УДК 538.9

А. М. Никифоров

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ РЕЛАКСАЦИИ В ФОНОННОМ СПЕКТРЕ ДИЭЛЕКТРИКОВ

Рассмотрена задача теоретического определения характера зависимости времени жизни фононов в диэлектриках от их типа и температуры кристаллической решетки. Получены общие выражения, определяющие при конечных температурах одночастичную функцию Грина фонона с учетом трех- и четырехфононных процессов для различных типов аппроксимации массового оператора, которые при детализации силовых тензоров третьего и четвертого порядков позволяют провести численные оценки времени жизни фононов и перенормировать их энергетический спектр. В расчетах использовалась диаграммная техника при конечных температурах.

E-mail: NikaHV@yandex.ru

Ключевые слова: фонон-фононное взаимодействие, функция Грина, массовый оператор, фононный спектр, время релаксации.

Механизмы установления равновесия в возмущенном фононном спектре уже несколько десятилетий привлекают внимание исследователей. В последнее время интерес к этому направлению заметно возрос в связи с активным изучением с помощью гиперзвуковых волн свойств кристаллов [1, 2], определением зависимостей их кинетических коэффициентов от степени изотопического беспорядка [3], а также исследованием особенностей систем, состоящих из малого числа частиц (главным образом углеродных нанотрубок) [4–7]. Учет влияния разогрева решетки на интенсивность взаимодействия элементарных возбуждений с фононами также требует привлечения представлений о релаксации слабо возмущенного фононного спектра.

Данная задача представляет интерес в связи с проблемой определения пороговых интенсивностей лазерного пробоя прозрачных твердых диэлектриков, что обусловлено следующими причинами. В электрон-фонон-фотонных столкновениях преимущественно участвуют фононы с большими квазиимпульсами, что необходимо для выполнения законов сохранения энергии и импульса. Это справедливо по крайней мере в примитивной модели параболической зоны проводимости, широко используемой и для горячих электронов. В действительности зона проводимости широкозонных диэлектриков (прозрачных в видимом диапазоне лазерного излучения) состоит из большого числа “переплетенных” подзон, и в этой ситуации законы сохранения выполняются значительно легче, так что практически все фононы могут принимать участие в нагреве электронного газа. Но даже при этом может оказаться, что существуют узкие участки фононного спектра, дающие основной вклад в электрон-фонон-фотонные столкновения. Если такие участки существуют, то и генерация избыточных фононов происходит в этих же участках спектра, что должно приводить к увеличению частоты эффективных с точки зрения поглощения фотонов электрон-фононных столкновений, что не может не отразиться на скорости развития электронной лавины.

В целом исследование процессов релаксации в фононном спектре представляет самостоятельный физический интерес.

Скорость установления равновесного распределения определяется как степенью возмущения фононного спектра, так и областью, в которой это возмущение имеет место. В связи с этим возникает необходимость в выявлении характера зависимости времени жизни фононов от их сорта и температуры кристаллической решетки T.

Одним из подходов, позволяющих описывать влияние взаимодействия фононов друг с другом на свойства кристалла, является метод функций Грина, хорошо зарекомендовавший себя в квантовой теории поля и получивший впоследствии широкое распространение в статистической физике [8–13]. Одночастичные и многочастичные температурные функции Грина вместе с вакуумной амплитудой дают возможность определить все термодинамические свойства системы при конечных температурах. Важным является и тот факт, что гриновские функции можно вычислять с помощью диаграммной техники. Если взаимодействие между квазичастицами корректно учитывается в конечном порядке теории возмущений, то в использовании фейнмановских диаграмм необходимости не возникает. Однако в рассматриваемой задаче, как это будет показано ниже, не представляется возможным опираться на теорию возмущений, использующую конечное число членов ряда виковского разложения функции Грина.

Целью настоящей работы является получение с учетом трех- и четырехфононных процессов выражения для одночастичной мацубаровской функции Грина. Она позволяет рассчитать температурные зависимости закона дисперсии и времени жизни фононов. В задачах подобного типа даже для того, чтобы провести вычисления, приводящие к качественным результатам, требуется вводить многочисленные предположения. Ниже в явном виде перечислены самые общие допущения, ограничивающие область применимости полученных выражений.

