самым сильным является первое условие. Интегрирование по $d\alpha$ в (11) надо вести в пределах $\alpha' \leq \alpha \leq \alpha''$. Интеграл

$$I_b = \int_0^\infty dq \int_{k_2=q+k_1}^\infty dk_2 U^2 k_2 [s(\alpha'') - s(\alpha')] \quad (17)$$

берется в клине между прямой $\beta' = \alpha'$ и осью k_2 (см. рис. 3).

c) $\beta' < \alpha' < \beta'' < \alpha''$. В этом случае система неравенств оказывается несовместимой, поскольку $\alpha' > \beta'$ означает $k_2 > q + k_1$, тогда как из $\beta'' < \alpha''$ следует, что $k_2 < -q + k_1$. Следовательно, $I_c = 0$.

d) $\alpha' < \beta' < \beta'' < \alpha''$. Четыре неравенства, $\alpha' < \beta'$, $\alpha' < \beta''$ (это неравенство выполняется всегда), $\beta' < \alpha''$ и $\beta'' < \alpha''$, ограничивают область интегрирования площадью треугольника с вершинами в точках $0, k_1, k_1$. Он находится возле начала координат $q = 0, k_2 = 0$ (см. рис. 3). Интеграл (11) с пределами β' и β'' имеет вид

$$\int_{\beta'}^{\beta''} S d\alpha = s(\beta'') - s(\beta').$$

Соответственно вклад d в (14) имеет вид

$$I_d = \int_0^{k_1} dq \int_0^{k_2=-q+k_1} dk_2 U^2 k_2 [s(\beta'') - s(\beta')]. \quad (18)$$

На рис. 4 показаны зависимости $\nu_{ee}(k_1; T_e)$ при низких и умеренных температурах по отношению к T_F . Они подсчитаны по формулам (14), (16)–(18) с помощью программы, приведенной в Приложении С. При небольших отношениях температур T_e/T_F видна известная (см., например, работу [21]) параболическая зависимость $\nu_{ee}(k_1; T_e) = a(k_B T_e)^2 + (a/\pi^2)(\epsilon_1 - E_F)^2$ по k_1 вблизи $k_1 = k_F$, где $(\epsilon_1 - E_F)^2 \propto (k_1 - k_F)^2$ вблизи поверхности Ферми, $|\epsilon_1 - E_F| \ll E_F$, а коэффициент a стремится к постоянному значению в пределе $T_e \rightarrow 0$. С ростом температуры частота $\nu_{ee}(k_1; T_e)$ растет, а минимум при $k_1 \approx k_F$ заглаживается.

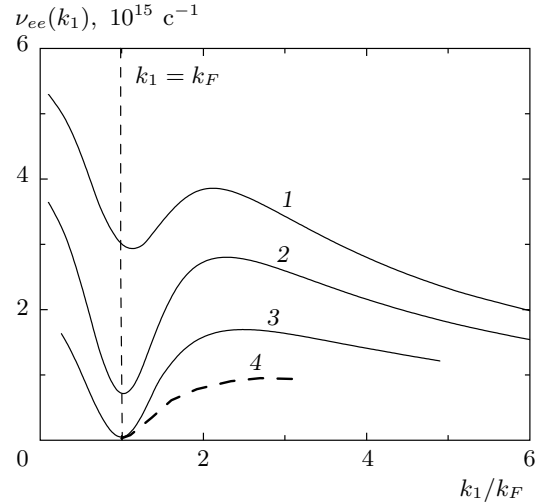


Рис. 4. Изменение профилей частоты $\nu_{ee}(k_1; T_e)$ с ростом T_e и сравнение расчетов нашим методом (14), (16)–(18) для Al ($Z = n_e/n_{at} = 3$, n_e — концентрация электронов) при $T_e = 5$ эВ (кривая 1), 2 эВ (кривая 2) и для Au ($Z = 1$) при $T_e = 0.3$ эВ (кривая 3) и методом Монте-Карло [26] для Au при $T_e = 350$ К (кривая 4)

При этом положение минимума смещается от точки $k_1 = k_F$ в сторону возрастающих значений k_1 .

Кривыми 1 и 2 на рис. 4 изображены зависимости $\nu_{ee}(k_1)$ при $T_e = 2$ и $T_e = 5$ эВ для случая алюминия. Кривые 3 и 4 соответствуют золоту: сплошная кривая 3 вычислена по формулам (14), (16)–(18); штриховая кривая 4 представляет зависимость, полученную в работе [26] путем интегрирования методом Монте-Карло пятимерного интеграла. Она перенесена с рис. 1 этой работы. Кривая 4 относится к очень низкой температуре $T_e = 350$ К. Поэтому она начинается практически из нуля на поверхности Ферми $k_1 = k_F$. Наша кривая 3 для золота на рис. 4 подсчитана при низкой ($T_e = 0.05 T_F$), но все же гораздо большей, чем в работе [26], температуре. Однако это мало сказывается на результате — видно, что зазор между минимумом нашей кривой 3 и осью $\nu_{ee} = 0$ весьма мал.

Опустить по температуре T_e до значений порядка 10^2 К нашим методом сложно. Трудности носят вычислительный характер. Они связаны с появлением «больших» экспонент, $\exp(E_F/T_e) \gg 1$. Но расчеты нашим методом при низких температурах не нужны. Дело в том, что, как показано ниже, при $T_e < 0.1 T_F$ зависимости $\nu_{ee}(k_1; T_e)$ выходят на аналитическую низкотемпературную асимптотику, которая заменяет прямой численный расчет нашим ме-

тодом.

При $k_1 \approx (1.4-2)k_F$ зависимости 3 и 4 на рис. 4 начинают заметно различаться. Правда, как сказано, они относятся к разным температурам. При этом обе низкотемпературные асимптотики согласуются с точностью около 10 %, см. ниже. Исходные выражения (1)–(3) в нашем подходе и в статье [26] существенно разнятся. Главные множители в подынтегральных выражениях в интегралах (1), см. разд. 3, имеют вид $U^2(S_+ + S_-)$, тогда как в [26] записано $(U^2 + U_1^2 - U'U'')S_+$, здесь статистические члены S_+ и S_- соответствуют прямому и обратному процессам, а слагаемые U_1^2 и $U'U''$ представляют обменные поправки.

Область на рис. 4 по k_1/k_F , в которой зависимости $\nu_{ee}(k_1)$ отличаются друг от друга, располагается в основном вне температурного интервала (T -слой) возле поверхности Ферми. Поскольку низкотемпературные асимптотики в нашем методе и в работе [26] согласуются, эти различия далеко от поверхности Ферми слабо сказываются на интересующем нас коэффициенте теплопроводности κ_{ee} . Действительно, вклад в κ_{ee} набирается главным образом на температурном интервале (это будет проиллюстрировано ниже, см. рис. 6). Любопытно, что если вне T -слоя частота ν_{ee} , рассчитанная по формуле (14), выше, чем полученная в работе [26], то при низких температурах коэффициент при низкотемпературной (см. разд. 6) параболе в первом случае меньше, чем во втором.

6. НИЗКОТЕМПЕРАТУРНАЯ АСИМПТОТИКА

Рассмотрим поведение функции $\nu_{ee}(k_1, T_e)$ (10) при $T_e \ll T_F = E_F/k_B$, $|\epsilon_1 - E_F| \ll E_F$. Сумма интегралов по областям, $\nu_{ee}(k_1, T_e) \propto I_a + I_b + I_c + I_d$ (14), равна $I_{a1} + I_{a2} + I_b + I_d$ (16)–(18). В пределе низких температур имеем $\epsilon_1 \approx E_F$, $k_1 \approx k_F$, $E_F = \gamma k_F^2$, $k_2 \approx k_F$. Переданная энергия α мала, поскольку до и после рассеяния первый электрон находится возле поверхности Ферми. Значения β' и α'' , задающие концы отрезков (12), (13), также малы. При этом значения косинусов t, t_2 и переданного импульса q конечны, хотя при $T_e \rightarrow 0$ согласно (4) выполняется

$$2k_F t - q \approx 0, \quad 2k_F t_2 + q \approx 0.$$

Покажем, что проекция сферы Ферми на плоскость qk_2 является прямолинейным отрезком между точками ($q = 0, k_2 = k_1$) и ($q = 2k_1, k_2 = k_1$). Этот отрезок изображен на рис. 3. При $T_e \rightarrow 0$ модуль k_2

лежит в окрестности сферы Ферми шириной порядка температуры T_e . Векторы $\mathbf{k}_1, \mathbf{k}'_1, \mathbf{k}_2$ и \mathbf{k}'_2 заканчиваются на сфере Ферми, если $T_e = +0$. Векторы $\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2$ и $\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2$ лежат в одной плоскости $\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2$, которая вместе с этими векторами проходит через центр сферы Ферми. Вектор полного импульса системы из электронов 1 и 2, равный сумме $\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2$, является биссектрисой угла между векторами \mathbf{k}_1 и \mathbf{k}_2 . Полный импульс при столкновении не меняется, поэтому вектор $\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2$ совпадает с вектором $\mathbf{k}'_1 + \mathbf{k}'_2$. Вектор $\mathbf{k}'_1 + \mathbf{k}'_2$ также образует биссектрису между векторами \mathbf{k}'_1 и \mathbf{k}'_2 , лежащими в своей плоскости $\mathbf{k}'_1\mathbf{k}'_2$.

Если зафиксировать вектор \mathbf{k}_2 , то вариация переданного импульса \mathbf{q} приводит к изменению в широких пределах двугранного угла между плоскостями $\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2$ и $\mathbf{k}'_1\mathbf{k}'_2$. Вектор \mathbf{k}_1 — это постоянный параметр. Поэтому плоскость $\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2$ неподвижна. Вариация \mathbf{q} приводит к вращению плоскости $\mathbf{k}'_1\mathbf{k}'_2$ вокруг общей оси $\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 = \mathbf{k}'_1 + \mathbf{k}'_2$ плоскостей $\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2$ и $\mathbf{k}'_1\mathbf{k}'_2$. При этом конец вектора \mathbf{k}'_1 пробегает окружность на сфере Ферми. Центр этой окружности на сфере Ферми приходится на точку, образованную пересечением вектора $\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2$ со сферой. Прямолинейные отрезки между концами пар векторов $\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2$ и $\mathbf{k}'_1, \mathbf{k}'_2$ образуют диаметры окружности. Эти отрезки располагаются на плоскости окружности. Диаметр равен $|\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1|$. При фиксированных \mathbf{k}_1 и \mathbf{k}_2 вариация модуля $|\mathbf{q}|$ происходит в пределах $0 < q < |\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1|$. Если \mathbf{k}_1 — постоянный параметр, то конец вектора \mathbf{k}_2 пробегает сферу Ферми. Следовательно, полная вариация модуля $|\mathbf{q}|$ ограничена интервалом

$$0 < q < 2k_1. \quad (19)$$

Это и есть проекция сферы Ферми на плоскость qk_2 . Она показана в виде жирного отрезка на рис. 3.

При $T_e \rightarrow 0$ интегралы по площадям $\nu_{ee}(k_1, T_e) \propto I_{a1} + I_{a2} + I_b + I_d \rightarrow I_a$ на плоскости qk_2 стягиваются к полоске шириной порядка T_e возле жирного отрезка (19) на рис. 3; $I_a = I_{a1} + I_{a2}$. Поэтому получается, что $\nu_{ee}(k_1, T_e) \propto T_e^2$. Один множитель T_e является из интегрирования по $d\alpha$ в (10), (11), тогда как другой — из площади полоски вокруг отрезка (19), поскольку эта площадь равна произведению ширины полоски (порядка T_e) на ее длину (приблизительно равную $2k_F$). Итак, интегрирования по $d\alpha$ и по dk_2 в интеграле (10) дает по малому множителю T_e , тогда как интегрирование по dq такого множителя не дает.

Зафиксируем значение T_e . Вычислим коэффициент в асимптотике $\nu_{ee}(k_1, T_e) \propto T_e^2$ при фиксирован-

ном значении параметра ϵ_1 , который задает начальную энергию электрона l . Имеем

$$\begin{aligned} \frac{\nu_{ee}(k_1, T_e)}{\xi} &= I_a = \int_0^{2k_1} dq [U(q)]^2 \times \\ &\times \int_{k_1 - A T_e}^{k_1 + A T_e} dk_2 k_2 [s(\alpha'') - s(\beta')] = \\ &= 2k_F T_e \int dq [U(q)]^2 \int dk_2 \frac{e_2}{1 - e_2^2} \times \\ &\times \ln \left(\frac{1 + e_a}{1 + e_b} \frac{1 + e_2 e_b}{1 + e_2 e_a} \right), \quad (20) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} e_2 &= \exp[(\epsilon_2 - \epsilon_1)/T_e] = \exp[\gamma(k_2^2 - k_1^2)/T_e], \\ e_a &= \exp(\alpha''/T_e), \quad e_b = \exp(\beta'/T_e). \end{aligned}$$

Сюда подставлено выражение (11) для $s(\alpha)$. Интеграл (20) берется по узкой полоске (19). Поэтому число A в пределах интеграла по dk_2 в (20) велико ($A \gg 1$), а температура мала ($T_e \rightarrow 0$). Интегрирование по dk_2 направлено поперек полоски, а по dq — вдоль. Введем нормированные на k_1 и ϵ_1 переменные

$$Q = \frac{q}{k_1}, \quad Y = \frac{k_2}{k_1} - 1, \quad \tau_e = \frac{T_e}{\gamma k_1^2}.$$

Тогда выражение (20) примет вид

$$\begin{aligned} \frac{\nu_{ee}(k_1, T_e)}{2k_F^3 T_e \xi} &= \\ &= \int_0^2 dQ U^2 \int dY \frac{e_2}{1 - e_2^2} \ln \left(\frac{1 + e_a}{1 + e_b} \frac{1 + e_2 e_b}{1 + e_2 e_a} \right), \quad (21) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} e_2 &= \exp \left(\frac{2Y + Y^2}{\tau_e} \right), \quad e_a = \exp \left(\frac{2Q - Q^2}{\tau_e} \right), \\ e_b &= \frac{\exp(-2YQ/\tau_e)}{e_a} = \frac{e^-}{e_a}. \end{aligned}$$

Вне малой окрестности порядка T_e около концевых точек отрезка (19) отношение $(2Q - Q^2)/\tau_e > 0$ велико. Следовательно, экспонента e_a также велика. Поэтому аргумент логарифма близок к единице. Разлагая логарифм в (21), получаем

$$\begin{aligned} \frac{\nu_{ee}(k_1, T_e)}{2k_F^3 T_e \xi} &= \int_0^2 dQ U^2 \int dY \frac{e_2}{1 - e_2^2} \times \\ &\times \left(\frac{1 + e^- e_2 - e^- - 1/e_2}{e_a} - \ln e_2 \right). \quad (22) \end{aligned}$$

Подынтегральные выражения в (21), (22) имеют особенность при $Y = 0$ из-за знаменателя дроби $e_2/(1 - e_2^2)$. Эта особенность компенсируется нулем логарифма в точке $Y = 0$. Числитель дроби в скобках в формуле (22) проходит через нуль при $Y = 0$, также как и основное слагаемое $\ln e_2$ в этих скобках. Поэтому из-за большой величины e_a эту дробь можно отбросить по сравнению с $\ln e_2$. Тогда в подынтегральном выражении зависимости от Q и Y разделяются, и интегрирования по dQ и dY можно провести отдельно.

