Письма в ЖЭТФ, том 48, вып. 9, стр. 508 – 510 *10 ноября 1988 г.*

РАСПРОСТРАНЕНИЕ ФОНОНОВ В КРИСТАЛЛАХ, СОДЕРЖАЩИХ АНИЗОТРОПНЫЕ ЦЕНТРЫ РЕЗОНАНСНОГО РАССЕЯНИЯ

К.Л.Аминов, Б.З.Малкин

Получено решение кинетических уравнений в отсутствие спектральной диффузии, описывающее распространение неравновесных фононов по закону $r \sim t^{2/3}$.

Рассмотренная в настоящей статье задача связана с развитием фононной спектроскопии парамагнитных кристаллов, использующей методы селективного детектирования неравновесных фононов.

Допустим, что кристалл содержит примесные электронные двухуровневые центры со спектральной плотностью $\delta N(\omega)$ разности заселенностей (на единицу объема) основного $(|1\rangle)$ и возбужденного $(|2\rangle)$ состояний. Гамильтониан взаимодействия центра с акустическими фононами можно записать в виде $\mathcal{H} = \sum_{\lambda\Gamma} V_\lambda(\Gamma) e_\lambda(\Gamma)$, где $V_\lambda(\Gamma)$ – операторы, определенные в пространстве состояний центра, $e_\lambda(\Gamma)$ – линейные комбинации из компонент тензора динамической деформации $e_{\alpha\beta}$, преобразующиеся по строке λ неприводимого представления Γ точечной группы симметрии центра. Время жизни фонона с волновым вектором $\mathbf{q}$ и частотой $\omega_j(\mathbf{q})$ (j – номер ветви колебательного спектра), определяемое резонансным поглощением электронными центрами, равно $\tau_{j\mathbf{q}} = (\delta N^0(\omega_j(\mathbf{q}))W_j(\mathbf{q}))^{-1}$, где δN^0 – равновесная спектральная плотность разности заселенностей и

$$W_j(\mathbf{q}) = \sum_{\lambda\Gamma} \frac{\pi\omega_j(\mathbf{q})}{\hbar\rho v_{j\mathbf{q}}^2} |\langle 1|V_\lambda(\Gamma)|2\rangle|^2 f^j_{\lambda\Gamma}(\mathbf{q}/q) ,$$

здесь ρ – плотность кристалла, $v_{j\mathbf{q}}$ – скорость фонона, $f^j_{\lambda\Gamma}$ – квадрат билинейной формы из направляющих косинусов вектора поляризации и волнового вектора фонона. В случае малой скорости фазовой релаксации и при сильном неоднородном уширении электронного перехода (ширина линии $\Delta\omega \gg \tau_{j\mathbf{q}}^{-1}$ при достаточно малой концентрации рассеивающих центров) линеаризованные кинетические уравнения относительно отклонений чисел заполнения фононов $\Delta n_{j\mathbf{q}} = n_{j\mathbf{q}} - n^0_{j\mathbf{q}}$ и спектральной плотности возбуждений центров $\Delta N(\omega) = \delta N^0(\omega) - \delta N(\omega)$ от соответствующих равновесных значений имеют вид [1]

$$\frac{\partial \Delta n_{j\mathbf{q}}}{\partial t} + \mathbf{v}_{j\mathbf{q}} \nabla(\Delta n_{j\mathbf{q}}) = -\tau_{j\mathbf{q}}^{-1}\left(\Delta n_{j\mathbf{q}} - \frac{\langle\tau(\omega)\rangle}{\tau}\frac{\Delta N(\omega)}{2\rho_0}\right), \quad (1)$$

$$\frac{\partial \Delta N(\omega)}{\partial t} = -\frac{1}{\tau}\Delta N(\omega) + 2\sum_j \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3}\delta(\omega - \omega_j(\mathbf{q}))\frac{\Delta n_{j\mathbf{q}}}{\tau_{j\mathbf{q}}}, \quad (2)$$

где $\rho_0 = \sum_j \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3}\delta(\omega - \omega_j(\mathbf{q}))$ – плотность состояний решетки на единицу объема на единичный интервал частот, τ – время жизни электронного возбуждения, $\langle\tau(\omega)\rangle$ – среднее время жизни фононов с частотой ω:

$$\frac{1}{\langle\tau(\omega)\rangle} = \frac{1}{\rho_0}\sum_j \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3}\frac{1}{\tau_{j\mathbf{q}}}\delta(\omega - \omega_j(\mathbf{q})).$$

На временах $t \gg \tau_{j\mathbf{q}}$, когда фононная подсистема приходит в состояние равновесия с электронной подсистемой, пространственные фурье-образы переменных $\Delta n_{j\mathbf{q}}(\mathbf{r},t)$, $\Delta N(\omega, \mathbf{r}, t)$ в соответствии с уравнением (1) связаны соотношением

$$\Delta n_{j\mathbf{q}}(\mathbf{k},t) = (1 + i\tau_{j\mathbf{q}}\mathbf{k}\,\mathbf{v}_{j\mathbf{q}})^{-1}\,\frac{\langle\tau(\omega)\rangle}{\tau}\,\frac{\Delta N(\omega,\mathbf{k},t)}{2\rho_0}\,. \tag{3}$$