Поскольку рассмотрение касается диэлектриков, можно полагать, что время жизни фононов обусловлено лишь фонон-фононным взаимодействием, учет которого достигается удержанием ангармонических членов в выражении для гамильтониана решетки. В процессе расчетов используется допущение об идеальности кристалла (дефекты, включения, примеси отсутствуют). Считается также, что размеры кристалла достаточно велики, чтобы их влиянием на длину свободного пробега фононов можно было пренебречь.

Использование в качестве основы расчетов формализма Мацубары предполагает, что возмущение фононного спектра достаточно мало для того, чтобы оно смогло исказить зависимость времени жизни фононов от их сорта. Такая постановка задачи может иметь место, например, при исследовании рассеяния гиперзвука в диэлектриках или передачи энергии в решетку от разогретого электромагнитным полем электронного газа. Отметим, что для описания сильно неравновесных распределений необходимо использовать более общую и, к сожалению, громоздкую диаграммную технику Келдыша [11, 12].

Одночастичная мацубаровская функция Грина фонона. Гамильтониан системы взаимодействующих фононов полезно представить в следующей форме:

$$H = H_0 + H_I. \tag{1}$$

Здесь первое слагаемое — невозмущенный гамильтониан H_0 — отвечает системе невзаимодействующих фононов, второе — гамильтониан возмущения H_I — необходимо для учета взаимодействия фононов друг с другом.

Записанный в операторах рождения $b^{\dagger}_{j\vec{k}}$ и уничтожения $b_{j\vec{k}}$ фононов с поляризацией j и квазиимпульсом $\vec{k}$, невозмущенный гамильтониан из (1) имеет вид

$$H_0 = \sum_{\vec{k}j} \hbar\omega_{\vec{k}j} \left(b^{\dagger}_{\vec{k}j} b_{\vec{k}j} + \frac{1}{2} \right),$$

где $\omega_{\vec{k}j}$ — частота фонона.

Следуя работе [14], выполним стандартную процедуру квантования нормальных колебаний.

Если ограничиться рассмотрением только трех- и четырехфононных процессов, то гамильтониан возмущения можно записать следующим образом:

$$H_I = \sum_{\substack{\vec{k}\vec{k}'\vec{k}''\\ jj'j''}} V^{(3)}_{\vec{k}j\vec{k}'j'\vec{k}''j''} B_{\vec{k}j} B_{\vec{k}'j'} B_{\vec{k}''j''} + $$

$$+ \sum_{\substack{\vec{k}\vec{k}'\vec{k}''\vec{k}'''\\ jj'j''j'''}} V^{(4)}_{\vec{k}j\vec{k}'j'\vec{k}''j''\vec{k}'''j'''} B_{\vec{k}j} B_{\vec{k}'j'} B_{\vec{k}''j''} B_{\vec{k}'''j'''}. \tag{2}$$

В выражении (2) использованы обозначения:

$$B_{\vec{k}j} = b^{\dagger}_{-\vec{k}j} + b_{\vec{k}j};$$

$$V^{(3)}_{\vec{k}j\vec{k}'j'\vec{k}''j''} = \\ = \sum_{\substack{aa'a'' \\ \vec{G}}} \frac{\hbar^{3/2} N_{cell} F_{aa'a''}\left(\vec{k}', \vec{k}''\right) \cdots \vec{e}^{\,(j)}_{\vec{k}a} \otimes \vec{e}^{\,(j')}_{\vec{k}'a'} \otimes \vec{e}^{\,(j'')}_{\vec{k}''a''} \delta_{\vec{k}+\vec{k}'+\vec{k}'',\vec{G}}}{6 \cdot 2^{3/2}\sqrt{\omega_{\vec{k}j}\omega_{\vec{k}'j'}\omega_{\vec{k}''j''}}}, \quad (3)$$

$$V^{(4)}_{\vec{k}j\vec{k}'j'\vec{k}''j''\vec{k}'''j'''} = \\ = \sum_{\substack{aa'a''a''' \\ \vec{G}}} \frac{\hbar^{2} N_{cell} C_{aa'a''a'''}\left(\vec{k}', \vec{k}'', \vec{k}'''\right) \cdots \vec{e}^{\,(j)}_{\vec{k}a} \otimes \vec{e}^{\,(j')}_{\vec{k}'a'} \otimes \vec{e}^{\,(j'')}_{\vec{k}''a''} \otimes \vec{e}^{\,(j''')}_{\vec{k}'''a'''} \delta_{\vec{k}+\vec{k}'+\vec{k}''+\vec{k}''',\vec{G}}}{24 \cdot 2^{2}\sqrt{\omega_{\vec{k}j}\omega_{\vec{k}'j'}\omega_{\vec{k}''j''}\omega_{\vec{k}'''j'''}}}. \quad (4)$$