Отбросим в выражении $e_2 = \exp[(2Y + Y^2)/\tau_e] \approx \exp(2Y/\tau_e)$ малый член порядка τ_e^2 . Сделаем замену $2Y/\tau_e = y$. В результате получаем

$$\frac{\nu_{ee}(k_1, T_e)}{2k_F^3 T_e \xi} = \left(\int_0^2 dQ U^2 \right) \left(\frac{\tau_e}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^y y dy}{e^{2y} - 1} \right). \quad (23)$$

Оба интеграла в формуле (23) берутся аналитически:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^y y dy}{e^{2y} - 1} = \frac{\pi^2}{4},$$

$$\int_0^2 dQ U^2 = \frac{(4\pi e^2)^2}{2k_F k_s^3} \left[\frac{2k_F/k_s}{1 + (2k_F/k_s)^2} + \arctg \frac{2k_F}{k_s} \right].$$

Подставляя их в (23), находим

$$\begin{aligned} \nu_{ee}(k_F)|_{lT} &= a(k_1 = k_F, \eta = \eta_F) (k_B T_e)^2, \\ a(k_1, \eta) &= \frac{\pi}{8} \frac{e^4 m^3}{\hbar^7 k_1^4} g(\eta), \quad (24) \end{aligned}$$

$$\eta = \frac{2k_1}{k_s}, \quad \eta_F = \frac{2k_F}{k_s}, \quad g = \frac{\eta^4}{1 + \eta^2} + \eta^3 \arctg \eta.$$

Низкотемпературная асимптотика (low temperature, lT) вычислялась ранее (см. работу [21], имеющиеся там ссылки и сравнение с экспериментом при низких температурах). Приведенное выше вычисление, выполненное другим способом, дает результат (24), в точности совпадающий с приведенным в работе [21]. Если в [21] применялось разделение угловых и энергетических интегрирований, то при нашем подходе задача нахождения ν_{ee} сводится к двумерным интегралам (16)–(18). Наш подход, в отличие от низкотемпературных расчетов в работе [21], разработан для вычислений при произвольном отношении T_e/T_F .

Сравнение низкотемпературной асимптотики из работы [21],

$$\begin{aligned} \nu_{ee}(k_1; T_e)|_{lT} &= \\ &= a(k_F, \eta_F) [k_B^2 T_e^2 + (\epsilon_1 - E_F)^2/\pi^2] \quad (25) \end{aligned}$$

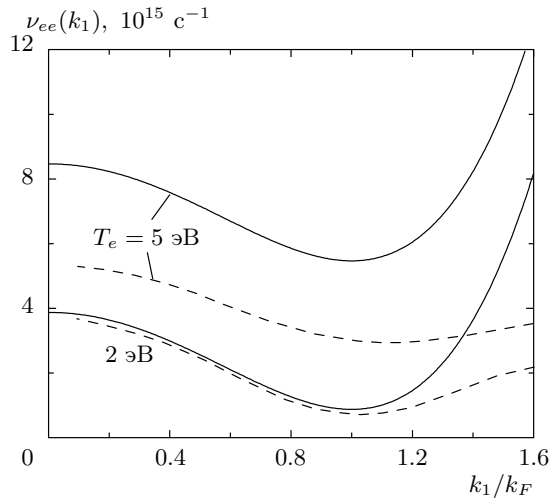


Рис. 5. Сопоставление низкотемпературной асимптотики (25) для Al при температурах 2 и 5 эВ (сплошные кривые) с расчетом по формулам (14), (16)–(18) (штриховые кривые соответствуют кривым 1 и 2 на рис. 4)

с формулой (14) показано на рис. 5. Коэффициент a дается формулой (24). Как видим, до температур порядка $0.1T_F$ эта асимптотика хорошо описывает зависимость функции $\nu_{ee}(k_1; T_e)$ от k_1 в окрестности поверхности Ферми.

Сравним низкотемпературные асимптотики, полученные нами и в работе Луговского и Брэя (LB) [26]. Из формул (19) и (20) из статьи [26] следует, что, во-первых, в них имеется дополнительный по сравнению с нашими формулами множитель двойка, и, во-вторых, выражение для функции $g^{LB}(\eta)$ содержит еще один арктангенс. Асимптотическое выражение из [26] имеет вид

$$\nu_{ee}^{LB}|_{lT} = a^{LB} \left[k_B^2 T_e^2 + \frac{(\epsilon_1 - E_F)^2}{\pi^2} \right],$$

$$a^{LB} = \frac{\pi}{4} \frac{e^4 m^3}{\hbar^7 k_1^4} g^{LB}(\eta),$$

$$g^{LB} = g - \frac{\arctg\left(\eta\sqrt{\eta^2 + 2}\right)}{\sqrt{\eta^2 + 2}},$$

где g дается формулой (24). Умножение на двойку и вычитание дополнительного арктангенса примерно компенсируют друг друга на поверхности Ферми. Поэтому отношение a^{LB}/a мало отклоняется от единицы, здесь a определено выражением (24). Это отношение равно 1.2 и 1.14 для Al ($m_{eff} = m_e$) и Au ($m_{eff} = m_e$), где m_{eff} — эффективная масса в законе дисперсии $\epsilon = \hbar^2 k^2 / 2m_{eff}$, m_e — масса электрона в вакууме.

7. ТЕПЛОПРОВОДНОСТЬ

Рассмотрим вклад e – e -столкновений в теплопроводность однозонного металла. Кинетическое уравнение, записанное в τ -приближении [18, 19, 27], имеет вид

$$\mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} = \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial T} \nabla T_e = -\frac{f^{(1)}}{\tau}, \quad (26)$$

где \mathbf{v} — скорость электронов, $f(\epsilon)$ — распределение Ферми (2), $f^{(1)}$ — поправка к этому распределению, связанная с градиентом температуры. Тепловой поток дается выражением

$$\mathbf{Q} = \int (\epsilon - \mu) \mathbf{v} f^{(1)} \frac{2d^3k}{(2\pi)^3}, \quad (27)$$

поскольку поток тепла, связанный с движением электронов, равен разности потока энергии и потока свободной энергии [19, 27]. Последний определяется произведением потока частиц на их химический потенциал μ . Множитель 2 в формуле (27) появляется из-за спина электрона.

Отметим, что при наличии градиента температуры в металле может появиться электрическое поле. Плотности возникающего при этом электрического тока и теплового потока можно записать в виде

$$\mathbf{j} = \sigma \mathbf{E} + \hat{\beta} \nabla T_e, \quad \mathbf{Q} = \hat{\gamma} \mathbf{E} + \hat{\xi} \nabla T_e,$$

где σ — проводимость, а коэффициенты $\hat{\beta}$ и $\hat{\gamma}$ в этих формулах в силу принципа симметрии кинетических коэффициентов Онзагера связаны соотношением $\hat{\gamma} = -\hat{\beta} T_e$ [18]. Выражая \mathbf{Q} через \mathbf{j} и ∇T_e , получаем

$$\mathbf{Q} = -\frac{\hat{\beta}}{\sigma} \mathbf{j} - \kappa \nabla T_e,$$

$$\kappa = -\hat{\xi} - \frac{\beta^2 T_e}{\sigma}.$$

При условии $\mathbf{j} = 0$ имеем $\mathbf{Q} = -\kappa \nabla T_e$. В данной работе вычисляется только слагаемое $\hat{\xi}$ в выражении для κ (иначе говоря, только диагональный член в матрице кинетических коэффициентов). Для рассматриваемого нами e – e -рассеяния это может быть оправдано следующим образом. Удельное сопротивление при низких температурах может быть записано в виде

$$\rho = \rho_{ee} + \rho_{ei} = \alpha_{ee} T^2 + \alpha_{ei} T^5.$$

Первое слагаемое обусловлено процессами переброса, которые в нашей ситуации малосущественны (см. ниже). В их отсутствие $\rho_{ee} = 0$, т. е. $\sigma_{ee} \rightarrow \infty$. Тогда в выражении $\kappa = -\hat{\xi} - \hat{\beta}^2 T_e / \sigma$ мы можем пренебречь

вторым слагаемым, и для коэффициента теплопроводности получаем $\kappa = -\hat{\xi}$.

Поправка к функции распределения $f^{(1)}$ выражается через градиент температуры и производную $\partial f/\partial T_e$ от функции Ферми согласно (26). Перепишем эту производную через производную $\partial f/\partial \epsilon$,

$$\frac{\partial f}{\partial T_e} = - \left(\frac{\partial \mu}{\partial T_e} + \frac{\epsilon - \mu}{T_e} \right) \frac{\partial f}{\partial \epsilon}.$$

Тогда выражение для поправки принимает вид

$$f^{(1)} = -\mathbf{v} \frac{\partial f}{\partial T_e} \tau \cdot \nabla T_e = \left(-\frac{\partial f}{\partial \epsilon} \right) \times \left(\frac{\partial \mu}{\partial T_e} + \frac{\epsilon - \mu}{T_e} \right) \mathbf{v} \cdot \nabla T_e \tau(\epsilon),$$

$$\tau(\epsilon) = \frac{1}{\nu_{ee}(\epsilon(k), T_e)}, \quad (28)$$

где $\nu_{ee}(k, T_e)$ дается формулами (14), (16)–(18) с заменой k_1 на k .

Подставляя в формулу (27) для теплового потока выражение (28) для поправки, получаем

$$\mathbf{Q} = \int (\epsilon - \mu) \left(-\frac{\partial f}{\partial \epsilon} \right) \times \left(\frac{\partial \mu}{\partial T_e} + \frac{\epsilon - \mu}{T_e} \right) \mathbf{v} (\mathbf{v} \cdot \nabla T_e) \tau(\epsilon) \frac{2d^3k}{(2\pi)^3}, \quad (29)$$

Спроектируем вектор \mathbf{Q} на направление градиента T_e . Пусть это направление соответствует оси z . Проекция потока имеет вид

$$Q_z = \int (\epsilon - \mu) \left(-\frac{\partial f}{\partial \epsilon} \right) \times \left(\frac{\partial \mu}{\partial T_e} + \frac{\epsilon - \mu}{T_e} \right) v_z^2 \frac{\partial T_e}{\partial z} \tau(\epsilon) \frac{2d^3k}{(2\pi)^3}. \quad (30)$$

Заменяя d^3k на произведение дифференциалов в сферических координатах и интегрируя выражение (30) по углам, для коэффициента теплопроводности получаем

$$\kappa_{ee} = \frac{k_B}{3} \int (\epsilon - \mu) \left(-\frac{\partial f}{\partial \epsilon} \right) \times \left(\frac{\partial \mu}{\partial T_e} + \frac{\epsilon - \mu}{T_e} \right) v^2 \tau(\epsilon) \frac{k^2 dk}{\pi^2}, \quad (31)$$

где $v = v(k) = \hbar k/m$ — скорость электрона с модулем волнового вектора равным k . Как видим, коэффициент теплопроводности κ_{ee} находится путем вычисления интеграла (31), в котором зависимость $\tau(\epsilon) = 1/\nu_{ee}(k)$ дается двойным интегралом (14), (16)–(18). Описание простой программы расчета теплопроводности по формулам (14) и (31) приведено

в Приложении С. Программа может быть применена для описания металлов в случаях, когда можно ограничиться однозонным приближением.

При $T_e/T_F \rightarrow 0$ коэффициент κ_{ee} (31) выходит на низкотемпературную асимптотику:

$$\kappa_{ee}|_{IT} = \frac{\zeta}{k_B T_e},$$

$$\zeta = 24 \cdot 3^{1/3} \pi^{5/3} \frac{I_{IT}}{g(\eta_F)} k_B \frac{\hbar^7 n_e^{7/3}}{m^4 e^4},$$

$$\eta_F = \frac{2k_F}{k_s} = \frac{4}{\sqrt{3}} \frac{E_F}{\hbar \omega_{pl}}, \quad \omega_{pl}^2 = 4\pi \frac{n_e e^2}{m}, \quad (32)$$

$$k_s(T_e = 0) = \sqrt{\frac{4\pi e^2}{(2/3)E_F/n_e}},$$

$$I_{IT} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{x^2 e^x dx}{(1 + x^2/\pi^2)(1 + e^x)^2} = 1.75218,$$

где функция $g(\eta)$ определена формулой (24). Здесь рассматриваются металлы, которые в некоторой области температур описываются в однозонном параболическом приближении. Электрон-электронное взаимодействие аппроксимируется экранированным кулоновским полем, а длина экранировки вычисляется в модели Томаса–Ферми. В этом случае индивидуальные различия между металлами связаны с параметрами Z , n_{at} и m_{eff} , где Z — заряд иона. В случае алюминия при $Z = 3$, $n_{at} = 6 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$, $m_{eff} = m_e$ имеем

$$k_s = 1.17k_F,$$

$$\kappa_{ee}|_{IT} [\text{эрг/см} \cdot \text{с} \cdot \text{К}] = 3.48 \cdot 10^8 / T_e [\text{эВ}]$$

(см. рис. 6 и 7). При тех же значениях Z и n_{at} , но $m_{eff} = 1.5m_e$ получаем

$$k_s = 1.44k_F, \quad \kappa_{ee}|_{IT} [\text{эрг/см} \cdot \text{с} \cdot \text{К}] = 1.32 \cdot 10^8 / T_e [\text{эВ}].$$