Полное число возбуждений со спектральной плотностью (на единицу объема) $J(\omega) = \frac{1}{2}\Delta N(\omega) + \sum_j \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3}\,\delta(\omega - \omega_j(\mathbf{q}))\Delta n_{j\mathbf{q}}$ остается постоянным; подстановка в закон сохранения в дифференциальной форме выражения (3) дает уравнение переноса (при $\mathbf{k} \to 0$; плотность потока возбуждений определяется дрейфом фононов):

$$\frac{\partial\Delta N(\omega,\mathbf{k},t)}{\partial t} + \left(1 + \frac{\tau}{\langle\tau(\omega)\rangle}\right)^{-1} A(\mathbf{k})\,\Delta N(\omega,\mathbf{k},t) = 0, \tag{4}$$

где

$$A(\mathbf{k}) = \frac{1}{\rho_0}\sum_j \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3}\,\delta(\omega - \omega_j(\mathbf{q}))\,\frac{\tau_{j\mathbf{q}}^{-1}(\mathbf{k}\cdot\mathbf{v}_{j\mathbf{q}})^2}{\tau_{j\mathbf{q}}^{-2} + (\mathbf{k}\cdot\mathbf{v}_{j\mathbf{q}})^2}\,. \tag{5}$$

Характер поведения $A(\mathbf{k})$ при $\mathbf{k} \to 0$ (интересующий нас пространственный масштаб $L \sim \frac{1}{k} \gg v_{j\mathbf{q}}\tau_{j\mathbf{q}}$) существенно зависит от вида $\tau_{j\mathbf{q}}$, как функции направления волнового вектора фонона. В зависимости от симметрии решетки и центра рассеяния и от типа перехода функция $f^j_{\lambda\Gamma}(\mathbf{q}/q)$ (см. выше) может быть постоянной *(а)*, обращаться в нуль на линии *(б)*, либо в отдельных точках *(в)* на сфере с центром в начале координат в q-пространстве. Только в первом случае ($\tau_{j\mathbf{q}}^{-1} > 0$) асимптотическое разложение $A(\mathbf{k})$ начинается с квадратичной формы из компонент вектора $\mathbf{k}$, что соответствует диффузионному режиму распространения неравновесных фононов [1, 2]. В случае *(в)* главный член разложения $A(\mathbf{k})$ пропорционален $k^2\ln k$. Наиболее быстрый режим распространения ("нелокальный" процесс переноса [3] имеет место в наиболее общем случае *(б)*, когда разложение $A(\mathbf{k})$ представляется рядом по степеням $k^{1/2}$, и главный член ряда равен $A(\mathbf{k}) \sim F(\theta_k, \varphi_k)k^{3/2}$, где k, θ_k, φ_k – сферические координаты вектора $\mathbf{k}$. В качестве примера приведем явный вид функции $F(\theta_k, \varphi_k)$ при резонансном рассеянии продольных фононов (рассматриваемых в приближении изотропной среды) на синглет-дублетном переходе некрамерсовых парамагнитных ионов в кристаллическом поле тетрагональной симметрии (переходы индуцируются деформациями e_{xz}, e_{yz}, oz – ось симметрии):

$$A(\mathbf{k}) \approx \frac{(\Gamma(1/4))^2}{6\sqrt{30\pi}}\,|\sin\theta_k|^{3/2}\,(v_l k)^{3/2}\,\langle\tau(\omega)\rangle^{1/2}\,.$$

Масштаб пространственного распределения неравновесных фононов увеличивается со временем как $t^{2/3}$ вместо закона $t^{1/2}$ при обычной диффузии. Характеристическое время процесса пропорционально корню квадратному из концентрации рассеивающих центров, тогда как в случае диффузии имеет место прямая пропорциональная зависимость. Возможно, рассмотренные эффекты, обусловленные анизотропией резонансного рассеяния, предопределяют те особенности распространения неравновесных фононов и кинетики люминесценции в активных объемах рубина и александрита в зависимости от концентрации возбужденных ионов хрома, о которых сообщалось в работах [4, 5].

Авторы благодарны А.П.Абрамову, И.Н.Абрамовой, И.Я.Герловину, И.К.Разумовой за ознакомление с экспериментальными данными, стимулировавшими данную работу, и И.Б.Левинсону за обсуждения и полезные замечания.

Литература

1. *Левинсон И.Б.* ЖЭТФ, 1978, **75**, 234.
2. *Малышев В.А., Шехтман В.Л.* ФТТ, 1978, **20**, 2915.
3. *Levinson Y.B.* Sol. St. Comm., 1980, **36**, 73.
4. *Kaplyanskii A.A., Basoon S.A., Shekhtman V.L.* Light scattering in solids. Ed. J. Birman, H.Cummins, K.Rebane . N.Y. 1979, p. 95.
5. *Majetich S., Rives J., Meltzner R.S.* Phonon scattering in condensed matter 5. Proc. 5 Int. Conf., N.Y. 1986, p. 338.

Казанский государственный университет
им. В.И.Ульянова-Ленина

Поступила в редакцию
7 октября 1988 г.