Здесь индекс a соответствует случаю решетки с базисом; $\vec{G}$ — вектор обратной решетки; $F_{aa'a''}\left(\vec{k}', \vec{k}''\right)$ и $C_{aa'a''a'''}\left(\vec{k}', \vec{k}'', \vec{k}'''\right)$ — фурье-трансформанты силовых тензоров третьего и четвертого рангов; $\vec{e}^{\,(j)}_{\vec{k}a}$ — вектор поляризации; N_{cell} — число ячеек кристалла. За выполнение закона сохранения квазиимпульса фононов в выражениях (3) и (4) отвечают функции

$$\delta_{\vec{k}+\vec{k}'+\vec{k}'',\vec{G}} = \begin{cases} 0, & \vec{k}+\vec{k}'+\vec{k}'' \neq \vec{0} \ \text{ или } \ \vec{G}; \\ 1, & \vec{k}+\vec{k}'+\vec{k}'' = \vec{0} \ \text{ или } \ \vec{G}, \end{cases}$$

$$\delta_{\vec{k}+\vec{k}'+\vec{k}''+\vec{k}''',\vec{G}} = \begin{cases} 0, & \vec{k}+\vec{k}'+\vec{k}''+\vec{k}''' \neq \vec{0} \ \text{ или } \ \vec{G}; \\ 1, & \vec{k}+\vec{k}'+\vec{k}''+\vec{k}''' = \vec{0} \ \text{ или } \ \vec{G}. \end{cases}$$

Суммирование по вектору обратной решетки $\vec{G}$ в выражениях (3) и (4) отвечает учету как нормальных процессов, так и процессов переброса. Для случая низких температур решетки U-процессы вымораживаются, т.е. в выражениях (3) и (4) можно ограничиться только множителями $\delta_{\vec{k}+\vec{k}'+\vec{k}'',\vec{0}}$ и $\delta_{\vec{k}+\vec{k}'+\vec{k}''+\vec{k}''',\vec{0}}$.

Необходимость присутствия в ангармонической составляющей гамильтониана решетки (2) менее вероятных по сравнению с трехфононными взаимодействиями четырехфононых процессов обусловлена несколькими причинами. Во-первых, гамильтониан, в котором оставлены только ангармонические члены третьего порядка, содержит меньше слагаемых в сумме по квазиимпульсам. Это связано с тем, что правила отбора накладывают на трехфононные процессы более жесткие ограничения, чем на четырехфононные. Поэтому не исключено, что заметное число слагаемых в членах четвертого порядка не будет полностью скомпенсировано меньшей вероятностью четырехфононных процессов по сравнению с трехфононными, что сделает вклады этих процессов в гамильтониан сравнимыми по величине. Другая, более основательная причина состоит в том, что в отличие от трехфононных процессов (влияние которых впервые проявляется в членах второго порядка по возмущению) четырехфононные — вносят вклад в члены первого порядка виковского разложения функции Грина D для конечных температур кристаллической решетки (усреднение $\langle\ldots\rangle$ проводится по ансамблю невзаимодействующих систем при температуре T):

$$D\left(\vec{k}', \vec{k}, \tau\right) =$$

$$= \left\langle \sum_{p=0}^{\infty} \frac{(-1)^p}{p!} \int\limits_0^\beta d\beta_1 \int\limits_0^\beta d\beta_2 \ldots \int\limits_0^\beta d\beta_p T_\tau \left\{ \tilde{H}_I(\beta_1)\tilde{H}_I(\beta_2)\ldots \right.\right.$$

$$\left.\left. \ldots \tilde{H}_I(\beta_p)\tilde{B}(\vec{k}'j', \tau)\tilde{B}^+(\vec{k}j, 0) \right\} \right\rangle \times$$

$$\times \frac{1}{\left\langle \sum\limits_{p=0}^{\infty} \frac{(-1)^p}{p!} \int\limits_0^\beta d\beta_1 \int\limits_0^\beta d\beta_2 \ldots \int\limits_0^\beta d\beta_p T_\tau \left\{ \tilde{H}_I\left(\beta_1\right) \tilde{H}_I\left(\beta_2\right) \ldots \tilde{H}_I\left(\beta_p\right) \right\} \right\rangle}, \tag{5}$$

где $\beta = \dfrac{1}{k_B T}$; $T_\tau\{\ldots\}$ — оператор хронологического упорядочения; $\tilde{O}$ — зависящий от мнимого времени τ оператор в представлении взаимодействия.