Для золота при $Z = 1$, $n_{at} = 6 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$, $m_{eff} = m_e$ расчет дает

$$k_s = 1.41k_F, \quad \kappa_{ee}|_{IT} [\text{эрг/см} \cdot \text{с} \cdot \text{К}] = 0.48 \cdot 10^8 / T_e [\text{эВ}].$$

В случае алюминия параболическая однозонная модель с постоянным числом электронов $Z = 3$ применима в широком диапазоне температур электронов от $T_e = 0$ до нескольких десятков электронвольт [28], пока не начинается ионизация валентной зоны $2s^2p^6$. Ширина запрещенной зоны между зоной проводимости и валентной зоной, соответствующей L -оболочке, примерно равна 60 эВ. В случае благородных металлов область применимости уже. Например, для Au она ограничена температурами

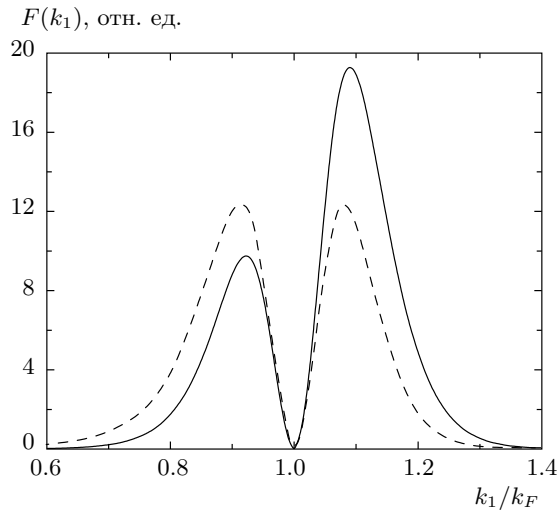


Рис. 6. Окрестность порядка T_e возле сферы Ферми, дающая вклад в теплопроводность. Сравнение подынтегрального выражения, даваемого формулой (31) — сплошная кривая, с подынтегральным выражением в случае асимптотической формулы (32) — штриховая. Al, $Z = 3$, $m_{eff} = m_e$, $T_e = 1$ эВ

$T_e \sim 1$ эВ. При более высоких значениях T_e необходимо учитывать наличие d -электронов [3, 6, 7] и строить двухзонную теорию, поскольку при комнатной температуре d -зона отделена от уровня Ферми щелью шириной 1.8–2 эВ [3, 29–32]. Отметим, что положение верхнего края d -зоны смещается вниз по оси энергий при повышении температуры электронов [7, 28, 33–35].

Сравнение подынтегральной функции $F(k_1; T_e)$, вычисленной по формулам (14), (31), с подынтегральной функцией $F_{lT}(k_1; T_e)$ в интеграле (32), относящейся к низким температурам, показано на рис. 6. При уменьшении температуры T_e графики этих функций сближаются. Зависимость $\kappa_{ee}(T_e)$ (14), (31) выходит на асимптотику (32), как это показано на рис. 7. Окрестность низкотемпературной асимптотики мала по сравнению с T_F (порядка 10% от T_F). При $T_e = 1$ эВ значение $\kappa_{ee|lT}$ (32) на 15% ниже значения κ_{ee} (31).

8. ЭФФЕКТИВНАЯ ЧАСТОТА СТОЛКНОВЕНИЙ

Выше вычислены частота столкновений $\nu_{ee}(k_1)$ электрона с волновым вектором \mathbf{k}_1 с остальными электронами и коэффициент теплопроводности κ_{ee} , связанный с e - e -рассеянием. При численном моделировании гидродинамического $2T$ -течения

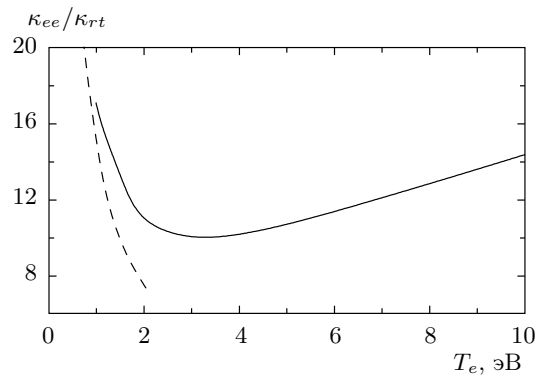


Рис. 7. Переход коэффициента теплопроводности (31) — сплошная кривая на асимптотическую зависимость $\kappa_{ee|lT} \propto 1/T_e$ (32) при низких температурах — штриховая кривая. Алюминий, $Z = 3$, $m_{eff} = m_e$; $\kappa_{rt} = 2.37 \cdot 10^7$ ед. CGS — справочное значение коэффициента теплопроводности при комнатной температуре

[7, 8, 11] удобно пользоваться эффективной частотой ν_{ee} , которую будем выражать через коэффициент теплопроводности по формуле Друде $\kappa_{ee} = (1/3) c_{eV} \overline{v^2} / \nu_{ee}$ или

$$\nu_{ee} = \nu_{ee|k} = c_{eV} \overline{v^2} / 3\kappa_{ee}, \quad (33)$$

где c_{eV} — электронная теплоемкость при постоянном объеме, $\overline{v^2}$ — средний квадрат скорости электронов. В Приложении Е приведены температурные зависимости c_{eV} и $\overline{v^2}$ в широком диапазоне от температуры вырождения электронов до температуры Ферми.

Найдем асимптотику частоты ν_{ee} при низких температурах. Имеем $\nu_{ee} \propto T_e^2$. Запишем ν_{ee} через безразмерный коэффициент b следующим образом

$$\nu_{ee|lT} = b \frac{E_F}{\hbar} \left(\frac{k_B T_e}{E_F} \right)^2. \quad (34)$$

Подставляя в выражения (33), (34) асимптотику $\kappa_{ee|lT}$ (32) и формулу $c_{eV}(T_e \rightarrow 0) = [(\pi^2/2)n_e k_B^2 E_F] T_e$, для коэффициента b в низкотемпературном пределе находим

$$b_{lT} = \frac{\pi^{5/3}}{80 \cdot 3^{2/3}} \frac{g}{I_{lT}} \frac{e^4 m^2}{\hbar^4 n_e^{2/3}} \sim \frac{e^4 n_e^{2/3}}{E_F^2} = \left(\frac{E_{elst}}{E_F} \right)^2. \quad (35)$$

Входящие в (35) функция $g(\eta)$ и интеграл I_{lT} выписаны в (24), (32). Как видим, коэффициент b_{lT} в (35) определяется квадратом отношения электростатической энергии E_{elst} к энергии Ферми E_F .

Приведем типичные значения b_{IT} (35). Обратная длина экранирования k_s^{TF} , входящая в выражение (3), вычисляется по Томасу – Ферми. Для алюминия $b_{IT}(Z = 3, m_{eff}/m_e = 1) = 1.9$, $b_{IT}(3, 1.5) = 2.3$. В случае золота получаем $b_{IT}(1, 1) = 2.2$. Соответственно коэффициент $B(3, 1)$ в зависимости $\nu = AT_i + BT_e^2$ [7, 8, 11, 13] равен $1.9 \cdot 10^6 \text{ с}^{-1} \cdot \text{К}^{-2}$. Обратная длина k_s^{TF} является функцией температуры электронов (см. Приложения В, С). При $T_e \gg T_F$ экранировка с $k_s^{TF} = \sqrt{4\pi e^2 / (\partial\mu / \partial n_e)}$ переходит в дебаевскую экранировку с $k_s = \sqrt{4\pi n_e e^2 / T_e}$. При $T_e = 0$ для алюминия имеем $k_s^{TF} = 1.17k_F^{Al}$, а для золота — $k_s^{TF} = 1.41k_F^{Au}$. Коэффициент b через функцию $g(\eta)$ (24) сильно зависит от длины экранировки $1/k_s(T_e = 0)$. Например, если взять эту длину по Бому – Пайнсу, $1/k_s^{BP} = 1.47r_{ee}$ [21], то длина экранировки для алюминия возрастет в $1.17/0.354 = 3.3$ раз, а для золота в 4 раза, здесь $r_{ee} = (3/4\pi n_e)^{1/3}$ — среднее расстояние между электронами. При этом коэффициент b (35) увеличится в 40 раз (Al) и в 70 раз (Au). Это связано с тем, что потенциал взаимодействия вида (3) при широком разбросе переданного импульса $\hbar q$ в интеграле (7) оказывается короткодействующим. При этом сечение рассеяния определяется длиной экранировки. Соответственно, частота столкновений растет с длиной экранировки $1/k_s$. Мы вернемся к этому вопросу ниже, когда речь пойдет о переходе при высоких температурах изложенного выше подхода с формулами (7), (14), (16)–(18) к формулам физики плазмы.

Коэффициент b пропорционален коэффициенту a (24), поскольку оба коэффициента относятся к частотам e – e -столкновений. При этом a представляет собой частоту $\nu_{ee}(k_1)$, а b — частоту $\nu_{ee|k}$, усредненную по коэффициенту теплопроводности. В работе [21] приведены расчет a и обзор работ [23–25] по этому коэффициенту. Говорится, что выражение (24) для коэффициента a совпадает с полученным в работах [23, 24] и что коэффициент a в статье [25] в два раза больше; тогда и коэффициент b будет в два раза больше. (См. также обсуждение статьи [26] в конце разд. 6.) В работе [21] выполнено сравнение низкотемпературных асимптотик с экспериментом при температурах $T_e = T_i$ в диапазоне от нуля до нескольких градусов Кельвина. Показано, что значение a (24), использованное в предыдущем абзаце для подсчета коэффициента b , достаточно удовлетворительно согласуется с опытами. Это является основанием для использования приведенных значений b при численном $2T$ -моделировании.

Безразмерный коэффициент b_a для частоты $\nu_{ee}(k_1 = k_F; T_e \rightarrow 0)$, вычисленный по коэффици-

енту a (24), равен $b_a(Z = 3, n_{at} = 6 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}, m_{eff}/m_e = 1) = 1.7$. При этом приведение к безразмерному виду проводится по формуле (34). При вычислении кинетических коэффициентов требуется не частота $\nu_{ee}(k_1)$, зависящая от волнового числа k_1 испытывающего соударения электрона 1, а средняя частота ν_{ee} . В подходе, описанном выше, величина ν_{ee} определяется через необходимую в двухтемпературных расчетах [7] теплопроводность: $\nu_{ee} = \nu_{ee|k}$. Если же использовать процедуру усреднения функции $\nu_{ee}(k_1) = \nu_{ee}(\epsilon_1)$ (25) по фермиевской функции распределения электронов $f(\epsilon_1)$, то средняя частота $\bar{\nu}_{ee}$ будет равна $(4/3)\nu_{ee}(k_1 = k_F; T_e \rightarrow 0)$ [21] (т. е. $\bar{\nu}_{ee}/\nu_{ee}(k_F) = 4/3$).

Соответственно, для среднего значения \bar{b} получаем

$$\bar{b}(Z = 3, n_{at} = 6 \cdot 10^{22}, m_{eff}/m_e = 1) = (4/3)b_a = 2.25.$$

Процедура усреднения заключается в вычислении интегралов I_ν , I_{norm} [21] и их отношения:

$$\bar{\nu}_{ee} = I_\nu / I_{norm}, \quad I_\nu = \int_0^\infty -\frac{\partial f}{\partial \epsilon} \nu_{ee}(\epsilon) d\epsilon, \quad (36)$$

$$I_{norm} = \int_0^\infty -\frac{\partial f}{\partial \epsilon} d\epsilon = f(0),$$

где $f(\epsilon)$ — распределение Ферми. При $T_e/T_F \rightarrow 0$ имеем $f(0) \rightarrow 1$. Отношения коэффициентов b , b_a , \bar{b} выражаются через интеграл I_{IT} (32) и равны

$$\frac{b_a}{b} = 5 \frac{I_{IT}}{\pi^2} = 0.88, \quad \frac{\bar{b}}{b} = \frac{20}{3} \frac{I_{IT}}{\pi^2} = 1.18. \quad (37)$$

Безразмерный множитель b (34), (35) важен, так как его величина, как говорилось выше, определяет коэффициент B в обычно используемых аппроксимациях [5, 7, 8, 10, 11, 13, 14] полной частоты столкновений $\nu = \nu_{ei} + \nu_{ee} = AT_i + BT_e^2$, равной сумме частот электрон-ионных и электрон-электронных столкновений. В свою очередь, от ν зависит теплопроводность, а значит, глубина прогрева и температура, до которой прогревается поверхностный слой мишени [7]. Эти две величины определяют динамику расширения мишени, нагретой ультракоротким лазерным импульсом. От них зависит тепловая история плавления и затвердевания поверхностного слоя. Если в расчете увеличить коэффициент b , то частота ν_{ee} будет больше, а теплопроводность уменьшится. Соответственно, толщина слоя прогрева будет меньше, а его температура (после релаксации температур T_e и T_i) будет выше.

В некоторых предшествующих работах авторы использовали такие значения для коэффициента b , при которых достигалось наилучшее согласие с имеющимися в их распоряжении экспериментальными данными. Это относится к статьям [7, 8, 11]. В них $b \approx 1.7$ (Al) [7], $b \approx 0.85$ (Al) [8] и $b \approx 1.4$ (Au) [11]. Значение $b \approx 1.4$ (Au) [11] подсчитано нами по восходящей параболической ветви на графике функции $\nu(T_e)$ на рис. 1 из работы [11].

Работа [11] требует обсуждения. В ней сделана попытка использовать низкотемпературную асимптотику (25) и усреднение (36) для расчета коэффициента \bar{b} в квадратичной зависимости $\nu_{ee}|_{IT}$ от температуры. Небольшое замечание заключается в том, что в [11] вместо множителя $\int \nu f' d\epsilon$ используется эквивалентный в пределе $T_e/T_F \rightarrow 0$ множитель $\int \nu f(1-f) d\epsilon$, см. формулу (9) в работе [11]. Главное замечание состоит в следующем. В работе [11] частота $\nu_{ee}(k_1)$ берется по формуле (25), в которой опущено первое слагаемое. Это слагаемое приподнимает параболу $(\epsilon_1 - E_F)^2$ или $(k_1 - k_F)^2$ на рис. 4, 5. Нетрудно видеть, что вклад второго слагаемого составляет 25% от суммарного вклада двух слагаемых (25) (постоянного и параболического) в коэффициент \bar{b} . Поэтому значение \bar{b} в [11] получается уменьшенным в четыре раза. Обозначим его \bar{b}_* . Величина \bar{b}_* равна 0.6 для Au при длине экранировки $1/k_s^{TF}(T_e = 0)$.

Авторы работы [11] увеличивают коэффициент $\bar{b}_* = 0.6$ до значения 1.4 путем увеличения длины экранировки $1/k_s(T_e = 0)$. (См. рис. 1 в [11] по поводу значения $b = 1.4$.) Чем больше длина экранировки, тем больше частота столкновений и коэффициент b (34), поскольку в нашей модели (см. формулы (3), (14), (16)–(18)) рассеяние происходит в основном на длине экранировки. Коэффициенты $b|_{\kappa} = 1.9$ – 2.3 относятся к длине $1/k_s^{TF}(T_e = 0) \approx 0.5 \text{ \AA}$.

В настоящей работе мы выходим за рамки низкотемпературной асимптотики. В наших расчетах используется не параболическая зависимость (34), а формулы (14), (16)–(18), (31). Этот подход справедлив при температурах, составляющих конечную долю от температуры T_F . При этом учитывается температурная зависимость длины $1/k_s^{TF}(T_e)$. Рисунок 8 построен в целях иллюстрации отношения низкотемпературной асимптотики (штриховая парабола) к нашему подходу (сплошная кривая). Зависимость

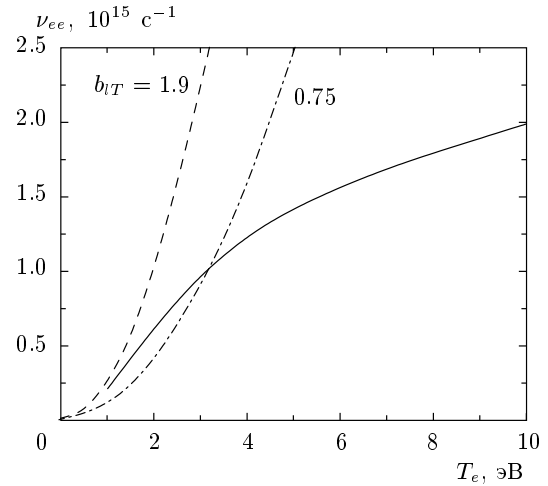


Рис. 8. Низкотемпературная асимптотика (штриховая парабола) описывает лишь область $T_e < 1$ эВ. Переход к уточненному подходу (сплошная кривая) сильно снижает частоту $\nu_{ee}(T_e)$

$$\begin{aligned} \nu_{ee}^c &= (s^{-1} + i^{-1})^{-1}, \\ s [\text{c}^{-1}] &= 0.2474 \cdot 10^{15} T_e^2, \\ i [\text{c}^{-1}] &= 1.15 \cdot 10^{15} T_e^{0.28} \end{aligned} \quad (38)$$

с точностью примерно 1% аппроксимирует расчеты для конденсированной фазы (штриховая парабола и сплошная кривая) на участке температур $0 < T_e < 30$ эВ (в формуле (38) температура T_e дана в электронвольтах). На рис. 8 изображена также штрихпунктирная парабола (34) с уменьшенным значением коэффициента b . Как видим, при нашем подходе рост частоты ν_{ee} с температурой резко замедляется по сравнению с параболической зависимостью.

В связи с обсуждением работы [11] необходимо отметить, что приведенную выше формулу (25) без постоянного члена авторы статьи [11] заимствуют из работы [36]. В условиях работы [36] при малых лазерных энергиях и соответственно небольших нагревах электронов это оправдано (в этой связи см. в конце разд. 6 обсуждение параболической аппроксимации в работе [26], также посвященной малым нагревам). В наших условиях, когда электроны нагреваются до температур порядка T_F , пренебрегать постоянным членом нельзя.

В других предшествующих работах использовались предположительные значения для коэффициента b в выражении (34). В [13] принято $b \approx 1$ для Al, а в [3, 37] $b \approx 6$ – 6.5 для Au. Соответствующее значение $b = 6$ значение B в формуле $\nu = AT_i + BT_e^2$ равно $12 \cdot 10^6 \text{ c}^{-1} \cdot \text{K}^{-2}$ для Au [3, 37]. Полезно сравнить

эти данные с различными экспериментальными значениями B , полученными при $T_e = T_i \approx 10$ К [21].

Проанализируем связь коэффициента b в (34) с постоянными C и β в модели теплопроводности, развитой в работах [12, 37–42]:

$$\kappa = C \frac{(t_e^2 + 0.16)^{5/4} (t_e^2 + 0.44) t_e}{\sqrt{t_e^2 + 0.092}} \frac{1}{t_e^2 + \beta t_i}, \quad (39)$$

где $t_e = T_e/T_F$, $t_i = T_i/T_F$. Комбинация множителей в (39) вместе с первым слагаемым в сумме $t_e^2 + \beta t_i$ формируют степень $5/2$ при переходе к высокотемпературной асимптотике при $t_e \sim 1$. Эта асимптотика соответствует теплопроводности плазмы. Коэффициенты подобраны так, чтобы в разумных пределах расширить участок перехода между низкотемпературным и высокотемпературным участками. К сравнению с нашим подходом мы вернемся ниже. Знаменатель $t_e^2 + \beta t_i$ представляет сумму $\nu = AT_i + BT_e^2$ при низких по сравнению с T_F температурах.

При низких равных температурах $t_e = t_i \ll 1$ формула (39) должна давать справочные значения κ_0 . При этом электрон-электронный член t_e^2 мал по сравнению с электрон-ионным членом βt_i . Отсюда следует первое уравнение

$$\kappa_0 \beta = \frac{0.16^{5/4} 0.44}{0.092^{1/2}} C,$$

необходимое для определения постоянных C и β . Другое уравнение получаем, требуя выхода на асимптотику $\kappa_{ee}|_{IT} \propto 1/T_e$ (32) в случае, когда доминирует e - e -рассеяние. Оно имеет вид

$$\frac{\zeta}{k_B T_F} = \frac{0.16^{5/4} 0.44}{0.092^{1/2}} C.$$

Выразим ζ через b по формулам (32), (33), (34). Имеем

$$\zeta = \frac{2}{5} \frac{\hbar}{m} \frac{G}{k_B} \frac{E_F^2}{b},$$

где коэффициент G определяет линейный ход электронной теплоемкости $c_{eV} = GT_e$ при низких температурах. Исключая ζ из этих уравнений, находим связь между постоянной β модели (39) и коэффициентом b параболы (34):

$$\beta = \frac{\chi}{b}, \quad \chi = \frac{2}{5} \frac{\hbar}{m} \frac{G}{k_B} \frac{E_F}{\kappa_0}.$$

Для коэффициента теплопроводности κ_0 можно брать табличные значения для твердой или жидкой фазы [38]. Для алюминия и золота имеем $\chi_{Al}^{sol} = 2.4$, $\chi_{Au}^{sol} = 0.63$ при $m_{eff} = m_e$, если $\kappa_0 = \kappa^{sol}$ — коэффициент теплопроводности

твердого тела при температуре выше температуры Дебая; $\kappa_{Al}^{sol} = 2.3 \cdot 10^7$ эрг·К⁻¹·см⁻¹·с⁻¹, $\kappa_{Au}^{sol} = 3.1 \cdot 10^7$ эрг·К⁻¹·см⁻¹·с⁻¹. В случае расплава алюминия $\chi_{Al}^{liq} = 6.2$, если за κ_0 взять значение коэффициента теплопроводности расплава при температуре, немного превышающей температуру плавления, $\kappa_{Al}^{liq}(T_m + 0) = 0.9 \cdot 10^7$ эрг·К⁻¹·см⁻¹·с⁻¹. Следовательно, постоянная C в выражении (39) в единицах эрг·К⁻¹·см⁻¹·с⁻¹ равна $C = 6.8 \chi \kappa_0 / b$, $C_{Al}^{sol} = 3.9 \cdot 10^8 / b$, $C_{Au}^{sol} = 1.4 \cdot 10^8 / b$, $C_{Al}^{liq} = 3.9 \cdot 10^8 / b$.

В работе [38] для алюминия было принято $C = 7.7 \cdot 10^7$ эрг·К⁻¹·см⁻¹·с⁻¹, $\beta = 1.2$. Коэффициент κ_0 брался по теплопроводности расплава $\kappa_{Al}^{liq}(T_m + 0)$, где T_m — температура плавления. В этом случае значение b из (34) равно 5.2. В работах [37, 39, 40] $C = 353$ Вт·К⁻¹·м⁻¹, $\beta = 0.16$ для золота. Тогда $b = 3.9$.

Вклад частоты ν_{ee} в диэлектрическую проницаемость ε и коэффициент теплопроводности κ разный. Каждое e - e -столкновение замедляет диффузию тепла, а вот поглощения фотона при таком столкновении может не быть. Соответственно вводят [7, 11, 13] эффективный вес $\xi < 1$, $\nu_{ee}|\varepsilon = \xi \nu_{ee}|\kappa$, $\nu_{ee}|\kappa = \nu_{ee}$, с которым частота ν_{ee} входит в формулу Друде для комплексной проницаемости

$$\varepsilon = 1 + \frac{\omega_{pl}^2}{\omega^2 + \nu^2} \left(1 - \frac{i\nu}{\omega} \right),$$

где $\nu = \nu_{ei} + \nu_{ee}|\varepsilon$, ω — частота лазерного излучения, $\nu_{ee}|\kappa$ — частота ν_{ee} , связанная с коэффициентом теплопроводности формулой (33). Если поглощения фотонов нет, то $\xi = 0$. Имеются два механизма поглощения при столкновении между электронами проводимости и, следовательно, два веса, $\xi_{Umklapp}$ и ξ_{sd} . Первый из них обусловлен эффектом переброса (Umklapp) [7, 11, 13, 18, 19], а второй — столкновениями электронов из разных зон (s - d -рассеяние).

Первый механизм возможен благодаря тому, что волновая функция электрона с импульсом $\hbar k$ является блоховской функцией, а не простой гармоникой с волновым числом k . Вследствие этого часть импульса системы из двух сталкивающихся одинаковых электронов может быть передана в кристаллическую решетку. В неупорядоченной среде (расплавленная решетка, жидкость) нет блоховских функций и, соответственно, нет перебросов. Поглощение по второму механизму имеет место как в кристалле, так и в жидкости, если сталкивающиеся электроны проводимости принадлежат разным зонам. Нас интересует $2T$ -состояния с горячими электронами, $T_e > 1$ –2 эВ. В этом состоянии, как показано выше, частота ν_{ee} велика — ее значения порядка 10^{15} с⁻¹

и больше. Соответственно, энергетические уровни электрона размыты на величину порядка 1 эВ и больше. Это означает, что далекие корреляции, присущие блоховским функциям, утеряны. При этом ионы могут оставаться холодными в узлах периодической решетки.

В работе [7] высказана гипотеза о том, что, во-первых, в состояниях с горячими электронами $\xi_{Umk} \approx 0$ из-за разрушения блоховских функций, причем разрушение вызвано не плавлением, а высокой частотой ν_{ee} . Во-вторых, $\xi_{sd} \neq 0$ в случае золота вследствие роста T_e , освобождения электронных состояний в d -зоне и поглощения фотонов при межзонных e - e -столкновениях. Гипотеза позволяет объяснить происхождение качественной разницы между алюминием и золотом в их отклике на ультракороткое лазерное воздействие (речь идет об отклике по ϵ на стадии 0.1–4 пс после воздействия). Экспериментальные измерения оптических характеристик этих металлов на ранней стадии описаны в статье [7]. Гипотеза существенна, поскольку и в случае с горячими электронами ожидается вклад от перебросов в оптическое поглощение на уровне $\xi_{Umk} = 0.4$ (Al), 0.35 (Au) [11]. Эти цифры следуют из измерений, выполненных при низких (порядка 1 К) температурах.

В конце краткого обзора литературы по учету e - e -столкновений отметим, что в работах [5, 43] эти столкновения не были приняты во внимание: $b = 0$. Между тем без вклада ν_{ee} нельзя достичь предельных частот столкновений, которые составляют долю от атомных частот $\nu \sim E_F/\hbar \sim \omega_{pl} = \sqrt{4\pi n_e e^2/m}$ при $T_e \sim T_F$ в неизотермическом случае ($T_e \gg T_i$). Дело в том, что в интересующих нас условиях в течение промежутка времени 1–10 пс электроны являются горячими, $T_e \sim T_F$, тогда как ионы остаются относительно холодными, $T_i \sim 0.1$ эВ. В таком $2T$ -состоянии вклад ν_{ee} в суммарную частоту столкновений превышает частоту ν_{ei} , связанную с рассеянием электронов на ионах (ср. ниже рис. 11 и 14).

9. ШИРОКОДИАПАЗОННАЯ ТЕПЛОПРОВОДНОСТЬ

Рассмотрим температурные зависимости частоты столкновений и коэффициента теплопроводности однозонного металла при температурах ниже и выше фермиевской температуры $T_F = E_F/k_B$. Сравнение длины экранировки $1/k_s^{TF}(T_e)$, оценки радиуса торможения r_{tp} (turning point) при лобовом столкновении двух электронов, $(3/2)k_B T_e = e^2/r_{tp}$, и дебройлеровской длины волны $r_{dB} = \hbar/\sqrt{m_e k_B T_e}$ показано

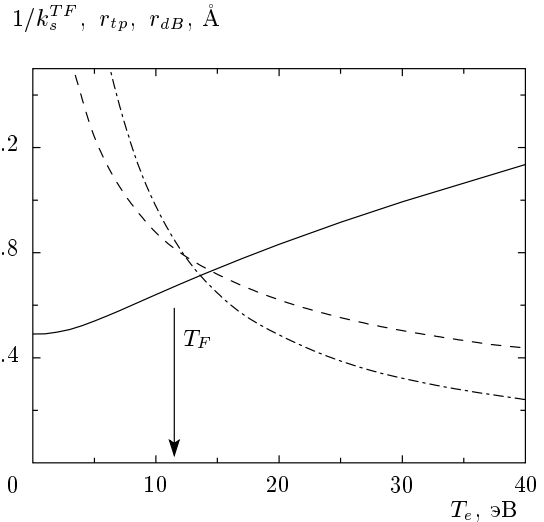


Рис. 9. Сопоставление масштабов, формирующих кулоновский логарифм $\Lambda = \ln[(k_s^{TF})^{-1}/\max\{r_{tp}, r_{dB}\}]$: сплошная кривая — $1/k_s^{TF}$; штриховая — r_{tp} ; штрихпунктирная — r_{dB} . Алюминий, $Z = 3$, $m_{eff} = m_e$

на рис. 9. В нашей модели (формулы (14), (16)–(18), (31)) рассеяние определяется масштабом $1/k_s^{TF}(T_e)$. С другой стороны, для применимости формул классической плазмы необходимо, чтобы отношение масштабов $k_s^{-1}/\max\{r_{tp}, r_{dB}\}$, определяющее кулоновский логарифм, было много больше единицы. Поэтому наша модель применима, пока радиус поворота находится за радиусом экранировки. Как видим, пересечение радиусов происходит при $T_e \sim T_F$.