Рассмотрим несколько выражений, входящих в состав разложения (5):

$$M_0 = \left\langle T_\tau \left\{ B_{\vec{k}_2\tau_2} B_{\vec{k}_1\tau_1} \right\} \right\rangle;$$

$$M_1 = \left\langle T_\tau \left\{ H_I\left(\tau'\right) B_{\vec{k}_2\tau_2} B_{\vec{k}_1\tau_1} \right\} \right\rangle = M_1^{(4)} =$$

$$= \left\langle V^{\vec{k}\vec{k}'\vec{k}''\vec{k}'''} T_\tau \left\{ B_{\vec{k}\tau} B_{\vec{k}'\tau} B_{\vec{k}''\tau} B_{\vec{k}'''\tau} B_{\vec{k}_2\tau_2} B_{\vec{k}_1\tau_1} \right\} \right\rangle;$$

$$M_2 = \left\langle T_\tau \left\{ H_I(\tau') H_I(\tau'') B_{\vec{k}_2\tau_2} B_{\vec{k}_1\tau_1} \right\} \right\rangle = M_2^{(3,3)} + M_2^{(4,4)} =$$

$$= \left\langle V^{\vec{k}\vec{l}\vec{m}} V^{\vec{k}'\vec{l}'\vec{m}'} T_\tau \left\{ B_{\vec{k}\tau} B_{\vec{l}\tau} B_{\vec{m}\tau} B_{\vec{k}'\tau'} B_{\vec{l}'\tau'} B_{\vec{m}'\tau'} B_{\vec{k}_2\tau_2} B_{\vec{k}_1\tau_1} \right\} \right\rangle +$$

$$+ \left\langle V^{\vec{k}\vec{l}\vec{m}\vec{n}} V^{\vec{k}'\vec{l}'\vec{m}'\vec{n}'} T_\tau \left\{ B_{\vec{k}\tau} B_{\vec{l}\tau} B_{\vec{m}\tau} B_{\vec{n}\tau} B_{\vec{k}'\tau'} B_{\vec{l}'\tau'} B_{\vec{m}'\tau'} B_{\vec{n}'\tau'} B_{\vec{k}_2\tau_2} B_{\vec{k}_1\tau_1} \right\} \right\rangle;$$

$$M_3 = M_3^{(3,3,4)} + M_3^{(4,4,4)};$$

$$M_4 = M_4^{(3,3,3,3)} + M_4^{(3,3,4,4)} + M_4^{(4,4,4,4)}.$$

Здесь нижний индекс M отвечает порядку по взаимодействию, верхние индексы в скобках — числам взаимодействующих фононов в каждом конкретном акте рассеяния.

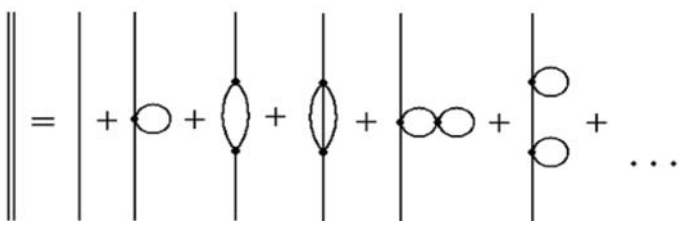
Из выражения для M_1 видно, что наиболее вероятные трехфононные процессы не вносят вклада в M_1, в то время как менее вероятные четырехфононные вносят, так как $M_1^{(4)} \neq 0$. В M_2 вносят вклад уже как четырехфононные процессы, так и трехфононные. В силу того что $M_2^{(4)}$ отвечает процессам второго порядка по взаимодействию, можно утверждать, что для всех типов кристаллов $M_1^{(4)} \gg M_2^{(4)}$. Однако учитывая, что трехфононные процессы происходят гораздо чаще четырехфононных, неясно, что больше — $M_2^{(3)}$ или $M_1^{(4)}$. Таким образом, трудно делать какие-либо выводы общего характера относительно того, как соотносятся между собой величины M_1 и M_2 (например, что всегда будет справедливо неравенство $M_1^{(4)} \gg M_2^{(3)} + M_2^{(4)}$).