Выше были представлены подход и расчеты, относящиеся к e - e -столкновениям при $T_e < T_F$. Суммарный коэффициент теплопроводности κ_{sum} необходимо строить с учетом электрон-ионных (e - i) столкновений. Кроме того, при $T_e > T_F$ требуется обеспечить переход к описанию с помощью формул физики плазмы. Предлагаемая широкодиапазонная формула для κ_{sum} составлена из четырех составляющих, $\kappa_{ee}^c, \kappa_{ee}^{pl}, \kappa_{ei}^c, \kappa_{ei}^{pl}$, где индексы «с» и «pl» относятся к конденсированной среде и плазме. Величина κ_{ee}^c вычисляется по формулам (14), (31). Коэффициенты для плазмы находятся из формулы [8, 43–46]

$$\kappa_{sum}^{pl} = \frac{16\sqrt{2}}{\pi^{3/2}} k_Z k_B \frac{(k_B T_e)^{5/2}}{Z m_e^{1/2} e^4 \Lambda}, \quad (40)$$

где Λ — кулоновский логарифм. Чтобы охватить переходный случай $T_e \sim T_F$, $r_D^3 n_e \sim 1$, $r_D = \sqrt{k_B T_e / 4\pi n_e e^2}$ (см. рис. 9), запишем [43]

$$\Lambda = (1/2) \ln[1 + (k_s^{TF} r_{dB})^{-2}]. \quad (41)$$

Коэффициент κ_{sum}^{pl} (40) описывает диффузионный перенос тепла электронами под суммарным действием как $e-i$, так и $e-e$ -столкновений. При $Z \gg 1$ уменьшение диффузии в $e-i$ -столкновениях больше, чем в $e-e$ -столкновениях [45, стр. 145]. При $Z = 1$ положение обратное. Случай алюминия с $Z = 3$ занимает промежуточное положение. Коэффициент k_Z в формуле (40) учитывает уменьшение диффузии из-за $e-e$ -соударений [8]. В книге [45] этот коэффициент обозначен $\delta_T(Z)$. В [8] для алюминия с $Z = 3$ принято $k_Z \approx 0.7$, тогда как в книге [45] коэффициент $\delta_T(3) = 0.45$. Ниже (рис. 14) мы сравним частоту ν_{ee}^{pl} при этих двух значениях k_Z в интересующем нас диапазоне температур T_e порядка T_F . Как будет видно ниже, на частоту ν_{ei}^{pl} величина k_Z не влияет.

Коэффициент κ_{ei}^c берется из справочных данных о кристаллической фазе и из квантовых молекулярно-динамических расчетов [17] (см. работу [7]). В согласии с подходом с пересчетами $\kappa \rightarrow \nu$, $\nu \rightarrow \kappa$ отыскивается эффективная частота $\nu|_{\kappa}$, связанная формулой Друде (33) с данным коэффициентом κ . Четырем коэффициентам теплопроводности κ_{ee}^c , κ_{ee}^{pl} , κ_{ei}^c , κ_{ei}^{pl} соответствуют четыре эффективные частоты ν_{ee}^c , ν_{ee}^{pl} , ν_{ei}^c , ν_{ei}^{pl} . Хорошим примером однозонного металла является алюминий, для которого формулы для ν_{ei}^c имеют вид [7]

$$\begin{aligned} \nu_{ei}^{sol}|^c &= 3.2 \cdot 10^{11} T_i, \\ \nu_{ei}^{liq}|^c &= \frac{0.72 \cdot 10^{14} T_i}{130 + 0.0367 T_i - 66700/T_i}, \end{aligned} \quad (42)$$

где частота ν_{ei}^c выражена в обратных секундах, T_i — в градусах Кельвина. Индекс «sol» относится к твердой фазе, а «liq» — к расплаву. Температура тройной точки для алюминия составляет 934 К. В гидродинамическом $2T$ -расчете [7] формулы (42) соответствуют разным областям фазовой диаграммы. По сравнению с работой [7] первые числовые коэффициенты в выражениях для $\nu_{ei}^{sol}|^c$ и $\nu_{ei}^{liq}|^c$ в (42) изменены в 3/5 раза. Это вызвано тем, что изменено определение средней скорости $\overline{v^2}$ в формуле Друде (33), по которой коэффициент теплопроводности κ переводится в частоту $\nu|_{\kappa}$. Если в [7] $\overline{v^2} = v_F^2$ при $T = +0$, то в данной работе $\overline{v^2} = (3/5) v_F^2$ при $T = +0$ (см. Приложение Е). Формула для ν_{ei}^{sol} (42) соответствует $\kappa_{Al}^{sol} = 2.3 \cdot 10^7$ эрг·К⁻¹·см⁻¹·с⁻¹. Формула для ν_{ei}^{liq} (42) аппроксимирует данные по κ_{ei}^{liq} для расплава, полученные в работе [17] в диапазоне температур $1 \text{ кК} < T < 10 \text{ кК}$ при $T_e = T_i = T$.

При $1 \text{ кК} < (T_e = T_i = T) < 10 \text{ кК}$ электроны остаются сильновырожденными и поэтому $e-i$ -соударения доминируют над $e-e$ -соударениями

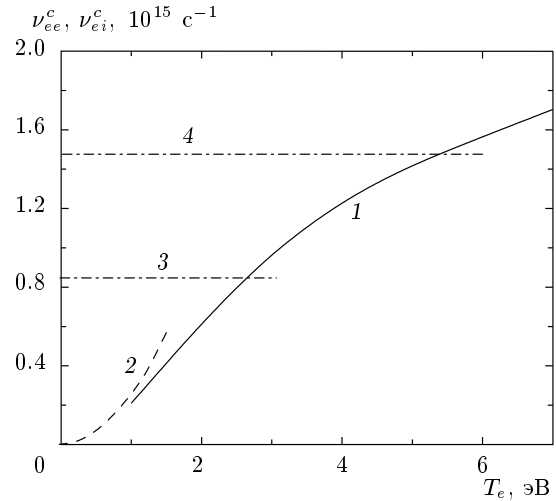


Рис. 10. Соотношения между частотами $\nu_{ee}^c(T_e, T_i) \approx \nu_{ee}^c(T_e)$ и ν_{ee}^c (42) при разных значениях температур T_e и T_i : 1 — ν_{ee}^c (14), (31), (33); 2 — $\nu_{ee}^c|_{iT}$ (34); 3 и 4 — ν_{ei}^c соответственно при $T_i = 2 \text{ кК}$ и $T_i = 10 \text{ кК}$

(рис. 10). Как будет видно ниже, в случае алюминия на интересующем нас участке температур до нескольких десятков электронвольт плазменная асимптотика частоты ν является медленно меняющейся функцией температуры T_e . Это позволяет продлить аппроксимацию (42) до температур $T_i \sim T_F$. При $T_i \approx 3 \text{ эВ}$ частота (42) медленно выходит на значение $2 \cdot 10^{15} \text{ с}^{-1}$.

Широкодиапазонная («WR») зависимость $\nu_{ei}^{WR}(T_e, T_i)$, $T_i \leq T_e$ дается формулой

$$\begin{aligned} \nu_{ei}^{WR} &= [(\nu_{ei}^c)^{-2} + (\nu_{ei}^{pl})^{-2}]^{-1/2}, \\ \nu_{ei}^{pl} &= k_Z c_{eV} \overline{v^2} / 3\kappa_{sum}^{pl}, \end{aligned} \quad (43)$$

где зависимости c_{eV} , $\overline{v^2}$ от температуры T_e приведены в Приложении Е, а функция ν_{ei}^c определена формулами (42). Входящий во второе из выражений (43) коэффициент теплопроводности κ_{sum}^{pl} вычисляется по формуле (40) при $\Lambda = 1$. Как видно из формул (40) и (43), частота ν_{ei}^{pl} не зависит от величины k_Z . В выражении для ν_{ei}^{WR} (43) зависимость от ионной температуры T_i связана с частотой ν_{ei}^c (42), а зависимость от электронной температуры T_e — с ν_{ei}^{pl} .

Функция (43) изображена на рис. 11. Вместе с этой функцией горизонтальными отрезками показана частота ν_{ei}^c (42), а также частоты $e-i$ -столкновений в плазме. Графики последних построены при $\Lambda = 1$ и при Λ (41). При этом зависимость для плазмы с кулоновским логарифмом Λ (41) формально

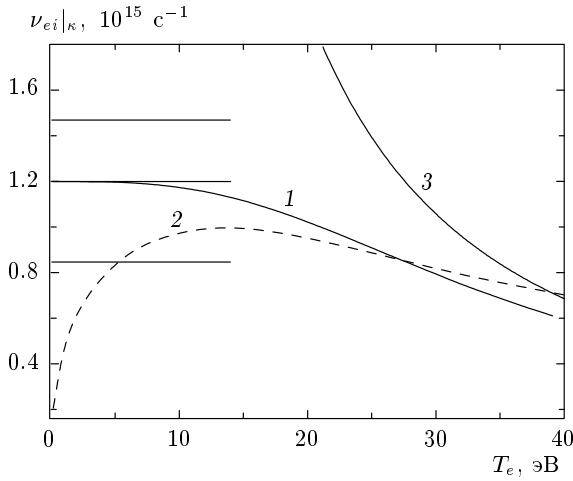


Рис. 11. Широкодиапазонная аппроксимация частоты e - i -столкновений; Al, $Z = 3$, $m_{eff} = m_e$. Частота $\nu_{ei}^{WR}(T_i = 5 \text{ кК}, T_e)$ (кривая 1) монотонно уменьшается с ростом T_e . Только очень далеко по температуре T_e (несколько T_F) ее зависимость от T_e выходит на плазменную зависимость $\nu \propto 1/T_e^{3/2}$. Формулы физики плазмы с классическим кулоновским рассеянием дают большую погрешность на участке температур T_e , на котором частоты ν_{ei}^{pl} с разными кулоновскими логарифмами (Λ (41) — кривая 2 и $\Lambda = 1$ — кривая 3) существенно различаются. Горизонтальные прямые соответствуют ν_{ei}^{liq} при $T_i = 10, 5, 2 \text{ кК}$ (сверху вниз)

продлена в область твердотельной плазмы довольно низкой температуры с $r_D^3 n_e \sim 1$, в которой выполняется $k_s^{TF} r_{dB} \sim 1$. Как видим, аппроксимация (43) плавно переходит с участка низких температур на участок повышенных температур через переходную область с $T_e \sim T_F$.

На рис. 12 и 13 показана зависимость ν_{ei}^{WR} (43) от температур T_e и T_i в изотермическом ($T_i = T_e$) и в неизотермическом ($T_i \neq T_e$) случаях. Как говорилось, широкодиапазонная функция $\nu_{ei}^{WR}(T_i, T_e)$ описывает переход от конденсированной фазы к плазме. В масштабе температур T_e , выбранном на рис. 12, область плавления, соответствующая фазовому переходу твердое тело — жидкость, прижата к вертикальной оси. В другом масштабе этот скачок изображен на рис. 13. Скачок частоты ν_{ei} возникает из-за разупорядочивания кристаллической решетки при плавлении.

В случае e - e -соударений запишем широкодиапазонную зависимость $\nu_{ee}^{WR}(T_e)$ в аналогичном выражению (43) виде:

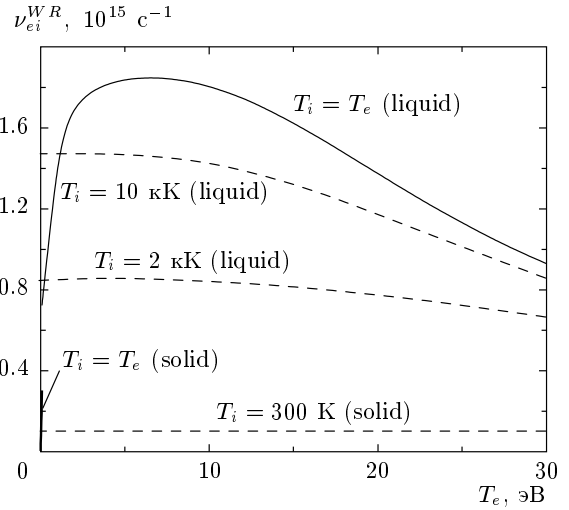


Рис. 12. Частота e - i -столкновений $\nu_{ei}^{WR}(T_i, T_e)$ (43) в изотермическом ($T_i = T_e$) и неизотермическом ($T_i \neq T_e$) случаях; Al, $Z = 3$, $m_{eff} = m_e$. В изотермическом случае имеются левый участок $0.3 \text{ кК} < (T_i = T_e) < 20 \text{ кК}$ быстрого роста частоты ν_{ei}^{WR} из-за ослабления ион-ионных корреляций, средний участок насыщения и правый участок постепенного снижения частоты по формулам для плазмы (40), (43)

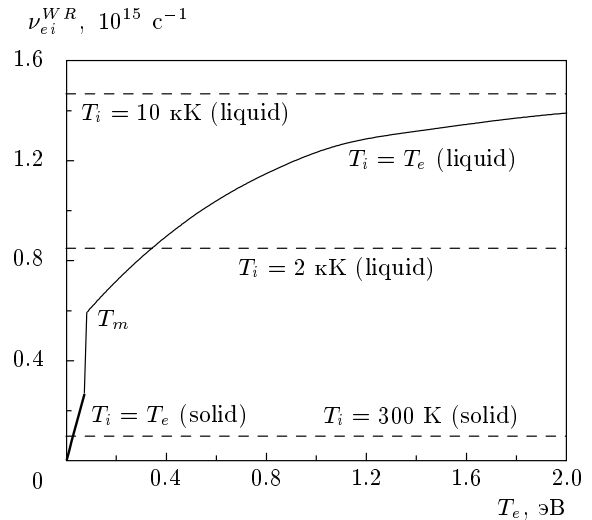


Рис. 13. Увеличение частоты e - i -столкновений при плавлении (T_m — температура плавления)

$$\nu_{ee}^{WR} = [(\nu_{ee}^c)^{-2} + (\nu_{ee}^{pl})^{-2}]^{-1/2}, \quad (44)$$

$$\nu_{ee}^{pl} = (1 - k_Z) c_e v^2 / 3 \kappa_{sum}^{pl},$$

где коэффициент теплопроводности κ_{sum}^{pl} в выражении для ν_{ee}^{pl} вычисляется по формуле (40) с $\Lambda = 1$. График функции $\nu_{ee}^{WR}(T_e)$ (44) показан на рис. 14

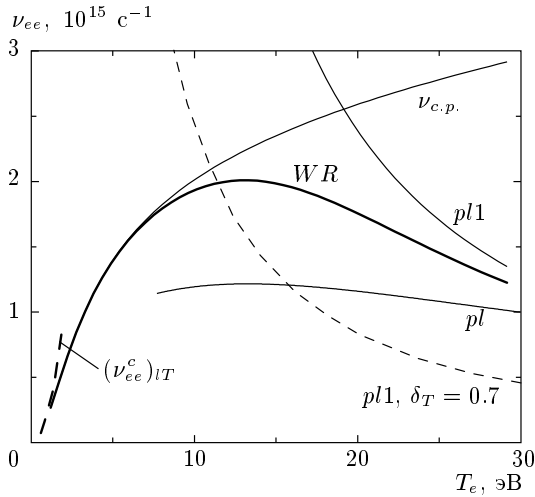


Рис. 14. Температурная зависимость (44) частоты ν_{ee}^{WR} $e-e$ -столкновений (жирная кривая), охватывающая три участка: конденсированной фазы, участок перехода и участок плазмы. Коэффициент B_{iT} соответствует низкотемпературной асимптотике (35)

жирной кривой. Частота ν_{ee}^c для конденсированной фазы (condensed phase, c.p.) составлена из штриховой параболы $(\nu_{ee}^c)_{iT} = B_{iT}T_e^2$ в низкотемпературном пределе и частоты $\nu_{c.p.}$, рассчитанной с помощью формул (14), (31), (33). Зависимости ν_{ee}^{pl} , соответствующие высоким температурам, показаны кривыми $pl1$, pl и $pl1, \delta_T = 0.7$. Обозначения $pl1$ относятся к случаю, когда кулоновский логарифм равен единице, $\Lambda = 1$. В случае плазменной кривой pl логарифм Λ подсчитывается по формуле (41). Сравнивая кривые $pl1$ и $pl1, \delta_T = 0.7$, вычисленные соответственно при $k_Z \equiv \delta_T = 0.45$ и $\delta_T = 0.7$, убеждаемся в существенном влиянии величины δ_T на частоту $e-e$ -столкновений. При этом, как сказано выше, на частоту ν_{ei}^{pl} величина δ_T не влияет. Расчеты, результаты которых приведены на следующих рисунках, выполнены при $\delta_T = 0.45$.

Суммарная частота столкновений складывается из $e-e$ - и $e-i$ -частот

$$\nu_{sum}^{WR}(T_i, T_e) = \nu_{ei}^{WR}(T_i, T_e) + \nu_{ee}^{WR}(T_e). \quad (45)$$

График этой функции в изотермическом $T_i = T_e$ и неизотермическом $T_i \neq T_e$ случаях показан на рис. 15. Графики строились, начиная с $T_e > T_i$. Область плавления, с которой связан скачок частоты на рис. 13, в данном масштабе температуры T_e не видна. Отметим, что на участке $T_e \sim T_F$ частота (45) заметно ниже, чем вычисленная в работе [13].

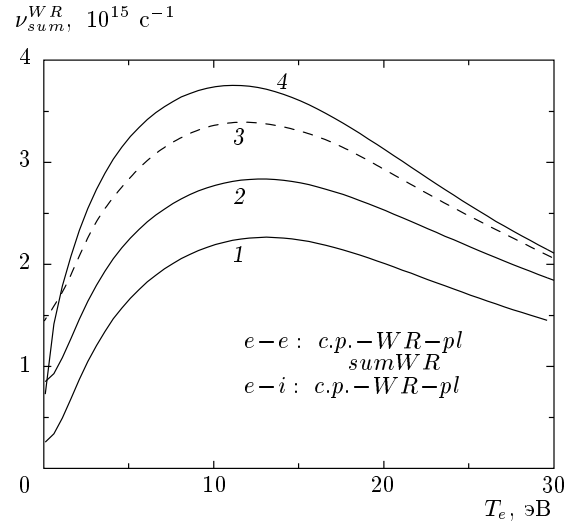


Рис. 15. Суммарная широкодиапазонная частота столкновений $\nu_{sum}^{WR}(T_i, T_e)$ (45) для алюминия: 1 — $T_i = 800$ К; 2 — $T_i = 2$ кК; 3 — $T_i = 10$ кК; 4 — $T_i = T_e$. При высоких температурах ион-ионные корреляции становятся несущественными, поэтому как изотермический ($T_i = T_e$), так и неизотермический ($T_i \neq T_e$) случаи имеют общую высокотемпературную асимптотику. Частоты ν_{ee}^{pl} вычислены при $\delta_T = 0.45$

Максимум частоты ν_{sum}^{WR} (45) в изотермическом случае составляет примерно $0.2\omega_{pl}$, где ω_{pl} — плазменная частота электронов. Это согласуется с работами [8, 47].

По частоте $\nu_{sum}^{WR}(T_i, T_e)$ (45), показанной на рис. 15, вычисляется коэффициент теплопроводности

$$\kappa_{sum}^{WR}(T_i, T_e) = c_{eV} \overline{v^2} / 3\nu_{sum}^{WR} \quad (46)$$

в интересующем нас в связи с лазерными приложениями диапазоне температур, см. рис. 16. Результаты расчета, представленные на рис. 16, легко воспроизвести с помощью простой схемы, выписанной в Приложении Ф. Температурная зависимость κ складывается в результате конкуренции роста с температурой теплоемкости c_{eV} (числитель дроби в (46)) и частоты, стоящей в знаменателе выражения (46). Важность $2T$ -эффектов очевидна из разницы между одотемпературной $\kappa_{sum}^{WR}(T_i = T_e, T_e)$ и двухтемпературной $\kappa_{sum}^{WR}(T_i = 800 \text{ К}, T_e)$ кривыми на рис. 16.

На рис. 16 представлено сравнение расчетного коэффициента теплопроводности κ_{sum}^{WR} (46) с данными широко цитируемой модели проводимости (conducting model) из работы [43]. Для сравнения вы-

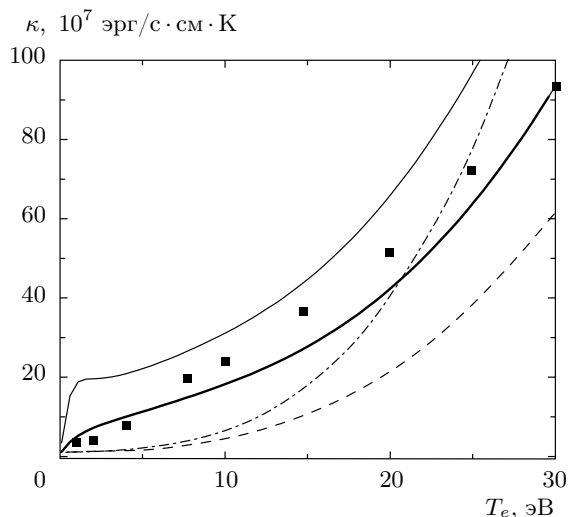


Рис. 16. Сравнение широкодиапазонного коэффициента теплопроводности κ_{sum}^{WR} (45), (46) с полученным в работе [43] и вычисленным по формуле (39) в однотемпературном случае. Зависимость $\kappa_{sum}^{WR}(T_i = T_e, T_e)$ — сплошная жирная кривая; результат изотермической модели [43] — квадраты; расчет по формуле (39) при $T_i = T_e$ при двух крайних значениях коэффициента b изображен штриховой ($b = 5.2$) и штрихпунктирной ($b = 1$) кривыми. При $T_e \sim T_F$ коэффициент κ , найденный в работе [43], заметно больше, что связано с тем, что e - e -столкновения в этой работе не учитывались. Для иллюстрации влияния неизотермичности тонкой сплошной кривой приведен график κ_{sum}^{WR} при $T_i = 800 \text{ K} \ll T_e$

бран подходящий по плотности случай (Al, $\rho = 2.5 \text{ г·см}^{-3}$), показанный на рис. 4 в работе [43]. Модель [43] разработана только для изотермического случая $T_e = T_i$. Кроме того, в ней нет учета вклада e - e -столкновений. Эти недостатки преодолены в нашем подходе.

На рис. 16 показано также сравнение с расчетом по формуле (39) в изотермическом случае. Как видим, эта аппроксимация довольно плохо описывает теплопроводность — при $T \sim T_F$ значения κ по (39) вдвое ниже даже при достаточно малом параметре b . Отметим также, что функция $\kappa(T)$ по (39) слишком медленно нарастает с температурой T при $T \sim 1\text{--}6 \text{ эВ}$.

На рис. 17 величина κ_{sum}^{WR} , рассчитанная по формулам (14), (31), (33), сопоставляется с данными, полученными с помощью других $2T$ -моделей. Как видим, разница между ними велика. Модели работ [7, 11, 13] и формула (39) комбинируют параболу (34) с псевдоплазменной зависимостью

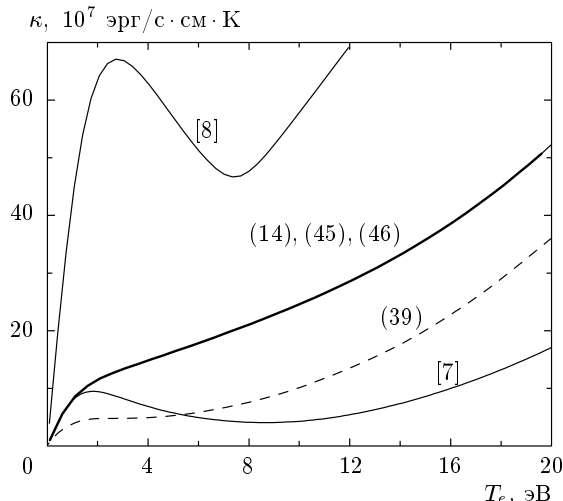


Рис. 17. Сравнение имеющихся на сегодня $2T$ -моделей теплопроводности в неизотермическом случае ($T_i = 2 \text{ кК}$, Al). Если модели работ [7] и [12, 37–42] (формула (39)) занижают κ , то плазменная модель работы [8] завышает κ по сравнению с величиной κ_{sum}^{WR} , рассчитанной нами по формулам (14), (45), (46)

$\nu_{pl} = (E_F/\hbar)(T_e/T_F)^{-3/2}$, в которой только степень (но не коэффициент) заимствована из плазменной формулы. Простое описание расчета из работы [7] приведено в Приложении F. На рис. 17 представлен результат расчета [7] при $b = 1.7$. Коэффициент b определяет крутизну параболы (34). Снижение b в пределах $1.7\text{--}0.3$ уменьшает частоту ν_{ee} (34) и повышает κ в интервале температур $1.5 \text{ эВ} < T_e < 15 \text{ эВ}$. При $b = 1$ зависимости κ [7] и κ_{sum}^{WR} (14) одинаковы на интервале $0 < T_e < 1.5 \text{ эВ}$. Вариация $0.3 < b < 1.7$ в [7, 13] не устраняет немонотонного поведения κ как функции от T_e .

На рис. 17 показана температурная зависимость κ , полученная в работе [7]. Результат работы [13] примерно повторяет эту зависимость при равных значениях b . Модель, аналогичная развитым в работах [7, 13], использована в [11]. Коэффициент теплопроводности (39) на рис. 17 подсчитан при $C = 7.7 \cdot 10^7 \text{ эрг·К}^{-1}\cdot\text{см}^{-1}\cdot\text{с}^{-1}$, $\beta = 1.2$, $b = 5.2$ [38]. Коэффициенты C и b таковы, что в точке плавления $T_e = T_i = T_m = 934 \text{ К}$ теплопроводность (39) равна теплопроводности расплава $C = 0.93 \cdot 10^7 \text{ эрг·К}^{-1}\cdot\text{см}^{-1}\cdot\text{с}^{-1}$. Кривая [8] на рис. 17 построена при рекомендованных авторами параметрах: $k_Z = 0.7$, $k_1 = 0.3$, $k_2 = 0.85$. Относительно методики работы [8] следует отметить, что в ней формула Друде (33) $\kappa = C_e v^2/3\nu$ с

эффективной частотой ν заменена на плазменную формулу $\kappa = 128k_B^2 k_Z n_e T_e / 3\pi m_e \nu$ с эффективной частотой ν . С этим связан крутой рост κ на интервале $0 < T_e < 2$ эВ на кривой [8] на рис. 17, поскольку эффективные частоты моделей работ [7] и [8] примерно одинаковы. Отметим, что из-за крутого роста κ возникает немонотонность.

Подходы работ [7, 8, 11, 13] и предложенный в настоящей работе идут по пути обобщения подхода работы [43] на $2T$ -случай. Методика, использованная в [43], заключалась в создании комбинированной схемы для описания трудной промежуточной области существования вещества с высокой плотностью порядка плотности конденсированной фазы и средней температурой $T \sim T_F$. При этом обеспечивался плавный переход от теплопроводности конденсированной фазы к теплопроводности плазмы. Длина свободного пробега l_e электрона и проводимость в [43] оценивались по приближенной формуле Блоха–Грюнауэна: $l_e = 50aT_m/T$, где a — межатомное расстояние. В [43] учитывался скачок проводимости при плавлении из-за уменьшения длины пробега. Согласно [43], в расплаве длина пробега равна $l_e = 50a(T_m/T)(1/\gamma)$, $\gamma > 1$. Для алюминия коэффициент κ снижается с $2.1 \cdot 10^7$ до $0.93 \cdot 10^7$ эрг·К⁻¹·см⁻¹·с⁻¹ при плавлении: тогда $\gamma = 2.3$. Формула Блоха–Грюнауэна с $l_e = v_F/\nu \propto 1/T$ учитывает только e - i -рассеяния. В $2T$ -случае $\nu_{ei} \propto T_i$ в кристалле в интервале температур от дебаевской до плавления, поскольку в кристаллической решетке частота ν_{ei} пропорциональна квадрату амплитуды тепловых колебаний ионов. На самом деле, в жидкой фазе необходимо заменить линейный рост $\nu_{ei}^{liq} \propto T_i$ гораздо более медленной зависимостью. Это следует из современных квантовых расчетов [17], см. формулу (42).