Подобные ситуации, в которых невозможно ранжировать члены разложения по величине, достаточно часто встречаются при рассмотрении многочастичных задач. Как правило, определяющий гриновскую функцию ряд сходится слишком медленно, чтобы можно было воспользоваться конечной теорией возмущений, отбросив, например, слагаемые выше третьего порядка. Поэтому в таких случаях прибегают к выборочному суммированию — точному суммированию членов разложения определенного типа, вклад которых предположительно доминирует, вплоть до бесконечного порядка.

Отметим, что просуммировав лишь избранные типы слагаемых во всех порядках, мы в принципе лишаемся возможности оценить в общем случае точность результата. Этим выборочное суммирование существенно отличается от метода конечной теории возмущений, в которой предполагается, что возмущение мало, а потому абсолютные величины последовательных слагаемых заметно убывают с ростом их порядка: $M_0 \gg M_1 \gg M_2 \gg \ldots$. Зная, до какого порядка проводится суммирование, можно оценить точность приближения. Однако в рассматриваемой задаче подобное упорядочение слагаемых по величине не имеет места, поэтому нельзя воспользоваться “обычной” теорией возмущений.

Обратим внимание на то, что в $M_3^{(334)}$, $M_4^{(3344)}$ и прочих выражениях высших порядков по взаимодействию присутствуют сразу трех- и четырехфононные вершины. Данный факт дает возможность учесть взаимное влияние этих процессов релаксации и проверить для конкретных типов кристаллов степень справедливости предположения о независимости процессов рассеяния. Результатом такого допущения является широко распространенное соотношение $\Gamma = \sum_i \Gamma_i$, смысл которого заключается в том, что полная скорость релаксации фононов Γ может быть представлена в виде суммы скоростей релаксации в результате i-х механизмов рассеяния Γ_i.

Используя набор стандартных правил (изложенных, например, в [8–10]), полезно представить виковское разложение функции Грина (5) с помощью фейнмановских диаграмм:



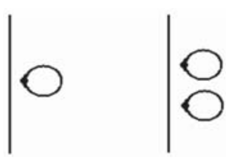
(6)

Здесь $\|$ — фурье-трансформанта одночастичной мацубаровской функции Грина фонона; $|$ — фурье-трансформанта мацубаровской функции Грина свободного фонона [9]

$$D^{(0)}_{\vec{k}j}(\omega_s) = -\frac{2k_B T \omega_{\vec{k}j}}{\hbar\left(\omega^2_{\vec{k}j} + \omega_s^2\right)},$$

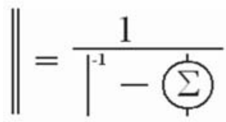
где $\omega_s = \pi s \dfrac{2k_B T}{\hbar}$ — дискретная частота; s — целое число.

Из теоремы о разложении функции Грина по связанным группам [10] следует, что при написании ряда (6) несвязанные диаграммы, например



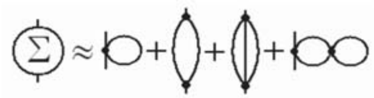
учитывать не следует, так как они необходимы лишь для избавления от знаменателя в виковском разложении функции Грина (5).

Осуществляя выборочное суммирование выражения (6), приходим к уравнению Дайсона



(7)

Здесь  — массовый оператор, при вычислении которого ограничимся несколькими неприводимыми собственно энергетическими частями вплоть до членов второго порядка по взаимодействию, дающими основной вклад:



(8)

Часто предполагается, что трехфононные процессы в значительной степени определяют релаксацию фононного спектра. В данном случае следует ограничиться в (8) лишь вторым слагаемым. Последние два слагаемых включены в (8) для последовательного учета процессов второго порядка по взаимодействию. Не исключено, что для некоторых типов кристаллов именно рассмотрение четырехфононных процессов второго порядка по взаимодействию играет решающую роль в описании процесса установления равновесия в фононной системе.

Возвращаясь к аналитическим выражениям, для диаграммы первого порядка по возмущению имеем

$$= -12\frac{\hbar}{k_B T}\sum_{\vec{k}' j'} V^{(4)}_{-\vec{k}_1 j_1 k_1 j_2 \vec{k}' j' -\vec{k}' j'} \Upsilon_1\left(\vec{k}' j'\right). \qquad (9)$$

Здесь

$$\Upsilon_1\left(\vec{k}' j'\right) = \sum_{s'} D^{(0)}_{\vec{k}' j'}\left(\omega'_s\right) = -\left(2\left\langle \hat{n}_{\vec{k}' j'}\right\rangle + 1\right),$$

где $\left\langle \hat{n}_{\vec{k}' j'}\right\rangle = \dfrac{1}{\exp\left(\dfrac{\hbar\omega_{\vec{k}' j'}}{k_B T}\right) - 1}$.