В работах [7, 8, 11, 13] в рассмотрение включены e - e -столкновения. При этом ожидалось, что частота ν_{ee} будет сильно превышать ν_{ei} около температуры T_F . В работе [43] e - e -столкновения не учитываются. Наши расчеты для случая $Z = 3$ (Al) показывают, что при $T_e \sim T_F$ частоты ν_{ee} и ν_{ei} одного порядка, если исключить низкие температуры ионов $T_i \sim 0.1$ эВ. Температурные зависимости ν_{ee} и ν_{ei} представлены на рис. 12 и 14.

Подходы работ [7, 11, 13] и [8] дают немонотонные зависимости коэффициента теплопроводности от температуры T_e , показанные на рис. 17. Особенно сильным является провал на зависимости $\kappa(T_e)$ в работе [8]. Немонотонность вряд ли соответствует реальной физической ситуации. Другим серьезным преимуществом нашей модели является то, что она

согласуется с признанной моделью [43] в изотермическом случае (см. рис. 16), в то время как модели работ [7, 11, 13] и [12, 37–42] (формула (39)) занижают κ , а работы [8] завышает κ также и в изотермическом случае. Подход работы [43] проверялся путем экспериментов и численного моделирования.

10. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Знания о коэффициенте теплопроводности κ важны для гидродинамического моделирования движения, инициированного воздействием ультракороткого лазерного импульса. Вещество при этом в течение существенного промежутка времени (1–100 пс) находится в двухтемпературном ($2T$) или, как говорят, в неизотермическом состоянии с сильноперегретыми электронами. В работе разработан подход, аккуратно аппроксимирующий κ в широком диапазоне температур T_e, T_i . Аппроксимация основана на расчете частот e - e -столкновений в рамках кинетического уравнения в τ -приближении. Ранее в работах по моделированию использовалась феноменологическая аппроксимация частоты ν_{ee} в виде параболы $B T_e^2$ с плохо определенным коэффициентом B . Простые программы вычислений приведены в Приложениях. Читатель может применить их в своих расчетах теплопроводности.

Наши расчеты ν_{ee} сравниваются, во-первых, с результатами аналитической низкотемпературной теории [21, 24], во-вторых, с экспериментом при низких температурах [21] и, в-третьих, с расчетом пятимерных интегралов методом Монте-Карло [26]. Кроме того, полученные результаты сопоставлены с данными часто применяемой модели проводимости [43]. Разработанный подход позволяет учесть, во-первых, неизотермичность вещества и, во-вторых, e - e -столкновения. Эти важные факторы не включены в модель работы [43].

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 09-08-00969-а).

ПРИЛОЖЕНИЕ А

Нормировка и химический потенциал

Температурная зависимость химического потенциала $\mu(T_e)$ находится из условия нормировки на число электронов в зоне проводимости (см., например, работу [7])

$$Z = a_1 \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{x} dx}{\exp(x - \mu/k_B T_e) + 1},$$

$$a_1 = \frac{\sqrt{2}}{\pi^2} \frac{m_e^{3/2}}{\hbar^3} \frac{(k_B T_e)^{3/2}}{n_{at}}$$

Рассматривается однозонный металл. При $T_e \ll T_F$ и $T_e \gg T_F$ имеем соответственно

$$\mu(0) = \frac{3^{2/3} \pi^{4/3}}{2} \frac{\hbar^2}{m} n_e^{2/3}$$

и

$$\exp\left(\frac{\mu}{k_B T_e}\right) = \frac{\sqrt{2} \pi^{3/2} \hbar^3 n_e}{m_e^{3/2} (k_B T_e)^{3/2}}$$

Представим программу численного нахождения корня $\mu(T_e)$ уравнения

$$\int_0^\infty \frac{\sqrt{x} dx}{\exp(x - \mu/k_B T_e) + 1} = \text{rhs}(T_e),$$

$$\text{rhs}(T_e) = Z a_2, \quad a_2 = 1/a_1$$

с помощью пакета символьческих вычислений Mathematica [48].

```
me=9.109 10^-28; hbar=1.0546 10^-27; kB=1.38 10^-16; nAt=6 10^22; Z=3;
rhs[TeeV_] = Z Pi^2/Sqrt[2] hbar^3/me^(3/2) nAt/(kB 11605 TeeV)^(3/2);
expon = Exp[ x - mueV / TeeV ]; func[ mueV_, TeeV_ ] = Sqrt[ x ]/( expon + 1 )
int[mueV_] = NIntegrate[ func[ mueV, *TeeV* ], { x, 0, Infinity } ]
FindRoot[ int[mueV] == rhs[ *TeeV* ], { mueV, 10 } ]
```

В этой программе в первой строке заданы четыре постоянные задачи в СГС-единицах — масса электрона, перечеркнутая постоянная Планка, константа Больцмана и концентрация атомов на см^3 . Они отделены точкой с запятой, чтобы не высвечивать их тривиальные значения на экране. Знак « \wedge » означает возведение в степень. Приведен пример для алюминия, поэтому $Z = 3$.

Во второй строке выписана формула для правой части rhs уравнения для μ . Pi — число пи в пакете Mathematica, Sqrt[2] — это $\sqrt{2}$. Температура T (TeeV) и химический потенциал μ (mueV) вычисляются в электронвольтах. Поэтому появляется множитель 11605, переводящий электронвольты в градусы Кельвина.

В третьей строке вычисляются составляющие подынтегрального выражения.

В четвертой строке выписан интеграл, образующий левую часть уравнения нормировки. В пакете Mathematica аргументы функций берутся в квадратные скобки: $f(x)$ — это f[x].

Наконец, в пятой строке написана команда (FindRoot), по которой находится корень mueV решаемого уравнения. Левая и правая части решаемого уравнения в пакете Mathematica должны быть разделены двойным знаком равенства (= =). Программа находит значение mueV в зависимости от значения температуры T . В программе это значение подставляется в два места, выделенных с помощью обозначения *TeeV*. Подстановку производят перед пуском программы на расчет корня mueV.

ПРИЛОЖЕНИЕ В

Химический потенциал μ и его производные

Для вычисления коэффициента теплопроводности $\kappa(T_e)$ по формуле (31) необходимо знать температурную зависимость производной $\partial\mu/\partial T$. Приведем программу для пакета Mathematica с расчетом μ'_T (dmudT).

```
mu = ; T = ;
A = 1/( Exp[ K^2 - mu/T ] + 1 );
IA = NIntegrate[ A, { K, 0, Infinity } ];
B = ( 3 K^2 - mu/T )/( Exp[ K^2 - mu/T ] + 1 );
IB = NIntegrate[ B, { K, 0, Infinity } ];
dmudT = - IB/IA
```

Здесь сначала задаются значения μ, T_e . Потом находят вспомогательные интегралы IA, IB и искомая производная.

Для вычисления обратной длины экранировки $k_s = \sqrt{4\pi e^2/\mu'_{ne}}$ требуется функция $\partial\mu/\partial n_e = \mu'_{ne}$. При известных значениях T_e и $\mu(T_e)$ она дается выражением

$$\left(\frac{\partial\mu}{\partial n_e}\right)_T = \frac{\pi^2}{\sqrt{2}} \frac{\hbar^3}{m_e^{3/2} \sqrt{k_B T_e}} \frac{1}{I},$$

$$I = \int_0^\infty \frac{E\sqrt{x}dx}{(E+1)^2}, \quad E = \exp\left(x - \frac{\mu}{T_e}\right),$$

которое получается дифференцированием по n_e левой и правой частей условия нормировки

$$\int \frac{\sqrt{x}}{E+1} dx = \frac{\pi^2}{\sqrt{2}} \frac{\hbar^3}{(m_e k_B T_e)^{3/2}} n_e.$$

При $T_e \ll T_F$ имеем $\partial\mu/\partial n_e = (2/3)\mu(0)/n_e$.

ПРИЛОЖЕНИЕ С

Кулоновская экранировка

Подсчитаем обратную длину экранировки $k_s(T_e)$, входящую через компоненту Фурье $U(q)$ (3) в выражения (14), (16)–(18) для частоты $\nu_{ee}(k_1)$. Будем вычислять $k_s(T_e)$ в приближении Томаса–Ферми. Условие постоянства электрохимического потенциала имеет вид $\delta\mu - e\delta\phi = 0$, где значение заряда электрона e берется по абсолютной величине. Запишем уравнение Пуассона $\Delta(\delta\phi) = 4\pi e \delta n_e$. При этом поправки к химическому потенциалу и концентрации электронов связаны соотношением $\delta\mu = (\partial\mu/\partial n_e)_T \delta n_e$. В силу выписанных соотношений получаем

$$\Delta(\delta\phi) = \frac{4\pi e^2}{(\partial\mu/\partial n_e)_T} \delta n_e.$$

Отсюда находится сферическое решение для потенциала $\delta\phi = (e^2/r) \exp(-k_s r)$ с постоянной экранировки k_s (обратной длиной экранировки) равной

$$k_s = \sqrt{\frac{4\pi e^2}{(\partial\mu/\partial n_e)_T}}.$$

Производная $\partial\mu/\partial n_e$ подсчитана выше. Она возрастает с температурой. Поэтому длина $1/k_s$, за которой кулоновское поле заряда экранируется, увеличивается с ростом T_e .

ПРИЛОЖЕНИЕ D

Расчет теплопроводности

Вычисление теплопроводности осуществляется в два этапа. На первом из них строится зависимость $\nu_{ee}(k_1)$ (14), а на втором вычисляется κ_{ee} по формуле (31). Зададим температуру (например, $T_e = 2$ эВ) и соответствующие ей значения μ (μ), $\partial\mu/\partial T_e$ (μT) и k_s (ks). Они подсчитываются до пуска программы расчета κ_{ee} .

Terg = 2 11605 kB; mu = 11.3323 11605 kB;
muT = -0.315905; ks = 1.1562 kF;
Выпишем набор требуемых постоянных:

hbar = 1.054 10 ^ - 27; me = 9.109 10 ^ - 28;
ee = 4.8 10 ^ - 10; kB = 1.38 10 ^ - 16;
gam = hbar ^ 2 / (2 me); EFerg = 11.6438 11605 kB;
kF = Sqrt[EFerg / gam];

Для упрощения формул используем следующие сокращенные обозначения для экспонент:

eps1 = gam k12; eps2 = gam k22;
e1 = Exp[(eps1 - mu) / Terg];
e2 = Exp[(eps2 - mu) / Terg];
eA = Exp[A / Terg]; eB = Exp[B / Terg];

Введем вспомогательные обозначения для формирования (s=M L[A,B]) проинтегрированного статистического фактора (11):

M = (1 + e1) / (1 + e2) e2 / (1 - e1 e2);
L[A_, B_] = Log[(e1 + eB) / (e1 + eA) (1 + eA e2) / (1 + eB e2)];

Зададим пределы интегрирования $\alpha', \alpha'', \beta', \beta''$ (as, ass, bs, bss) по α ; они нужны для расчета подынтегральных выражений (16)–(18):

bs = gam (q ^ 2 - 2 k2 q);
bss = gam (q ^ 2 + 2 k2 q);
as = - gam (2 k1 q + q ^ 2);
ass = gam (2 k1 q - q ^ 2);

Зададим пределы интегрирования по k_2 . Они потребуются при интегрировании (16)–(18). Пределы G1, G2, G3 соответствуют границам 1, 2, 3 на рис. 3:

G1 = k1 - q; G2 = - k1 + q; G3 = k1 + q;

Пусть St есть множитель, входящий в интегралы (16)–(18):

St = k2 / (q ^ 2 + ks ^ 2) ^ 2;

Тогда подынтегральные функции UIa, UIb, UId интегралов (16)–(18) равны

UIa = St M L[bs, ass];
UIb = St M L[as, ass]; UId = St M L[bs, bss];

Вместо бесконечного предела (Infinity в пакете Mathematica) используем достаточно большой конечный предел

Inf = 5 kF;

Конкретное значение зависит от температуры T_e — чем больше T_e , тем больше должен быть предел из-за уширения фермиевского распределения по T_e .

Искомые интегралы равны

Ia1 = NIntegrate[UIa, {q, 0, k1}, {k2, G1, G3}]
Ia2 = NIntegrate[UIa, {q, k1, Inf}, {k2, G2, G3}]
Ib = NIntegrate[UIb, {q, 0, Inf}, {k2, G3, Inf}]
Id = NIntegrate[UId, {q, 0, k1}, {k2, 0, G1}]

Для перехода от интегралов Ia–Id к частоте ν_{ee} потребуются постоянные множители

F = (4 Pi ee ^ 2) ^ 2 Terg;
xi = 1 / (2 (2 Pi) ^ 3 hbar gam ^ 2 k1);

Тогда частота $\nu_{ee}(k_1; T_e)$ равна

NUeeK1 = xi F (Ia1 + Ia2 + Ib + Id);

На этом этап 1 заканчивается. С помощью команды Plot[NUeeK1, k1, a, b] можно построить график зависимости $\nu_{ee}(k_1; T_e)$ от k_1 при фиксированном значении T_e в пределах по k_1 от а до b. Команда Table [] позволяет оцифровать функцию $\nu_{ee}(k_1; T_e)$ от k_1 для построения графика в другой графической системе, например, Grapher. Пример показан на рис. 3.

На этапе 2 вычисляется κ_{ee} (31). Введем вспомогательные обозначения

$$\begin{aligned} kvSk &= \mu T + (\text{eps1} - \mu) / \text{Terg}; \\ v2 &= \text{hbar}^2 k1^2 / me^2; \end{aligned}$$

Подынтегральное выражение равно

$$\text{Каппа} = 1/3 (\text{eps1} - \mu) (e1 / \text{Terg}) / (1 + e1)^2 kvSk v2 / NUeeK1 k1^2 / \text{Pi}^2;$$

Наконец, коэффициент κ_{ee} равен

$$\text{каппа} = kB N \text{Integrate}[\text{Каппа}, k1, 0.2 kF, \text{Inf}]$$

Чтобы получить температурную зависимость κ_{ee} (см. рис. 7), необходимо накопить серию значений κ_{ee} для серии температур.