Суммы

$$\Upsilon_1\left(\vec{k}' j'\right),\ \Upsilon_2\left(\vec{k}' j' \vec{k}'' j''\right),\ \Upsilon_3\left(\vec{k}' j' \vec{k}'' j'' \vec{k}''' j'''\right),\ \Upsilon_4\left(\vec{k}' j' \vec{k}'' j'' \vec{k}''' j'''\right)$$

в выражении (9) (и далее) вычисляются с помощью соотношения

$$\lim_{N\to\infty}\sum_{s'=-N}^{+N} g\left(s'\right) = -\pi\sum_{p}\operatorname{res}_{z_p} g\left(m\right)\cdot \operatorname{ctg}\left(\pi z_p\right),$$

где z_p — полюс функции $g\left(z\right)$.

Учитывая, что величина, обратная времени релаксации, определяется как мнимая часть полюса фурье-трансформанты функции Грина, заключаем, что (9) вносит вклад лишь в смещение частоты, обусловленное фонон-фононным взаимодействием. Во время жизни фонона четырехфононные процессы в первом порядке по взаимодействию вклада не дают. Таким образом, при аппроксимации массового оператора первыми двумя диаграммами из (8), время жизни целиком определяется трехфононными взаимодействиями. Аналитическое выражение для диаграммы, отвечающей их вкладу, имеет вид

$$= 18\left(\frac{\hbar}{k_BT}\right)^2 \sum_{\substack{\vec{k}'j'\\ \vec{k}''j'}} V^{(3)}_{-\vec{k}_1 j_1 k' j' \vec{k}'' j''} V^{(3)}_{\vec{k}_1 j_2 - k' j' - \vec{k}'' j''}\Upsilon_2\left(\vec{k}' j' \vec{k}'' j''\right), \quad (10)$$

где

$$\Upsilon_2\left(\vec{k}'j'\vec{k}''j''\right) = \sum_{s's''} D^{(0)}_{\vec{k}'j'}\left(\omega'_s\right) D^{(0)}_{\vec{k}''j''}\left(\omega_{s''}\right)\delta\left(s-s'-s''\right) =$$

$$= \frac{2k_BT}{\hbar}\left[\frac{\left(2\left\langle \hat{n}_{\vec{k}'j'}\right\rangle + 1\right)\omega_{\vec{k}''j''}\left(\omega_s^2 - \omega^2_{\vec{k}'j'} + \omega^2_{\vec{k}''j''}\right)}{\left(\omega_s^2 - \omega^2_{\vec{k}'j'} + \omega^2_{\vec{k}''j''}\right)^2 + 4\omega^2_{\vec{k}'j'}\omega_s^2} + \right.$$

$$\left. + \frac{\left(2\left\langle \hat{n}_{\vec{k}''j''}\right\rangle + 1\right)\omega_{\vec{k}'j'}\left(\omega_s^2 + \omega^2_{\vec{k}'j'} - \omega^2_{\vec{k}''j''}\right)}{\left(\omega_s^2 + \omega^2_{\vec{k}'j'} - \omega^2_{\vec{k}''j''}\right)^2 + 4\omega^2_{\vec{k}''j''}\omega_s^2}\right].$$

Выпишем также выражения, определяющие вклады четырехфононных процессов во втором порядке по взаимодействию:

$$= 96\left(\frac{\hbar}{k_BT}\right)^2 \times$$

$$\times \sum_{\substack{\vec{k}'j'\\ \vec{k}''j''\\ \vec{k}'''j'''}} V^{(4)}_{-\vec{k}_1 j_1 k' j' \vec{k}'' j'' \vec{k}''' j'''} V^{(4)}_{\vec{k}_1 j_2 - k' j' - \vec{k}'' j'' - \vec{k}''' j'''}\Upsilon_3\left(\vec{k}' j' \vec{k}'' j'' \vec{k}''' j'''\right), \quad (11)$$

где

$$\Upsilon_3\left(\vec{k}'j'\vec{k}''j''\vec{k}'''j'''\right)=$$

$$=\sum_{s's''s'''}D^{(0)}_{\vec{k}'j'}\left(\omega'_s\right)D^{(0)}_{\vec{k}''j''}\left(\omega_{s''}\right)D^{(0)}_{\vec{k}'''j'''}\left(\omega_{s'''}\right)\delta\left(s-s'-s''-s'''\right)=$$

$$=-\left(\frac{\hbar}{2\pi^2k_BT}\right)^3\omega_{\vec{k}'j'}\omega_{\vec{k}''j''}\omega_{\vec{k}'''j'''}B\left(s\right).$$

Для сокращения записи в выражении для $B\left(s\right)$ будем использовать следующие обозначения:

$$r'=\frac{\hbar\omega_{\vec{k}'j'}}{2\pi k_BT},\quad r''=\frac{\hbar\omega_{\vec{k}''j''}}{2\pi k_BT},\quad r'''=\frac{\hbar\omega_{k\vec{'''}j'''}}{2\pi k_BT}.$$

Тогда

$$B\left(s\right)=\frac{\pi^2}{2}\left\{\frac{\left(2\left\langle\hat{n}_{k\vec{''}j''}\right\rangle+1\right)\left(2\left\langle\hat{n}_{k\vec{'''}j'''}\right\rangle+1\right)}{r''r'''}\times\right.$$

$$\times\ \mathrm{Re}\left[\frac{1}{s+ir'+ir''-ir'''}\cdot\frac{1}{s-ir'+ir''-ir'''}+\right.$$

$$\left.+\frac{1}{s+ir'+ir''+ir'''}\cdot\frac{1}{s-ir'+ir''+ir'''}\right]+$$

$$+\frac{\left(2\left\langle n_{\vec{k}'j'}\right\rangle+1\right)\left(2\left\langle n_{k\vec{''}j''}\right\rangle+1\right)}{r'r''}\mathrm{Re}\left[\frac{1}{s-ir'+ir'''+ir'''}\cdot\frac{1}{s-ir'+ir''-ir'''}+\right.$$

$$\left.+\frac{1}{s+ir'+ir''+ir''}\cdot\frac{1}{s+ir'+ir''-ir''}\right]+$$

$$+\frac{\left(2\left\langle\hat{n}_{\vec{k}'j'}\right\rangle+1\right)\left(2\left\langle\hat{n}_{k\vec{'''}j'''}\right\rangle+1\right)}{r'r'''}\mathrm{Re}\left[\frac{1}{s-ir'+ir''+ir'''}\cdot\frac{1}{s-ir'-ir''+ir'''}+\right.$$

$$\left.+\frac{1}{s+ir'+ir''+ir''}\cdot\frac{1}{s+ir'-ir''+ir''}\right]-$$

$$\left.-\ 4\frac{3s^4-r'^4-r'''^4-r''^4+2s^2\left(r'^2+r''^2+r'''^2\right)+2\left(r'^2r''^2+r'^2r'''^2+r'''^2r''^2\right)}{\begin{pmatrix}s^4+r'^4+r'''^4+r''^4+2s^2\left(r'^2+r''^2+2r'''^2\right)-\\-2\left(r'^2r''^2+r'^2r'''^2+r'''^2r''^2\right)\end{pmatrix}^2+\left(8sr'r''r'''\right)^2}\right\};$$

 $$= 24\left(\frac{\hbar}{k_BT}\right)^2 \times$$

$$\times \sum_{\substack{\vec{k}'j'\\ \vec{k}''j''\\ \vec{k}'''j'''}} V^{(4)}_{-\vec{k}_1 j_1 k'j' - \vec{k}'''j'''\vec{k}_1 j_2} V^{(4)}_{-\vec{k}_1 j_1 k''j'' - \vec{k}''j''\vec{k}'''j'''} \Upsilon_4\left(\vec{k}'j'\vec{k}''j''\vec{k}'''j'''\right), \quad (12)$$

где

$$\Upsilon_4\left(\vec{k}'j'\vec{k}''j''\vec{k}'''j'''\right) = \sum_{s's''} D^{(0)}_{\vec{k}'j'}\left(\omega'_s\right) D^{(0)}_{\vec{k}''j''}\left(\omega_{s''}\right) D^{(0)}_{\vec{k}'''j'''}\left(\omega_{s''}\right) =$$

$$= -\frac{2\omega_{\vec{k}''j''}\omega_{\vec{k}'''j'''}k_BT}{\hbar}\,\frac{2\left\langle \hat{n}_{\vec{k}'j'}\right\rangle + 1}{\omega^2_{\vec{k}''j''} - \omega^2_{\vec{k}'''j'''}}\left(\frac{2\left\langle \hat{n}_{\vec{k}''j''}\right\rangle + 1}{\omega_{\vec{k}''j''}} - \frac{2\left\langle \hat{n}_{\vec{k}'''j'''}\right\rangle + 1}{\omega_{\vec{k}'''j'''}}\right).$$