ПРИЛОЖЕНИЕ Е

Расчет эффективной частоты

Для вычисления эффективной частоты $\nu_{ee}(T_e) = c_{eV} \overline{v^2} / 3\kappa_{ee}$ требуются температурные зависимости c_{eV} и $\overline{v^2}$. Они находятся с помощью программ для c_{eV} и $\overline{v^2}$.

Задание температуры и величин μ и $\partial\mu/\partial T_e$:

$$\begin{aligned} \text{Terg} &= 20 \text{ 11605 kB}; \mu = -19.6076 \text{ 11605 kB}; \mu T \\ &= -2.65567; \end{aligned}$$

Необходимые постоянные:

$$\text{hbar} = ; me = ; kB = ; nAt = ; Z = ;$$

Вспомогательные переменные:

$$\begin{aligned} e &= \text{Exp}[(\text{eps} - \mu) / \text{Terg}]; \\ ex &= \text{Exp}[x - \mu / \text{Terg}]; \end{aligned}$$

Подсчет коэффициента перед интегралом:

$$\text{коэф} = kB 2 / (\text{Sqrt}[2] \text{Pi}^2) me^{(3/2)} / \text{hbar}^3;$$

Определение электронной теплоемкости:

$$\begin{aligned} cv &= \text{коэф} / 2 \text{Terg}^{(3/2)} \\ N \text{Integrate}[1 / (ex + 1) \\ & (5x - 3 \mu / \text{Terg} + 3 \mu T) x^{(1/2)}, \\ & \{x, 0, 500\}] \end{aligned}$$

График $c_{eV}(T_e)$ вместе со сравнением с аппроксимацией $c_{eV} \approx 1 / \sqrt{1/c_{deg}^2 + 1/c_{class}^2}$ приведен на рис. 18. Здесь $c_{deg} = (\pi^2 Z n_{at} k_B^2 / 2 E_F) T_e$ и $c_{class} = Z(3/2) k_B n_{at}$ — теплоемкости вырожденного и классического электронных газов. Как видим, указанная простая аппроксимация является достаточно точной.

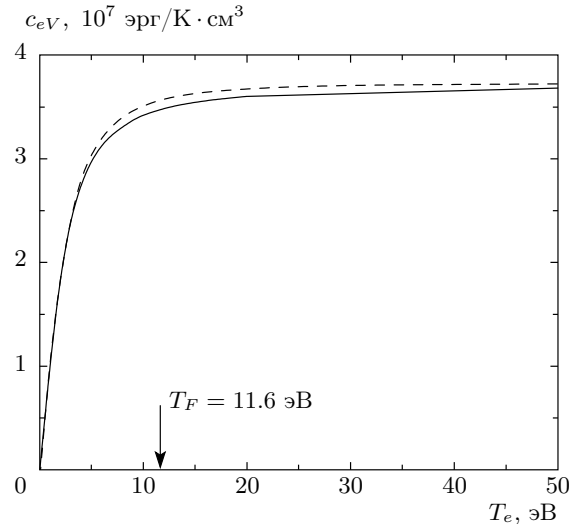


Рис. 18. Рост и насыщение роста теплоемкости c_{eV} по мере увеличения температуры относительно температуры T_F , связанной с энергией Ферми: сплошная кривая — точный расчет; штриховая — аппроксимация

Аналогичная программа применяется для подсчета $\overline{v^2}$:

$$\begin{aligned} \text{Terg} &= 3 \text{ 11605 kB}; \mu = 10.9165 \text{ 11605 kB}; \\ \text{hbar} &= ; me = ; kB = ; nAt = ; Z = ; \\ ex &= \text{Exp}[x - \mu / \text{Terg}]; \\ \text{coeff} &= 2 \text{Sqrt}[2] / \text{Pi}^2 \text{Sqrt}[me] / (Z nAt) / \text{hbar}^3; \\ v2 &= \text{coeff} \text{Terg}^{(5/2)} N \text{Integrate}[1 / (ex + 1) \\ & x^{(3/2)}, \{x, 0, \text{Infinity}\}] \end{aligned}$$

Программа вычисляет $\overline{v^2}$ по заданным в электронвольтах величинам T_e и $\mu(T_e)$ в соответствии с формулой

$$\overline{v^2} = \frac{2\sqrt{2}}{\pi^2} \frac{\sqrt{m_e}}{Z n_{at} \hbar^3} \int_0^\infty \frac{\epsilon^{3/2} d\epsilon}{\exp[(\epsilon - \mu) / T_e] + 1}.$$

На рис. 19 показаны результаты вычисления и сравнение с аппроксимацией

$$\overline{v^2}_{appr} = \sqrt{\left(\frac{6 E_F}{5 m_e}\right)^2 + \left(\frac{3 k_B T_e}{m_e}\right)^2}.$$

Величина $m_e \overline{v^2} / 2$ есть средняя кинетическая энергия электрона.

ПРИЛОЖЕНИЕ F

Быстрый расчет 2T-теплопроводности

Приведем вкратце схему расчета по модели работы [7]. Результат показан на рис. 17. Шаг 1: берем

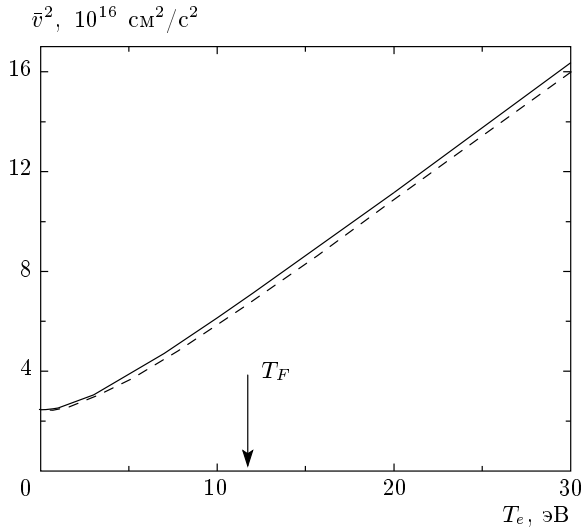


Рис. 19. Рост среднего квадрата скорости электронов по мере снятия вырождения: сплошная кривая — точный расчет; штриховая — аппроксимация

частоту $\nu_{ei}^{sol,liq}$ (42). Шаг 2: складываем ее с параболой ν_{ee} (34). Получаем $\nu_{deg}^{sol,liq} = \nu_{ei}^{sol,liq} + \nu_{ee}$. Шаг 3: формируем широкодиапазонную аппроксимацию

$$\nu_{WR}^{sol,liq} = [(\nu_{deg}^{sol,liq})^{-2} + \nu_{pl}^{-2}]^{-1/2},$$

$$\nu_{pl} = (E_F/\hbar)(T_e/T_F)^{-3/2}.$$

Шаг 4: находим коэффициент теплопроводности

$$\kappa_{WR}^{sol,liq} = \frac{1}{3} \frac{C_e \overline{v^2}}{\nu_{WR}^{sol,liq}},$$

изображенный на рис. 17.

Модель данной работы (формулы (14), (31), (33)) отличается от схемы работы [7] тремя обстоятельствами. Во-первых, парабола ν_{ee} (34) заменена на зависимость (38), найденную из кинетического уравнения. Во-вторых, вместо качественной формулы $\nu_{pl} = (E_F/\hbar)(T_e/T_F)^{-3/2}$ берется выражение (40) из работ [44, 45]. В-третьих, выражение (40) с помощью формулы Друде и важного коэффициента δ_T [44, 45] разбивается на парциальные вклады ν_{ei}^{pl} (43) и ν_{ee}^{pl} (44). Как говорилось в связи с формулой (40), коэффициент δ_T характеризует вклад e - e -столкновений в теплопроводность. В работе [8] он обозначен k_Z .

Для каждого из этих вкладов по отдельности строятся широкодиапазонные выражения (43) для ν_{ei}^{WR} и (44) для ν_{ee}^{WR} . Создание из низкотемпературной и высокотемпературной формул для частот

e - i - и e - e -столкновений широкодиапазонных выражений проиллюстрировано на схеме на рис. 15. К e - e на этой схеме относится верхняя строка, а к e - i — нижняя. Далее частоты ν_{ei}^{WR} и ν_{ee}^{WR} складываются (45). Таким образом приходим к суммарной частоте столкновений ν_{sum}^{WR} , показанной посередине между строками e - e и e - i на рис. 15. В завершение расчета по формуле Друде (46) определяется суммарный широкодиапазонный коэффициент теплопроводности, представленный на рис. 16 и 17.

ЛИТЕРАТУРА

1. С. И. Анисимов, Б. Л. Капелиович, Т. Л. Перельман, ЖЭТФ **66**, 776 (1974).
2. P. V. Allen, Phys. Rev. Lett. **59**, 1460 (1987).
3. X. Y. Wang, D. M. Riffe, Y. S. Lee, and M. C. Downer, Phys. Rev. B **50**, 8016 (1994).
4. Н. А. Иногамов, В. В. Жаховский, С. И. Ашитков и др., ЖЭТФ **134**, 5 (2008).
5. K. Eidmann, J. Meyer-ter-Vehn, T. Schlegel, and S. Hueller, Phys. Rev. E **62**, 1202 (2000).
6. Zh. Lin, L. V. Zhigilei, and V. Celli, Phys. Rev. B **77**, 075133 (2008).
7. N. A. Inogamov, V. V. Zhakhovskii, S. I. Ashitkov et al., Appl. Surf. Sci. **255**, 9712 (2009); arXiv:0812.2965 [physics.optics].
8. М. Б. Агранат, Н. Е. Андреев, С. И. Ашитков и др., Письма в ЖЭТФ **85**, 328 (2007).
9. V. V. Zhakhovskii, N. A. Inogamov, Yu. V. Petrov et al., Appl. Surf. Sci. **255**, 9592 (2009).
10. M. E. Povarnitsyn, K. V. Khishchenko, and P. R. Levashov, Appl. Surf. Sci. **255**, 5120 (2009).
11. J. P. Colombier, P. Combis, E. Audouard, and R. Stoian, Phys. Rev. E **77**, 036409 (2008).
12. S. Amoroso, R. Bruzzese, X. Wang et al., J. Phys. D **40**, 331 (2007).
13. D. Fisher, M. Fraenkel, Z. Henis et al., Phys. Rev. E **65**, 016409 (2001).
14. F. Vidal, T. W. Johnston, S. Laville et al., Phys. Rev. Lett. **86**, 2573 (2001).
15. М. И. Каганов, И. М. Лифшиц, Л. В. Танатаров, ЖЭТФ **31**, 232 (1956).
16. А. В. Ланкин, И. В. Морозов, Г. Э. Норман, И. Ю. Скобелев, ЖЭТФ **133**, 701 (2008).

17. V. Recoules and J.-P. Crocombette, *Phys. Rev. B* **72**, 104202 (2005).
18. А. А. Абрикосов, *Основы теории металлов*, Наука, Москва (1987).
19. Н. Ашкрофт, Н. Мермин, *Физика твердого тела*, Мир, Москва (1979).
20. Y. Z. Hou and J. F. Kos, *J. Phys.: Condens. Matter* **5**, 7797 (1993).
21. V. A. Gasparov and R. Huguenin, *Adv. Phys.* **42**, 393 (1993).
22. E. V. Bezuglyi, N. G. Burma, E. Yu. Deyneka, A. I. Kopeliovich, and V. D. Fil', *J. Low Temp. Phys.* **91**, 179 (1993).
23. W. E. Lawrence and J. W. Wilkins, *Phys. Rev. B* **7**, 2317 (1973).
24. W. E. Lawrence, *Phys. Rev. B* **13**, 5316 (1976).
25. O. K. Wagner and R. Bowers, *Adv. Phys.* **27**, 651, (1978).
26. A. V. Lugovskoy and I. Bray, *Phys. Rev. B* **60**, 3279 (1999).
27. Ф. Блатт, *Физика электронной проводимости в твердых телах*, Мир, Москва (1971).
28. V. Recoules, J. Clerouin, G. Zerah et al., *Phys. Rev. Lett.* **96**, 055503 (2006).
29. P. B. Johnson and R. W. Christy, *Phys. Rev. B* **6**, 4370 (1972).
30. N. E. Christensen and B. O. Seraphin, *Phys. Rev. B* **4**, 3321 (1971).
31. P. Winsemius, M. Guerrisi, and R. Rosei, *Phys. Rev. B* **12**, 4570 (1975).
32. *Handbook of Optical Constants of Solids III*, Vol. 1, ed. by E. D. Palik, Acad. Press, New York (1998).
33. T. Ao, Y. Ping, K. Widmann et al., *Phys. Rev. Lett.* **96**, 055001 (2006).
34. Y. Ping, D. Hanson, I. Koslow et al., *Phys. Rev. Lett.* **96**, 255003 (2006).
35. K. Widmann, T. Ao, M. E. Foord et al., *Phys. Rev. Lett.* **92**, 125002 (2004).
36. C. Voisin, D. Christofilos, P. A. Loukakos et al., *Phys. Rev. B* **69**, 195416 (2004).
37. D. S. Ivanov and L. V. Zhigilei, *Phys. Rev. B* **68**, 064114 (2003).
38. С. И. Анисимов, В. В. Жаховский, Н. А. Иногамов и др., *ЖЭТФ* **130**, 212 (2006).
39. S. I. Anisimov and B. Rethfeld, *Proc. SPIE* **3093**, 192 (1997).
40. J. K. Chen and J. E. Beraun, *J. Opt. A* **5**, 168 (2003).
41. С. И. Анисимов, В. В. Жаховский, Н. А. Иногамов и др., *Матем. моделирование* **18**(8), 111 (2006).
42. S. I. Anisimov, N. A. Inogamov, Yu. V. Petrov et al., *Springer Series in Opt. Sci.* **129**, 1 (2007).
43. Y. T. Lee and R. M. More, *Phys. Fluids* **27**, 1273 (1984).
44. L. Spitzer and R. Harm, *Phys. Rev.* **89**, 977 (1953).
45. L. Spitzer, *Physics of Fully Ionized Gases*, Intersci. Publ. New York (1962).
46. В. П. Силин, А. А. Рухадзе, *Электромагнитные свойства плазмы и плазмоподобных сред*, Атомиздат, Москва (1961).
47. И. Т. Якубов, *УФН* **163**(5), 35 (1993).
48. <http://www.wolfram.com>.