Подставляя соотношения (8)–(12) в уравнение Дайсона (7), приходим к выражению, определяющему фурье-трансформанту одночастичной мацубаровской функции Грина фонона. Полученный результат, очевидно, не может быть записан в квазичастичном виде $\dfrac{1}{\omega_s - \Omega_{\vec{k}j} + i\Gamma_{\vec{k}j}}$ (здесь $\Omega_{\vec{k}j}$ — перенормированная частота фонона, $\Gamma_{\vec{k}j}$ — величина, обратная времени жизни фонона типа $\vec{k}j$). Тем не менее действительные части полюсов функции (7) будут являться перенормированными частотами, а мнимые — временами жизни фононов, отвечающими каждой появившейся в результате взаимодействия ветви фононного спектра.

Выводы. Получено общее выражение, определяющее одночастичную функцию Грина фонона для конечных температур. В зависимости от роли, которую играют рассматриваемые процессы рассеяния в установлении равновесия, можно пользоваться различными аппроксимациями массового оператора. Пользуясь соотношениями (7)–(12), можно проводить численные оценки времени жизни фононов в диэлектриках, обусловленного трех- и четырехфононными процессами, а также перенормировать их энергетический спектр.

Суммирование наиболее значимых диаграмм во всех порядках позволяет с помощью полученных выражений проверить, насколько справедливо предположение о независимости процессов рассеяния для заданного типа кристалла. Отметим, что этого не удается сделать, если для получения мацубаровской функции Грина использовать конечную теорию возмущений.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. К у л е е в И. Г., К у л е е в И. И., И н ю ш к и н А. В., О ж о г и н В. И. // ЖЭТФ. – 2005. – № 2(8). – С. 128.
2. Л е м а н о в В. В., С м о л е н с к и й Г. А. // УФН. – 1972. – № 3. – С. 108.
3. П л е х а н о в В. Г.// УФН. – 2003. – № 7. – С. 173.
4. H e p p l e s t o n e S. P., S r i v a s t a v a G. P. // Phys. Rev. B 74, 165420, 2006.
5. W a n g J. -S., Z e n g N., W a n g J., G a n C. K. // Phys. Rev. E 75, 061128, 2007.
6. G u Y., C h e n Y. // Phys. Rev. B 76, 134110, 2007.
7. X u Y., W a n g J. -S., D u a n W., G u B. -L., L i B. // Phys. Rev. B 78, 224303, 2008.
8. А л е к с е е в А. И. // УФН. – 1961. – № 1. – С. 73.
9. А б р и к о с о в А. А., Г о р ь к о в Л. П., Д з я л о ш и н с к и й И. Е. Методы квантовой теории поля в статистической физике. – М.: Физматгиз, 1962. – 444 с.
10. М а т т у к Р. Фейнмановские диаграммы в проблеме многих тел. – М.: Мир, 1969. – 366 с.
11. К е л д ы ш Л. В. // ЖЭТФ. – 1964. – № 47. – С. 1515.
12. Л и ф ш и ц Е. М., П и т а е в с к и й Л. П. Физическая кинетика. – М.: Физматлит, 2002. – 536 с.
13. К в а с н и к о в И. А. Термодинамика и статистическая физика. В 4 т. Т. 4. Квантовая статистика: Учеб. пособие. – М.: КомКнига, 2005. – 352 с.
14. З а й м а н Д ж. Принципы теории твердого тела. – М.: Мир, 1966. – 416 с.

Статья поступила в редакцию 10.03.2010

Александр Михайлович Никифоров родился в 1985 г., в 2009 г. окончил МГТУ им. Н.Э. Баумана. Аспирант кафедры “Физика” МГТУ им. Н.Э. Баумана. Автор девяти научных работ в области компьютерной алгебры и взаимодействия лазерного излучения с веществом.

A.M. Nikiforov (b. 1985) graduated from the Bauman Moscow State Technical University in 2009. Post-graduate of “Physics” department of the Bauman Moscow State Technical University. Author of 9 publications in the field of computer algebra and interaction between laser radiation and substance.